UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ciencias y Humanidades

DETERMINACION DE LAS RELACIONES DE DISPERSION PARA UN ELECTRON EN MOVIMIENTO EN UN CRISTAL MONODIMENSIONAL, UTILIZANDO EL METODO DE LA TRANSFORMADA DE LAPLACE

ALEJANDRO GALO ROLDAN

Trabajo de investigación presentado para optar el grado académico de Licenciatura en Física

Guatemala

1981

Vo. Bo.:

(f)________________________________
Dr. Jorge Antillón Matta
Asesor

Tribunal:

(f)________________________________
Dr. Jorge Antillón Matta

(f)________________________________
Licenciado Ricardo Antillón

(f)________________________________
Licenciado José Luis Cofiño

Fecha de aprobación:

DETERMINACION DE LAS RELACIONES DE DISPERSION PARA UN ELECTRON EN MOVIMIENTO EN UN CRISTAL MONODIMENSIONAL, UTILIZANDO EL METODO DE LA TRANSFORMADA DE LAPLACE

A mis padres

CONTENIDO

Páginas

1. INTRODUCCION

En un primer análisis parece que un electrón de baja energía tendrá gran dificultad en atravesar una red cristalina sólida. Los átomos se encuentran sumamente juntos, con sus centros separados unos pocos angstroms y el diámetro efectivo del átomo para scattering del electrón es cercano a un angstrom. Esto es, los átomos son grandes comparados con su espaciamiento, de donde se podría esperar que el camino libre medio entre colisiones fuese del orden de algunos angstroms, por lo tanto, sería de esperarse que el electrón chocara con cualquier átomo casi inmediatamente.

No obstante es un fenómeno muy frecuente en la naturaleza que los electrones viajan en una red perfecta suave y fácilmente como si estuviesen en el vacío. Esto sucede en los metales y por ello conducen la electricidad tan fácilmente. En el aspecto técnico este fenómeno ha permitido el desarrollo de muchos dispositivos prácticos como es el que un transistor imite a un tubo de radio. En un tubo de radio los electrones se mueven libremente a través del vacío, mientras que en un transistor lo hacen a través de una red cristalina.

En este trabajo se estudiará la conducción de un electrón en una red cristalina monodimensional periódica, por lo que no se considerarán los efectos de scattering. Se hará un tratamiento mecánico - cuántico de estados estacionarios, lo que significará que tendremos un problema de valores propios. Se pondrá especial atención en las relaciones de dispersión, o sea, las relaciones entre la energía y el momentum lineal utilizando el método de la Transformada de Laplace. El método será aplicado a un electrón como partícula libre - ignorando los efectos de la red - y posteriormente a los casos mono, di y triatómico.

2. TRANSFORMADA DE LAPLACE

2.1. Transformadas integrales lineales

Se define la transformada o transformada integral, $T\{F\}$ de una función $F(t)$ por medio de la ecuación integral

$$T\{F\} = \int_{a}^{b} F(t)\, K(t,\lambda)\, dt = f(\lambda) \qquad (2.1.1.)$$

siendo $K(t,\lambda)$ una función conocida de λ y t denominada núcleo o Kernel de la transformada.

Cuando los límites sean finitos, diremos que $T\{F\}$ es la transformada finita de $F(t)$. Sin embargo, para el trabajo nos interesan transformadas en las que "a" es cero y "b" es infinito.

De acuerdo a la clase de funciones F y K que sean escogidas, se deben de restringir los valores del parámetro λ para asegurar así la existencia de la integral (2.1.1.) y también para asegurar la existencia de la transformada inversa, o sea la transformada T^{-1} tal que

$$T^{-1}\{f(\lambda)\} = F(t)$$

El espacio de funciones al cual pertenece F, es un espacio lineal sólo si $AF(t) + BG(t)$ pertenece al espacio, para toda F y G pertenecientes al mismo espacio y para cada par de escalares A y B.

Podemos decir que T es una transformada lineal si y sólo si

$$T\{AF + BG\} = AT\{F\} + BT\{G\}$$
$$= Af(\lambda) + Bg(\lambda) \qquad (2.1.2.)$$

Si la transformada inversa $T^{-1}\{f\}$ es única, la condición de linearidad (2.1.2.) puede ser escrita como

$$T^{-1}\{Af + Bg\} = AT^{-1}\{f\} + BT^{-1}\{g\}$$
$$= AF + BG$$

En adelante veremos las condiciones bajo las cuales una transformada inversa es única.

2.2 Definición de la transformada de Laplace

Si en la ecuación integral (2.1.1.), $K(t,\lambda)$ es igual a $e^{-\lambda t}$ y además los límites "a" y "b" son cero e infinito, respectivamente, entonces la ecuación

$$T\{F\} = \int_0^{\infty} e^{-\lambda t} F(t)\, dt = f(\lambda)$$

se conoce como la Transformada de Laplace de la función $F(t)$ a la cual por nomenclatura la llamaremos $L\{F\}$ o bien $L\{F(t)\}$.

De esta manera la función $f(\lambda) = L\{F\}$ es la transformada de Laplace o la imagen de la función. De las propiedades de la integral se sigue casi inmediatamente que la transformada de Laplace es lineal, esto es:

$$L\{AF + BG\} = AL\{F\} + BL\{G\}$$

donde F y G son funciones de t y A, B son escalares.

2.3. Funciones seccionalmente continuas y de orden exponencial

Una función $F(t)$ se llama seccionalmente continua sobre el intervalo cerrado $a \leq t \leq b$ si este intervalo puede dividirse en un número finito de subintervalos $c \leq t \leq d$ tal que en cada uno de los subintervalos:

1. $F(t)$ es continua en el intervalo abierto $c < t < d$.
2. $F(t)$ tiende a un límite cuando t se aproxima a cada extremo del intervalo desde adentro de él, esto es:

$$\lim_{t \to c^+} F(t) \quad \text{y} \quad \lim_{t \to d^-} F(t)$$

Por otra parte, diremos que una función $F(t)$ es de orden exponencial cuando $t \to \infty$ si existen constantes M, b con el valor fijo de t, to, tal que

$$|F(t)| < Me^{bt} \qquad t \geq to$$

Si "b" está enfatizada diremos que $F(t)$ es del orden de e^{bt} cuando $t \to \infty$ y lo escribimos $F(t)$ o e^{bt}, $t \to \infty$.

2.4. Teorema acerca de la existencia de la Transformada de Laplace

Teorema 2.4.1.: si $F(t)$ es seccionalmente continua sobre todo intervalo finito en el rango $t \geq 0$ y si $F(t)$ es de orden exponencial, o sea $F(t)$ o e^{bt} cuando $t \to \infty$ la transformada de Laplace $L\{F(t)\}$ existe para $\lambda > b$.

Demostración: para demostrar el teorema anterior, basta probar que la integral

$$\int_0^\infty e^{-\lambda t} F(t)\, dt$$

converge para $\lambda > b$. Descomponiendo la integral infinita en dos partes, tenemos:

$$\int_0^\infty e^{-\lambda t} F(t)\, dt = \int_0^M e^{-\lambda t} F(t)\, dt + \int_M^\infty e^{-\lambda t} F(t)\, dt$$

donde M no es un punto de discontinuidad.

La primera integral del miembro de la derecha existe, ya que cumple con la primera hipótesis (ya que si $F(t)$ es seccionalmente continua en el intervalo $0 \leq t \leq M$ entonces

$\int_0^M e^{-\lambda t} F(t)\, dt$ existe)

Por lo tanto, la existencia de $L\{F(t)\} = f(\lambda)$ depende únicamente de la convergencia de la segunda integral. Por la hipótesis de que $F(t)$ es de orden exponencial, tenemos que

$$\left| e^{-\lambda t} F(t) \right| \leq K\, e^{-\lambda t}\, e^{bt} = K e^{(b-\lambda)t}$$

donde vemos que $f(\lambda)$ existe si

$$\int_{M}^{\infty} e^{(b - \lambda)t} \, dt \qquad \text{es convergente.}$$

Vemos claramente que esta integral converge cuando $b - \lambda < 0$ esto es, cuando $b < \lambda$, lo cual prueba el teorema 2.4.1.

2.5. Transformada de derivadas

Integrando por partes tenemos:

$$L\left\{F'(t)\right\} = \int_0^\infty e^{-\lambda t} F'(t)\,dt$$

$$= e^{-\lambda t} F(t)\Big|_0^\infty + \lambda \int_0^\infty e^{-\lambda t} F(t)\,dt$$

Si $F(t)$ es de orden exponencial $e^{\alpha t}$ esto es

$$\lim_{t\to\infty} e^{-\alpha t} F(t) = 0$$

el primer término de la expresión es $-F(0)$ si $\lambda > \alpha$ mientras que el segundo término no es más que $\lambda L\left\{F(t)\right\} = \lambda f(\lambda)$ de donde

$$L\left\{F'(t)\right\} = \lambda f(\lambda) - F(0)$$

Sin embargo, la fórmula anterior no es correcta cuando $F'(t)$ tiene discontinuidades. El siguiente teorema mostrará a qué está sujeta realmente nuestra fórmula.

Teorema 2.5.1.: sea $F(t)$ continua con una derivada $F'(t)$ seccionalmente continua sobre cada intervalo finito $0 \leq t \leq T$ también sea $F(t)$ de orden $e^{\alpha t}$ cuando $t \to \infty$, así cuando $\lambda > \alpha$ la transformada de $F'(t)$ existe y

$$L\left\{F'(t)\right\} = \lambda L\left\{F(t)\right\} - F(0)$$

Dado que $F(t)$ es continua en $t = 0$ el número $F(0)$ es el mismo que $F(0^+)$ o sea el límite de $F(t)$ cuando t se aproxima a cero por la derecha.

Para probar el teorema notamos primero que:

$$L\{F'(t)\} = \lim_{T\to\infty} \int_0^T e^{-\lambda t} F'(t)\,dt$$

si $t_1, t_2, \ldots, t_n$ denotan los valores de t entre 0 y T para los cuales $F'(t)$ es discontinua, tenemos:

$$\int_0^T e^{-\lambda t} F'(t)\,dt = \int_0^{t_1} e^{-\lambda t} F'(t)dt + \int_{t_1}^{t_2} e^{-\lambda t} F'(t)\,dt + \ldots + \int_{t_n}^{T} e^{-\lambda t} F'(t)\,dt$$

después de integrar cada término por partes, tenemos:

$$\int_0^T e^{-\lambda t} F'(t)\,dt = e^{-\lambda t} F(t)\Big|_0^{t_1} + e^{-\lambda t} F(t)\Big|_{t_1}^{t_2} + \ldots + e^{-\lambda t} F(t)\Big|_{t_n}^{T} + \lambda \int_0^T e^{-\lambda t} F(t)\,dt$$

Ahora, $F(t)$ es continua, o sea $F(t_1^-) = F(t_1^+)$, etc. y por lo tanto

$$\int_0^T e^{-\lambda t} F'(t)\,dt = -F(0) + e^{-\lambda T} F(T) + \lambda \int_0 e^{-\lambda t} F(t)\,dt$$

Dado que $F(t)$ es de orden exponencial, se cumple que $|F(t)| \leq Me^{\alpha t}$ para algunas constantes α y M y para t suficientemente grande. De aquí se sigue que:

$$\left|e^{-\lambda T} F(T)\right| < M\, e^{-(\lambda-\alpha)T}$$

Dado que $\lambda > \alpha$, el producto se desvanece cuando $T \to \infty$ y también la integral tiende a $L\{F(t)\}$ cuando $T \to \infty$, por lo tanto queda probado que:

$$L\{F'(t)\} = \lim_{T\to\infty} \int_0^T e^{-\lambda T} F'(t)\,dt$$

$$= -F(0) + \lambda L\{F(t)\}$$

Si F es continua cuando $t \geq 0$ excepto por una discontinuidad finita en to donde to ≥ 0, entonces la fórmula del teorema 2.5.1. debe ser reemplazada por

$$L\{F'(t)\} = \lambda f(\lambda) - F(0) - \left[F(to^{+}) - F(to^{-})\right] e^{-\lambda to}$$

esto, si las demás condiciones son mantenidas como en el teorema 2.5.1.

Para obtener la transformada de la derivada de segundo orden, F'', podemos aplicar el teorema 2.5.1. a la función F'. Si F y F' son continuas cuando $t \geq 0$ y de orden exponencial y también F'' es seccionalmente continua en cada intervalo acotado, entonces

$$L\{F''(t)\} = \lambda L\{F'(t)\} - F'(0)$$

Este mismo procedimiento se puede seguir para calcular la transformada de la derivada de cualquier orden. Así

$$L\{F^{n}(t)\} = \lambda L\{F^{(n-1)}(t)\} - F^{(n-1)}(0)$$

y en forma sucesiva podemos obtener $L\{F^{(n-1)}(t)\}$ en términos de $L\{F^{(n-2)}(t)\}$ y llegar al resultado deseado.

<u>Teorema</u> <u>2.5.2.</u>: sea f y cada una de sus derivadas de orden n - 1 funciones continuas cuando $t \geq 0$ y de orden exponcncial ($F(t)$ o $e^{\alpha t}$, $t \to \infty$) y sea $F^{n}(t)$ seccionalmente continua en cada intervalo $0 < t < T$. La transformada de la derivada $F^{n}(t)$ existe cuando $\lambda > \alpha$ y se cumple que

$$L\{F^{n}(t)\} = \lambda^{n} f(\lambda) - \lambda^{n-1} F(0) - \lambda^{n-2} F'(0) - \lambda^{n-3} F''(0) - \ldots - F^{n-1}(0)$$

El teorema anterior puede ser probado usando el teorema 2.5.1. e inducción. Suponga que la transformada es válida cuando n se toma como k, donde $0 < k < n$

$$L\left\{F^{k+1}(t)\right\} = L\left\{(F^k(t))'\right\} = \lambda L\left\{F^k(t)\right\} - F^k(0)$$

$$= \lambda^{k+1} f(\lambda) - \lambda^k F(0) - \lambda^{k-1} F'(0)$$

$$- \lambda^{k-2} F''(0) \; . \; . \; . - F^k(0)$$

con lo cual queda demostrado el teorema 2.5.2.

2.6. La Transformada Inversa

Se denotará como $L^{-1}\{f(\lambda)\}$ a la función cuya transformada de Laplace es $f(\lambda)$, entonces podemos escribir

$$L\{F(t)\} = f(\lambda)$$

$$F(t) = L^{-1}\{f(\lambda)\}$$

Esta correspondencia entre las funciones $f(\lambda)$ y $F(t)$ es llamada la Transformada Inversa de Laplace, siendo $F(t)$ la transformada inversa de $f(\lambda)$. Realmente la transformada inversa de Laplace no es única. Por ejemplo, la función $F_1(t) = e^{kt}$ es una transformada inversa de $1/(\lambda - k)$, pero por otra parte la función

$$F_2(t) = e^{kt} \qquad 0 < t < 2 \quad \text{o} \quad t > 2$$

$$= 1 \qquad t = 2$$

tiene la misma transformada inversa. El gráfico de esta última función es de la forma

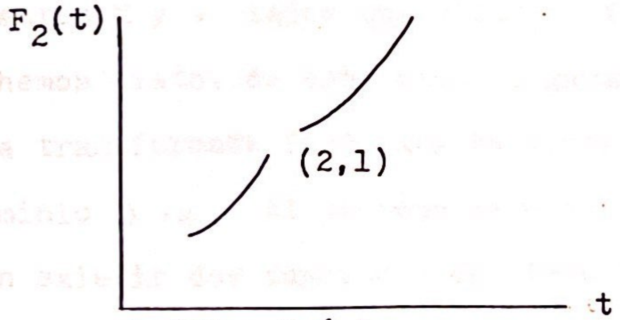

Gráfico 2.6.1.

entonces al calcular la transformada de Laplace, obtenemos

$$L\{F_2(t)\} = \int_0^\infty e^{-\lambda t} F_2(t)\, dt$$

$$= \int_0^2 e^{-\lambda t} e^{kt}\, dt + \int_2^\infty e^{-\lambda t} e^{kt}\, dt$$

$$= 1/(\lambda - k)$$

O sea que:

$$L\left\{F_2(t)\right\} \quad = \quad L\left\{e^{kt}\right\}$$

lo mismo hubiera ocurrido con cualquier función en la cual hubiéramos introducido un número finito de discontinuidades. Existe, sin embargo, un teorema de unicidad de la transformada inversa, pero antes de hablar del mismo definamos una clase de funciones de orden exponencial.

Sea $\mathcal{E}$ la clase que denota el conjunto de todas las funciones F(t) definidas en el semieje $t > 0$ seccionalmente continuas en cada intervalo acotado y definamos en cada punto donde F es discontinua como el valor medio de los límites por la izquierda y por la derecha, esto es

$$F(to) \;=\; (1/2)\left[F(to^{+}) \;+\; F(to^{-})\right]$$

También para cada función individual $F \in \mathcal{E}$ existen las constantes M y α tales que $|f(t)| < M\,e^{\alpha t}$ cuando $t > 0$. Como hemos visto, de esta manera, garantizamos la existencia de una transformada $f(\lambda)$ para la función F definida sobre el dominio $\lambda > \alpha$. El teorema de unicidad establece que no pueden existir dos funciones de clase $\mathcal{E}$ que puedan tener la misma transformada. Así, si $f(\lambda)$ es la transformada de alguna función F(t) de clase $\mathcal{E}$, F(t) es la única transformada inversa de $f(\lambda)$ en $\mathcal{E}$.

También es importante hacer notar que no toda función de λ es una transformada. La clase de funciones que son transformadas de funciones $F(t)$ están limitadas a ciertas condiciones tales como el hecho de que f sea continua en el semieje $\lambda > \alpha$ y que $f(\lambda)$ tienda a cero cuando λ tienda a infinito.

Si $L\{F\}$ y $L\{G\}$ existen, entonces:

$$L\{AF(t) + BG(t)\} = Af(\lambda) + Bg(\lambda)$$

donde A y B son constantes. Restrinjamos las funciones de t a las de clase $\mathcal{E}$ y las funciones de λ a las transformadas de tales funciones. Así garantizamos la unicidad de la transformada inversa y la propiedad de linealidad puede ser escrita de la siguiente manera:

$$L^{-1}\{Af(\lambda) + Bg(\lambda)\} = AF(t) + BG(t)$$
$$= AL^{-1}\{f(\lambda)\} + BL^{-1}\{g(\lambda)\}$$

por lo tanto L^{-1} también es una transformación lineal de funciones.

Scanned with CamScanner

2.7. Un teorema de sustitución

Sea $F(t)$ una función tal que su integral de Laplace converge cuando $\lambda > \alpha$. Reemplazando el argumento de la transformada $f(\lambda)$ por $f(\lambda - a)$ donde a es una constante tenemos:

$$f(\lambda - a) = \int_0^\infty e^{-(\lambda - a)t} F(t)\, dt$$

$$= \int_0^\infty e^{-\lambda t} e^{at} F(t)\, dt$$

cuando $\lambda - a > \alpha$. Por lo tanto:

$$f(\lambda - a) = L\left\{e^{at} F(t)\right\}$$

Ahora podemos establecer esta simple, pero importante propiedad como un teorema.

<u>Teorema 2.7.1.</u>: la sustitución de $\lambda - a$ por la variable en la transformada corresponde a la multiplicación de la función objeto $F(t)$ por la función e^{at}.

2.8. La traslación de F(t)

Ya se vio en la sección anterior que la multiplicación de la función objeto por una función exponencial corresponde a una sustitución lineal de λ en la transformada. Ahora se verá lo que produce la multiplicación de la transformada por una función exponencial.

Sea $F(t)$ una función que tiene como transformada a $f(\lambda)$

$$f(\lambda) = \int_0^\infty e^{-\lambda t} F(t)\, dt$$

Así

$$e^{-\lambda b} f(\lambda) = \int_0^\infty e^{-\lambda(b + t)} F(t)\, dt$$

donde b es una constante que supondremos positiva. Haciendo la sustitución $t + b = \tau$ podemos escribir la última integral de la siguiente manera

$$\int_0^\infty e^{-\lambda\tau} F(\tau - b)\, d\tau = \int_0^b 0\, d\tau + \int_b^\infty e^{-\lambda\tau} F(\tau - b)\, d\tau$$

Definamos la función $F_b(t)$ de la siguiente manera:

$$F_b(t) = 0 \qquad \text{cuando} \quad 0 < t < b$$

$$F_b(t) = F(t - b) \qquad \text{cuando} \quad t > b$$

entonces podemos escribir

$$f(\lambda)\, e^{-\lambda b} = \int_0^\infty e^{-\lambda\tau} F_b(\tau)\, d\tau$$

esta última propiedad la podemos establecer como un teorema.

Teorema 2.8.1.: si $f(\lambda) = L\{F(t)\}$ para cualquier constante positiva b, $e^{-\lambda b} f(\lambda) = L\{F_b(t)\}$, donde $F_b(t)$ es la función definida anteriormente.

Veamos los siguientes gráficos

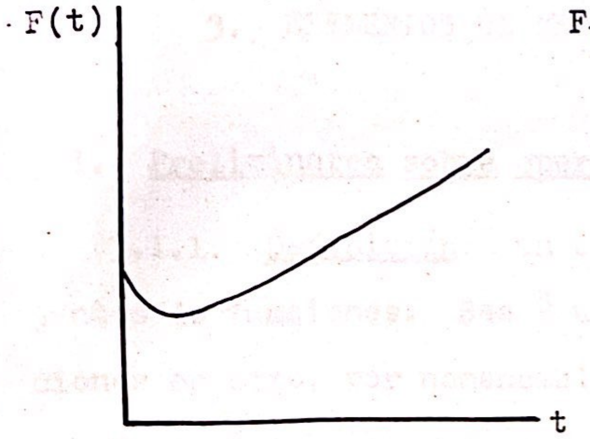

Gráfico 2.8.1.

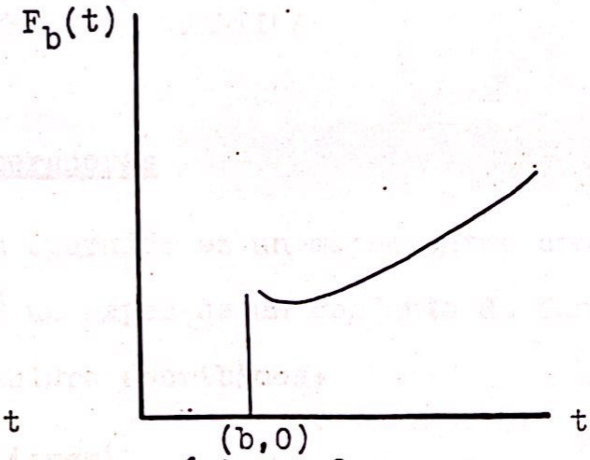

Gráfico 2.8.2.

Vemos aquí que el gráfico de la función $F_b(t)$ es obtenido trasladando el gráfico de $F(t)$ a la derecha una distancia de b unidades, y haciendo $F_b(t)$ igual a cero entre $t = 0$ y $t = b$.

La función de salto, S_b, también conocida como función escalón, definida así

$$S_b \begin{cases} S(t - b) = 1 & \text{si } t > b \\ S(t - b) = 0 & \text{si } t < b \end{cases}$$

puede ser utilizada para escribir

$F_b(t) = S_b(t)\, F(t - b)$

por ejemplo, si $F(t) = \text{Sen } kt$

$F_b(t) = S_b(t) \text{ Sen } k(t - b) = L^{-1}\left\{ke^{-\lambda b}/(\lambda^2 + k^2)\right\}$

esta última igualdad será útil para el trabajo posterior.

3. ELEMENTOS DE MECANICA CUANTICA

3.1. Preliminares sobre operadores

3.1.1. Definición: un operador es un mapeo entre conjuntos de funciones. Sea $\hat{P}$ un mapeo de un conjunto de funciones en otro, por nomenclatura escribimos:

$$\hat{P}: \{\text{funciones}\} \longrightarrow \{\text{funciones}\}$$

3.1.2. Clases de operadores:

3.1.2.1. Operadores algebraicos: entre ellos tenemos la raíz cuadrada, la exponencial, la logarítmica, una función que multiplica, etc.

3.1.2.2. Operadores diferenciales: derivada de orden m: $\dfrac{d^m}{dx^m}$

3.1.2.3. Operadores integrales: son operadores del tipo $\int K(x,y)\, dx = \hat{P}(y)$ tal que $\hat{P}(y) f(y) = \int K(x,y)\, dx\, f(x)$. A la función $K(x,y)$ se le llama Kernel.

3.1.2.4. Operadores lineales: un operador $\hat{P}$ tal que $\hat{P}\,(af + bg) = a\,\hat{P}f + b\,\hat{P}g$ donde a y b son escalares y f y g son funciones complejas, se llama un operador lineal. Estos operadores son útiles en Mecánica Cuántica ya que sirven para estudiar superposición de ondas.

3.1.3. Problema de valores propios: sea $\hat{P}$ un operador tal que $\hat{P}\ f(x) = p\ f(x)$, donde p pertenece a los complejos. Decimos entonces que el problema es de valores propios. A $f(x)$ se le conoce como la función propia de $\hat{P}$ y a p como el valor propio de $\hat{P}$.

El problema fundamental de Mecánica Cuántica para estados estacionarios es un problema de valores propios.

3.2. Obtención de la Ecuación de Schrödinger

Lo que necesitamos describir es un sistema físico con una función matemática que tenga características de onda. Contamos con las relaciones de De Broglie - Einstein:

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (3.2.1.)$$

$$E = h\nu \qquad (3.2.2.)$$

donde λ es la longitud de onda, E es la energía, h es la constante de Planck, p es el momentum lineal y ν es la frecuencia.

Sea: $w = 2\pi\nu$

$\hbar = (2\pi/h)^{-1}$

$k = 2\pi/\lambda$

$\vec{K} = K_x\,\hat{x} + K_y\,\hat{y} + K_z\,\hat{z}$

$K_{x_i} = 2\pi/\lambda_i$

Consideremos el caso más sencillo que es el de una partícula libre y una superposición de muchas ondas de la forma:

$$\Psi(x,t) = \sum_i A_i \operatorname{Cos} K_i x \operatorname{Cos} w_i t$$

con oscilación en el espacio y en el tiempo. El coeficiente A_i da la importancia de la contribución de una longitud de onda dada.

En t = 0 y x = 0 todas las ondas se superponen constructivamente.

Si todas las ondas tuvieran la misma longitud de onda, todas interferirían constructivamente, pero λ cambia y por ello las ondas cada vez interfieren más.

La superposición más general de carácter complejo es de la forma $\exp(i(kx - wt))$, que es una onda compleja que oscila en el espacio y en el tiempo.

$$\exp(i(kx - wt)) = \mathrm{Cos}(kx - wt) + i\,\mathrm{Sen}(kx - wt)$$

Entonces podemos escribir

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(kx-wt)}\,dk = \Psi_{(x,t)}$$

para una dimensión.

Para tres dimensiones, tenemos

$$\Psi_{(\bar{r},t)} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int A(\bar{k})\, e^{i(\bar{k}\cdot\bar{r} - wt)}\, d^3k$$

Se procederá a encontrar la ecuación diferencial que es satisfecha por $\Psi(\bar{r},t)$. Sustituyendo $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ y $E = \hbar w$ en la integral, tenemos

$$\Psi_{(\bar{r},t)} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \Phi(\bar{p})\, e^{i(\bar{p}\cdot\bar{r} - Et)/\hbar}\, d^3p \qquad (3.2.3.)$$

de aquí podemos obtener

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\bar{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\, i\hbar\left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int \Phi(\bar{p})\, E(\bar{p})\, e^{i(\bar{p}\cdot\bar{r} - Et)/\hbar}\, d^3p$$

Ahora $E(\bar{p}) = p^2/2m$

Además

$$\nabla e^{i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar} = \frac{ip}{\hbar} e^{i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar}$$

$$\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 e^{i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar} = -\frac{\hbar^2 p^2}{2m\hbar^2} e^{i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar} = -E(\bar{p})\, e^{i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar}$$

Así tenemos que

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\bar{r},t) = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\phi(\bar{p})\, e^{i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar}\, e^{-Et/\hbar}\, d^3p\right]$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\phi(\bar{p})\, e^{-Et/\hbar}\,\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 e^{i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar}\, d^3p$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\phi(\bar{p})\,(-E(\bar{p}))\, e^{(i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar - iEt/\hbar)}\, d^3p$$

$$= \frac{-1}{(2\pi\hbar)^3}\int\phi(\bar{p})\, E(\bar{p})\, e^{i(\bar{p}\cdot\bar{r}-Et)/\hbar}\, d^3p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\bar{r},t)$$

Por lo tanto

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\bar{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\bar{r},t)$$

que no es más que la ecuación de Schrödinger para una partícula libre.

3.3. Los postulados de la Mecánica Cuántica

3.3.1. Definiciones

3.3.1.1. Variables dinámicas: una variable dinámica es cualquier función de $\vec{p}$, $\vec{r}$ y t.

3.3.1.2. Observable: un observable es cualquier variable dinámica medible, en principio, en el laboratorio. Clásicamente todas las variables dinámicas son observables, pero cuánticamente no. Ejemplos: la función de onda, el momentum en un punto, la energía en un instante.

3.3.2. Postulado I: este es el postulado de existencia y probabilidad, que dice que para cualquier sistema físico existe una función Ψ que depende de q, σ y t que contiene toda la información obtenible del sistema.

q son las coordenadas del espacio.

t es el tiempo.

σ son las coordenadas intrínsecas, esto es coordenadas de grados de libertad internos, en particular el spin.

La interpretación física de Ψ es que $\Psi^*\Psi\, dV$ es el elemento diferencial de probabilidad para encontrar el sistema de coordenadas entre q y $q + dq$ y a un tiempo t. Ψ^* es la función conjugada de Ψ y dV es el elemento de volumen, dado en coordenadas curvilíneas ortogonales como

$dV = \prod_i h_i\, dq_i$ donde h_i son los factores de escala.

Si $\Psi \Psi^*$ se interpreta como un elemento diferencial de probabilidad debe cumplirse que

$$\int \Psi^* \Psi \, dV = 1$$

haciendo la integral sobre el espacio de todas las partículas.

La función de onda debe de cumplir algunas propiedades importantes:

a) debe ser continua; además la primera y la segunda derivada deben ser continuas.

b) debe ser monovaluada.

c) debe ser de cuadrado integrable. Esto puede ser interpretado como el hecho de que la función de onda sea en cada punto finita, esto es, debe ir a cero en $\pm \infty$.

3.3.3. <u>Postulado II</u>: <u>Operadores y observables</u>. Para cada propiedad observable a de un sistema existe un operador lineal A hermítico correspondiente, tal que el valor de expectación o promedio del observable a en el estado Ψ viene dado por

$$\langle A \rangle = \frac{\int \Psi^* A \Psi \, dV}{\int \Psi^* \Psi \, dV}$$

3.3.3.1. <u>Definición</u>: un operador A es hermítico si

$$\int \Psi_i^* \hat{A} \Psi_j \, dV = \int \Psi_j \hat{A}^* \Psi_i^* \, dV$$

donde las integrales se extienden a todo el espacio, Ψ_i y Ψ_j son cualesquiera par de funciones que satisfacen las condiciones impuestas antes.

<u>Teorema</u> <u>3.3.1</u>.: los valores propios de un operador hermítico son reales.

Demostración: sea $\hat{A}$ un operador hermítico y a_n su correspondiente valor propio, tenemos que

$$\hat{A}\Psi_n = a_n \Psi_n$$

$$\int \Psi_n^* \hat{A} \Psi_n \, dV = \int \Psi_n^* a_n \Psi_n \, dV = a_n \int \Psi_n^* \Psi_n \, dV$$

Por otra parte, debido a que $\hat{A}$ es hermítico

$$\int \Psi_n^* \hat{A} \Psi_n \, dV = \int \Psi_n \hat{A}^* \Psi_n^* \, dV = a_n^* \int \Psi_n \Psi_n^* \, dV$$

de aquí que $a_n = a_n^*$, e inmediatamente concluímos que a_n debe ser real.

<u>Teorema</u> <u>3.3.2</u>: las funciones propias de un operador hermítico forman un sistema ortonormal.

Demostración: sean Ψ y ϕ dos funciones propias de un operador hermítico $\hat{A}$, tenemos

$$\hat{A}\Psi = a_1 \Psi \qquad (3.3.1.)$$

$$\hat{A}^* \phi^* = a_2 \phi^* \qquad (3.3.2.)$$

multiplicando (3.3.1.) por la izquierda por ϕ^* y (3.3.2.) por Ψ e integrando, encontramos

$$\int \phi^* \hat{A} \Psi \, dV = a_1 \int \phi^* \Psi \, dV$$

$$\int \Psi \hat{A}^* \phi^* \, dV = a_2 \int \Psi \phi^* \, dV$$

por tanto

$$(a_1 - a_2)\int \phi^* \Psi \, dV = 0$$

Si $a_1 \neq a_2$ la integral se hace cero, esto prueba que las funciones propias no degeneradas son ortogonales. La condición de normalización previamente establecida obliga al conjunto de funciones a ser ortonormal.

3.3.4. Obtención de operadores

Para obtener los operadores, la expresión clásica para el observable de interés se escribe en términos de las coordenadas, el momento y el tiempo. Luego se sustituye, para coordenadas cartesianas, el momento p_q por el operador diferencial $-i\hbar \frac{\partial}{\partial q}$

Como un ejemplo de este tipo de sustitución, se construirá el operador mecánico cuántico para la energía cinética T. La expresión clásica para la energía cinética de una partícula en coordenadas cartesianas es

$$T = (1/2m) \quad (p_x^{\,2} + p_y^{\,2} + p_z^{\,2})$$

haciendo la sustitución por el operador correspondiente, obtenemos

$$T = (1/2m) \left[\left(-ih\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(-ih\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(-ih\frac{\partial}{\partial z}\right)^2 \right]$$

o bien

$$\hat{T} = (-h^2/2m) \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right]$$

$$= (-h^2/2m)\ \nabla^2$$

Aunque la ecuación (3.3.3.) fue derivada utilizando coordenadas cartesianas, la expresión es válida para cualquier sistema de coordenadas.

Quizá el operador más importante es el que está relacionado con la energía total E del sistema. El operador correspondiente es llamado el Hamiltoniano $\hat{H}$. Para un sistema de una partícula es $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$, donde $\hat{T}$ está dado por la ecuación (3.3.3.) y $\hat{V}$ para sistemas conservativos, que es el caso que nos interesa, es solamente una función de las coordenadas q; por lo tanto

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}_{(q)} \qquad (3.3.4.)$$

3.3.5. <u>Postulado III</u>: <u>Postulado de la medición</u>. Este postulado es el que nos comunica con el experimento. Sea Ψ la función de onda de un sistema, $\hat{A}$ el operador que representa la propiedad A del sistema, $\{\Psi_j , a_j\}$ el conjunto de funciones y valores propios de $\hat{A}$. Tenemos que

a) al hacer la medición de A, si $\Psi = \Psi_j$ para algún j, el resultado de la medición es a_j siempre.

b) si $\Psi \neq \Psi_j$, entonces la medición para el sistema da uno de los a_j con cierta probabilidad.

<u>Teorema 3.3.3.</u>: <u>Teorema de completitud</u>: las funciones propias de un operador hermítico, que representan observables, forman un conjunto completo.

Esto significa que Ψ definida en un dominio D, puede expresarse como

$$\Psi = \sum_j C_j \Psi_j$$

$\{\Psi_j\}$ son las funciones propias de un operador hermítico observable definido en D.

Demostración: sea

$$a\Psi - \sum_j B_j \Psi_j = 0 \qquad (3.3.5.)$$

si a es igual a cero, entonces todos los B_j en la ecuación deben ser iguales a cero, dado que las funciones Ψ_j son linealmente independientes. Si esta fuera la única probabilidad, entonces Ψ debería de constituir un miembro del conjunto de funciones linealmente independientes; sin embargo debido a que los $\{\Psi_j\}$ forman un sistema completo, entonces son una solución para la ecuación (3.3.5.). Con a $\neq$ 0 tenemos

$$\Psi = \frac{1}{a} \sum_j B_j C_j$$

haciendo $B_j/a = C_j$ queda demostrado el teorema.

$|C_j|^2$ da la probabilidad de obtener a_j en una medición. Antes de analizar esto hagamos un cambio de nomenclatura:

$$\int \Psi^* \hat{A} \Psi \, dV \equiv \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \qquad \int \Psi^* \Psi \, dV \equiv \langle \Psi | \Psi \rangle$$

por normalización se cumple que

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 = \sum_{jj'} C_j^* C_{j'} \langle \Psi_j | \Psi_{j'} \rangle$$

pero $\{\Psi_j\}$ es tomado como ortonormal, por lo tanto

$$\langle \Psi_j | \Psi_{j'} \rangle = \delta_{jj'}$$

y

$$\sum_j |c_j|^2 = 1$$

Ahora calculemos el promedio de $\hat{A}$,

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$$
$$= \sum_{jj'} c_j^* c_{j'} \langle \Psi_j | \hat{A} | \Psi_{j'} \rangle$$
$$= \sum_j |c_j|^2 a_j$$

Es decir que podemos interpretar que $|c_j|^2$ es la probabilidad de obtener a_j en la medición.

3.3.6. <u>Postulado IV</u>: <u>Postulado de la Evolución Temporal</u>. La evolución temporal de un estado $\Psi(q,t)$ viene dado por la ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \qquad (3.3.6.)$$

donde $\hat{H}$ es el operador Hamiltoniano para el sistema. La ecuación (3.3.6.) es llamada la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

3.3.6.1. <u>Definición</u>: estado estacionario es aquel en que las propiedades observables no dependen del tiempo.

<u>Teorema 3.3.4.</u>: <u>Teorema de estados estacionarios</u>: para cualquier $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$ la solución de (3.3.6.) es

$$\Psi(x,t) = \Psi(x)\, e^{-iEt/\hbar}$$

donde $\Psi(x)$ es la solución de la ecuación diferencial

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

que no es más que un problema de valores propios.

Demostración: supongamos

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\,\phi(t)$$

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

por lo tanto

$$\phi(t)\,\hat{H}\psi(x) = i\hbar\,\psi(x) \frac{\partial}{\partial t}\phi(t)$$

dividiendo ambos lados entre $\phi(t)\,\psi(x)$

$$\frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)} = \frac{i\hbar}{\phi(t)} \frac{\partial}{\partial t}\phi(t)$$

por lo tanto se cumple que

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -i\frac{c}{\hbar}\,\phi \qquad (3.3.7.)$$

y además

$$\hat{H}\psi(x) = c\,\psi(x) \qquad (3.3.8.)$$

es evidente que la solución de (3.3.7.) es

$$\phi(t) = e^{-ict/\hbar} \qquad \text{ya que} \qquad \phi(0) = 0$$

Pero por otra parte

$$E = \langle \hat{H} \rangle$$

$$= \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi / \Psi \rangle} = \frac{\langle \Psi / \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi / \Psi \rangle}$$

de modo que $E = C$, puesto que $\langle \Psi / \Psi \rangle = 1$. Con lo cual queda establecida la prueba del teorema.

4. DETERMINACION DE LAS RELACIONES DE DISPERSION PARA UN ELECTRON QUE SE MUEVE EN UN CRISTAL MONODIMENSIONAL

4.1. El método de la transformada de Laplace

Toda la información del estado dinámico de un electrón que se mueve en un cristal monodimensional está contenida en la función de onda $\Psi(x,t)$, la cual es solución de la ecuación de Schrödinger

$$H\Psi(x,t) = i\hbar\left[\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}\right] \qquad (4.1.1)$$

donde H es el Hamiltoniano que viene dado de la siguiente manera:

$$H = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{d^2}{dx^2}\right) - eV(x) \qquad (4.1.2)$$

y $eV(x)$ es la energía potencial que actúa sobre el electrón; nótese que se ha sustituído el laplaciano por una derivada de segundo orden, ya que se trata de un caso monodimensional.

Este potencial es siempre periódico con período a, esto es $V(x + na) = V(x)$ para cualquier entero n.

En los estados estacionarios, donde la energía está perfectamente definida, la función de onda es de la forma

$$\Psi(x,t) = \Psi(x)\exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right) \qquad (4.1.3)$$

donde Ψ (x) satisface el problema de valores propios

$$H\Psi(x) = E\Psi(x) \qquad (4.1.4)$$

o sea

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - eV(x)\right]\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Por comodidad de nomenclatura se escribirá Ψ en lugar de $\Psi(x)$.

Multiplicando la última ecuación por $(-2m)/\hbar^2$, queda

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2me}{\hbar^2}V(x)\right]\Psi = -\frac{2mE}{\hbar}\Psi$$

al hacer las sustituciones

$$U(x) = \frac{ma^2e}{\hbar^2}V(x) \qquad (4.1.5)$$

$$K^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \qquad (4.1.6)$$

podemos escribir finalmente

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2U(x)}{a^2}\right]\Psi = -K^2\Psi$$

Se tiene una ecuación diferencial con coeficientes periódicos. Las soluciones de las ecuaciones son de la forma

$$\Psi(x) = e^{ik_x x}u(x) \qquad (4.1.7)$$

donde $u(x)$ es una función con el mismo período que el potencial; esto es: $u(x+na) = u(x)$ para n un entero. Se nota que las soluciones de la ecuación (4.1.4) son ondas planas, moduladas por la función periódica $u(x)$ y esta función tiene valor uno cuando los efectos de la red sobre el electrón son despreciados (partícula libre).

Al tomar la ecuación (4.1.7) y un entero n, se obtiene

$$\psi(x+na) = \exp\left[ik'(x+na)\right] u(x+na) = \exp(ik'na)\, \psi(x) \qquad (4.1.8)$$

Lo mismo se puede hacer para la derivada de

$$\psi'(x+na) = \exp(ik'na)\, \psi'(x) \qquad (4.1.9)$$

donde k' es un vector en tres dimensiones que depende del valor propio de E de la ecuación (4.1.4). Este número debe ser real para que la función de onda en la ecuación (4.1.7) sea finita para todos los valores de x.

Los valores de E -en la ecuación (4.1.4)- donde k' es real determinan las bandas de energía permitidas, que se pueden obtener mediante la relación de dispersión.

La relación entre E y k' se determinará para casos unidimencionales utilizando el método de la transformada de Laplace. Se procederá a multiplicar cada lado de la ecuación (4.1.4) por $e^{-\lambda x}$

$$e^{-\lambda x} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2U(x)}{a^2} e^{-\lambda x} \psi = -k^2 e^{-\lambda x} \psi$$

e integrar de cero a infinito

$$\int_0^\infty e^{-\lambda x} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_0^\infty \frac{2}{a^2} e^{-\lambda x} U(x)\, \psi(x)\, dx = -\int_0^\infty k^2 e^{-\lambda x} \psi\, dx$$

Al aplicar la definición de la transformada de Laplace se tiene que

$$\int_0^\infty e^{-\lambda x} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \frac{2}{a^2} \int_0^\infty e^{-\lambda x} U(x)\, \psi(x)\, dx = -k^2\, Y(\lambda) \qquad (4.1.10)$$

donde

$$Y(\lambda) = L\{\Psi(x)\}$$

Al aplicar la transformada de Laplace del lado izquierdo se tiene que

$$L\left\{\frac{d^2\Psi}{dx^2}\right\} + \frac{2}{a^2} L\{U(x)\,\Psi(x)\} = -K^2\, Y(\lambda)$$

Utilizando transformada de derivada obtenemos

$$\lambda^2 L\{\Psi\} - \lambda\Psi(0) - \Psi'(0) + \frac{2}{a^2} L\{U(x)\,\Psi(x)\} = -K^2 L\{\Psi\}$$

despejando $L\{\Psi\}$

$$L\{\Psi\} = \frac{\lambda\Psi(0) + \Psi'(0) - \frac{2}{a^2} L\{U(x)\,\Psi(x)\}}{\lambda^2 + k^2}$$

Por lo tanto

$$L\{\Psi\} = Y(\lambda) = \frac{\lambda}{\lambda^2+k^2}\Psi(0) + \frac{\Psi(0)}{\lambda^2+k^2} - \frac{2}{a^2}\frac{L\{U(x)\,\Psi(x)\}}{\lambda^2+k^2} \qquad (4.1.11)$$

La función de onda, en términos de su valor y el de su derivada en el origen $[\Psi(0) \text{ y } \Psi'(0)]$, puede ser determinada de la ecuación (4.1.11) tomando la transformada inversa de Laplace

$$\Psi(x) = \Psi(0)\operatorname{Cos}kx + \Psi'(0)\frac{\operatorname{Sen}kx}{k} - \frac{2}{a^2} L^{-1}\left\{\frac{L\{U(x)\,\Psi(x)\}}{\lambda^2+k^2}\right\} \qquad (4.1.12)$$

Las condiciones de frontera de las ecuaciones (4.1.8) y (4.1.9) valuadas en $x = a$, deben de coincidir con el de la función de onda valuada en el origen y, en particular, para $n = 1$

$$\Psi(a) = e^{ik'a}\,\Psi(0) \qquad (4.1.13)$$

$$\Psi'(a) = e^{ik'a}\,\Psi'(0) \qquad (4.1.14)$$

La ecuación (4.1.12) junto con las ecuaciones (4.1.13) y (4.1.14) proporcionan un sistema de dos ecuaciones lineales en $\Psi_{(0)}$ y $\Psi'_{(0)}$. El sistema tendrá solución sólo para determinadas relaciones entre la energía E y el momentum k y éstas son las relaciones de dispersión que precisamente se buscan.

4.2. El electrón libre

Se procederá a analizar el caso de un electrón libre. En este caso no existe red por lo que $U(x) = 0$ para todos los valores de x y el último término de la ecuación (4.1.12) es cero. Entonces se tiene que

$$\psi_0(x) = \psi(0) \cos kx + \frac{\psi'(0) \operatorname{Sen} kx}{k} \qquad (4.2.1)$$

Valuando la ecuación anterior y su primera derivada en el punto x = a y usando las condiciones de frontera dadas por (4.1.13) y (4.1.14), obtenemos un sistema de ecuaciones lineales en $\psi(0)$ y en $\psi'(0)$

$$e^{ik'a}\,\psi(0) = \psi(0) \cos ka + \frac{1}{k}\psi'(0) \operatorname{Sen} ka$$

$$e^{ik'a}\,\psi'(0) = -k\,\psi(0) \operatorname{Sen} ka + \psi'(0) \cos ka$$

o sea que

$$\psi(0)\left[\cos ka - e^{ik'a}\right] + \frac{1}{k} \operatorname{Sen} ka\, \psi'(0) = 0$$

$$\psi(0)\, k \operatorname{Sen} ka + \psi'(0)\left[e^{ik'a} - \cos ka\right] = 0$$

Este sistema de ecuaciones tiene solución no trivial si y sólo si el determinante de los coeficientes es igual a cero

$$\mathrm{Det}_0 = \begin{vmatrix} \cos ka - e^{ik'a} & \frac{1}{k} \operatorname{Sen} ka \\ -e^{-ik'a} k \operatorname{Sen} ka & e^{-ik'a} \cos ka - 1 \end{vmatrix} = 0 \qquad (4.2.2)$$

Obsérvese que se ha multiplicado la derivada de la ecuación (4.2.1) valuada en x = a por $e^{-ik'a}$ para facilitar cálculos posteriores.

De la ecuación (4.2.2) se llega a

$$\text{Det.} = (\text{Cos}\,ka - e^{ik'a})(e^{-ik'a}\,\text{Cos}\,ka - 1) + \frac{1}{k}\,k\,\text{Sen}^2 ka\; e^{-ik'a} = 0$$

$$\text{Det.} = e^{-ik'a}\,\text{Cos}^2 ka - \text{Cos}\,ka - \text{Cos}\,ka + e^{ik'a} + \text{Sen}^2 ka\; e^{-ik'a} = 0$$

$$0 = e^{-ik'a} + e^{ik'a} - 2\,\text{Cos}\,ka$$

$$0 = 2\,(\text{Cos}\,k'a - \text{Cos}\,ka)$$

$$\text{Cos}\,k'a = \text{Cos}\,ka \qquad (4.2.3)$$

por lo tanto

$$k = k' \pm \frac{2\pi l}{a} \qquad l = 0,1,2,\ldots \qquad (4.2.4)$$

Tomando en cuenta la definición de k en términos de E

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\,E$$

se tiene que

$$k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

Igualando esta ecuación con la ecuación (4.2.4) obtenemos

$$\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} = k' \pm \frac{2\pi l}{a}$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}\,E = \left(k' \pm \frac{2\pi l}{a}\right)^2$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k' \pm \frac{2\pi l}{a}\right)^2 \qquad (4.2.5)$$

entonces la ecuación (4.2.4) permite determinar la constante $\Psi'_{(0)}$ en términos de $\Psi_{(0)}$.

De las ecuaciones (4.1.13) y (4.1.14), se tiene que

$$\frac{\Psi_{(a)}}{\Psi_{(0)}} = \frac{\Psi'_{(a)}}{\Psi'_{(0)}}$$

$$\Psi'_{(0)} = \frac{\Psi'_{(a)}}{\Psi_{(a)}}\,\Psi_{(0)}$$

pero

$$e^{ik'a}\,\Psi_{(0)} = \Psi_{(0)}\,\text{Cos}\,ka + \frac{1}{k}\,\Psi'_{(0)}\,\text{Sen}\,ka$$

$$\Psi_{(0)}\,(e^{ik'a} - \operatorname{Cos} k'a) = \frac{1}{k}\,\Psi'_{(0)}\ \operatorname{Sen}(k'a \pm 2\pi l)$$

$$\operatorname{Cos} ka = \operatorname{Cos} k'a \quad , \qquad ka = k'a \pm 2\pi l$$

utilizando el teorema de de Moivre ($e^{i\theta} = \operatorname{Cos}\theta + i\operatorname{Sen}\theta$) y la fórmula para el seno de la suma, se obtiene

$$\Psi_{(0)}\,(i\operatorname{Sen} k'a) = \Psi'_{(0)}\ \frac{\operatorname{Sen}(k'a \pm 2\pi l)}{k}$$

$$\Psi'_{(0)} = ik\Psi_{(0)} = i\,(k' \pm \tfrac{2\pi l}{a})\ \Psi_{(0)}$$

Al sustituír este resultado en la ecuación (4.2.1), finalmente queda

$$\Psi_{o}(x) = \Psi_{(0)}\operatorname{Cos} kx + i\,(k' \pm \tfrac{2\pi l}{a})\ \Psi_{(0)}\ \frac{\operatorname{Sen} kx}{k' \pm \frac{2\pi l}{a}}$$

$$\Psi_{o}(x) = \Psi_{(0)}\ (\operatorname{Cos} kx + i\operatorname{Sen} kx)$$

$$\Psi_{o}(x) = \Psi_{(0)}\ e^{ikx}$$

$$\Psi_{o}(x) = \Psi_{(0)}\ \exp\left[i\,(k' \pm \tfrac{2\pi l}{a})\,x\right] \qquad (4.2.6)$$

4.3. Caso monoatómico

Se procederá a analizar el caso monoatómico, también conocido como el modelo de Kroning Penney. En este modelo el cristal monoatómico está constituído por átomos iguales, colocados en las posiciones x = 0, x = a, x = 2a, etc.

El potencial electrostático de cada átomo se representa por una función delta de Dirac de tamaño P, localizada en las posiciones de los átomos y que puede ser expresada de la siguiente manera

$$U(x) = a \sum_{n=-\infty}^{\infty} P\, \delta(x-na) \qquad (4.3.1)$$

La función de onda para nuestro problema puede ser obtenida a partir de la ecuación (4.1.12)

$$\Psi_1(x) = \Psi(0) \operatorname{Cos} kx + \Psi'(0) \frac{\operatorname{Sen} kx}{k} - 2\bar{a}^2 L^{-1}\left[\frac{L\{U(x)\,\Psi(x)\}}{\lambda^2 + k^2}\right]$$

usando la ecuación (4.2.7), encontramos

$$L\{U(x)\,\Psi(x)\} = \int_0^{\infty} e^{-\lambda x}\left[a \sum_{n=-\infty}^{\infty} P\, \delta(x-na)\,\Psi(x)\right] dx \qquad (4.3.2)$$

para realizar esta integral se debe recordar que

$$\int F(t)\,\delta(t-t_0)\,dt = F(t_0)$$

si el intervalo de integración contiene a to. En este caso conviene hacer $F(x) = e^{-\lambda x}\,\Psi(x)$, entonces

$$L\{U(x)\,\Psi(x)\} = a P \sum \int_0^{\infty} \delta(x-na)\, e^{-\lambda x}\,\Psi(x)\, dx$$

$$L\{U(x)\,\Psi(x)\} = a P \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda n a}\,\Psi(na) \qquad (4.3.3)$$

La transformada inversa de Laplace que aparece en la ecuación (4.1.12) es

$$L^{-1}\left\{\frac{L\{U(x)\,\psi(x)\}}{\lambda^2+k^2}\right\} = aP\, L^{-1}\left\{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{e^{-\lambda na}\,\psi(na)}{\lambda^2+k^2}\right\}$$

$$= aP\sum_{n=0}^{\infty}\psi(na)\, L^{-1}\left\{\frac{e^{-\lambda na}}{\lambda^2+k^2}\right\}$$

$$= aP\sum_{n=0}^{\infty}\psi(na)\,\frac{\operatorname{Sen}k(x-na)}{k}\,U(x-na) \qquad (4.3.4)$$

donde se utilizó la relación

$$e^{-\lambda b} f(\lambda) = L\{F_b(t)\} \qquad (4.3.5)$$

por lo tanto

$$L^{-1}\{e^{-\lambda b} f(\lambda)\} = F_b(t)$$

donde

$$F_b(t) = 0 \qquad 0<t<b \qquad (4.3.6)$$

$$= F(t-b) \qquad t>b$$

En este caso b = na

$$F(x) = \frac{\operatorname{Sen}kx}{k}$$

y se introduce la función de salto $U(x)$ definida así

$$U(x-c) = 1 \qquad x>c$$

$$U(x-c) = 0 \qquad x\leq c$$

para que de esta manera se cumpla que

$$F_{na}(x) = 0 \qquad 0<x<na$$

$$= F(x-na) = \frac{\operatorname{Sen}k(x-na)}{k} \qquad x>na$$

Por lo tanto la función de onda para el caso monoatómico es

$$\psi_1(x) = \psi(0)\operatorname{Cos}kx + \frac{\psi'(0)\operatorname{Sen}kx}{k} - \frac{2P}{ak}\sum_{n=0}^{\infty}\psi_1(na)\operatorname{Sen}k(x-na)\,U(x-na) \qquad (4.3.7)$$

El último término de esta ecuación es diferente de cero cuando $0 < x \leq a$, para $n = 0$, debido a la propiedad de la función de salto.

Se aplicarán las condiciones de frontera expresadas por las ecuaciones (4.1.13) y (4.1.14)

$$\begin{aligned} e^{ik'a}\psi_1(0) &= \psi_1(0)\,\mathrm{Cos}\,ka + \frac{\psi_1'(0)\,\mathrm{Sen}\,ka}{k} - \frac{2P}{ak}\psi_1(0)\,\mathrm{Sen}\,ka \\ e^{ik'a}\psi_1'(0) &= -k\,\psi_1(0)\,\mathrm{Sen}\,ka + \psi_1'(0)\,\mathrm{Cos}\,ka - \frac{2P}{a}\psi_1(0)\,\mathrm{Cos}\,ka \end{aligned} \qquad (4.3.8)$$

Nótese que se ha tomado en cuenta el hecho de que $u(0) = 1$; además de aplicar la ecuación (4.1.14) se tomó en cuenta que el producto del seno por la derivada de la función de salto (que es una función delta de Dirac) siempre es cero.

Reordenando las últimas ecuaciones

$$\begin{aligned} &\psi_1(0)\left[\mathrm{Cos}\,ka - e^{ik'a} - \frac{2P}{ak}\mathrm{Sen}\,ka\right] + \psi_1'(0)\frac{\mathrm{Sen}\,ka}{k} = 0 \\ &\psi_1(0)\left[-k\,\mathrm{Sen}\,ka - \frac{2P}{a}\mathrm{Cos}\,ka\right]e^{-ik'a} + \psi_1'(0)\left[\mathrm{Cos}\,ka\,e^{-ik'a} - 1\right] = 0 \end{aligned} \qquad (4.3.9)$$

donde se han multiplicado todos los términos de la última ecuación por $e^{-ik'a}$. Tomando los coeficientes de $\psi_1(0)$ y $\psi_1'(0)$ el determinante es igual a cero

$$\mathrm{Det}_1 = \begin{vmatrix} \mathrm{Cos}\,ka - e^{ik'a} - \frac{2P}{ak}\mathrm{Sen}\,ka & \frac{\mathrm{Sen}\,ka}{k} \\ e^{-ik'a}\left[-k\,\mathrm{Sen}\,ka - \frac{2P}{a}\mathrm{Cos}\,ka\right] & e^{-ik'a}\mathrm{Cos}\,ka - 1 \end{vmatrix} = 0$$

Resolviendo el determinante, se encuentra que

$$\left(\mathrm{Cos}\,ka - e^{ik'a} - \frac{2P}{ak}\mathrm{Sen}\,ka\right)\left(e^{-ik'a}\mathrm{Cos}\,ka - 1\right) - \frac{\mathrm{Sen}\,ka}{k}e^{-ik'a}\left(-k\,\mathrm{Sen}\,ka - \frac{2P}{a}\mathrm{Cos}\,ka\right) = 0$$

$$\begin{aligned} e^{-ik'a}\mathrm{Cos}^2 ka - \mathrm{Cos}\,ka - \mathrm{Cos}\,ka + e^{ik'a} - \frac{2P}{ak}e^{-ik'a}\mathrm{Sen}\,ka\,\mathrm{Cos}\,ka + \frac{2P}{ak}\mathrm{Sen}\,ka\, + \\ + e^{-ik'a}\mathrm{Sen}^2 ka + \frac{2P}{ak}e^{-ik'a}\mathrm{Sen}\,ka\,\mathrm{Cos}\,ka = 0 \end{aligned}$$

$$e^{-ik'a} - 2\cos ka + e^{ik'a} + \frac{2P}{ak}\,\mathrm{Sen}\,ka = 0$$

$$2\cos k'a = 2\cos ka - \frac{2P}{ak}\,\mathrm{Sen}\,ka$$

$$\cos k'a = \cos ka - \frac{P}{ak}\,\mathrm{Sen}\,ka \qquad (4.3.10)$$

Combinando la ecuación (4.3.10) con (4.3.9) se obtiene la relación entre $\Psi_{(0)}$ y $\Psi'_{(0)}$ y al introducir esta relación en la ecuación (4.3.8) se llega a la función de onda.

Si se consideran valores extremos para P, se obtienen resultados muy interesantes; por ejemplo, si se hace P = 0 la ecuación (4.3.10) se convierte en la ecuación (4.2.3) que es el caso del electrón libre. Si se hace tender P a infinito se ve que la ecuación (4.3.10) tiene soluciones finitas solamente si Senka = 0, lo que significa que ka = nπ ,con n = 0,1,2,3,..., que corresponde a los niveles de energía para una partícula que está encerrada en una barrera de potencial infinita.

4.4. Caso diatómico

Existen dos clases distintas de átomos por celda unitaria, cada una representada por una función delta de Dirac de tamaño P_1 y P_2 y localizadas en las posiciones 0, $\pm$ a, $\pm$ 2a, $\pm$ 3a, ..., para un átomo y $\beta_2 a$, a + $\beta_2 a$, 2a + $\beta_2 a$,... para el otro átomo. Se ha supuesto que $0 < \beta_2 < 1$ y β_1 es igual a cero. La energía potencial de la red se puede expresar como

$$U(x) = a\sum_{n=-\infty}^{\infty} P_1\,\delta(x-na) + a\sum_{n=-\infty}^{\infty} P_2\,\delta[x-(n+\beta_2)a]$$

$$U(x) = a\sum_{n=-\infty}^{\infty}\sum_{i=1}^{2} P_i\,\delta[x-(n+\beta_i)a] \qquad (4.4.1)$$

En los casos especiales en que $\beta_2 = 1/4$ y $1/2$ la ecuación (4.4.1) expresa el modelo de la estructura de ensamble de zinc y de NaCl, respectivamente.

Utilizando el resultado de la ecuación (4.4.1) se procederá a encontrar

$$L^{-1}\left\{\frac{L\{U(x)\,\Psi(x)\}}{\lambda^2+k^2}\right\}$$

$$L^{-1}\left\{\frac{L\{U(x)\,\Psi(x)\}}{\lambda^2+k^2}\right\} = L^{-1}\left\{\frac{L\left\{a\sum_{n=-\infty}^{\infty}\sum_{i=1}^{2} P_i\,\delta[x-(n+\beta_i)a]\,\Psi(x)\right\}}{\lambda^2+k^2}\right\}$$

$$= a\,L^{-1}\left\{\frac{L\left\{\sum_{n=0}^{\infty} P_1\,\delta(x-na)\,\Psi(x) + \sum_{n=0}^{\infty} P_2\,\delta(x-(n+\beta_2)a)\,\Psi(x)\right\}}{\lambda^2+k^2}\right\}$$

$$= a\,L^{-1}\left\{\frac{P_1\,L\left\{\sum_{n=0}^{\infty}\delta(x-na)\,\Psi(x)\right\}}{\lambda^2+k^2} + \frac{P_2\,L\left\{\sum_{n=0}^{\infty}\delta(x-(n+\beta_2)a)\,\Psi(x)\right\}}{\lambda^2+k^2}\right\}$$

$$= a\,P_1\sum_{n=0}^{\infty}\Psi(na)\,L^{-1}\left\{\frac{e^{-\lambda na}}{\lambda^2+k^2}\right\} + a\,P_2\sum_{n=0}^{\infty}\Psi(na+\beta_2 a)\,L^{-1}\left\{\frac{e^{-\lambda(na+\beta_2 a)}}{\lambda^2+k^2}\right\}$$

$$L^{-1}\left\{ \frac{L\{U(x)\,\Psi(x)\}}{\lambda^2 + k^2} \right\} = aP_1 \sum_{n=0}^{\infty} \Psi(na) \frac{\operatorname{Sen}k(x-na)}{k} U(x-na) +$$

$$+ aP_2 \sum_{n=0}^{\infty} \Psi(na+\beta_2 a) \frac{\operatorname{Sen}k(x-na-\beta_2 a)}{k} U(x-na-\beta_2 a) \quad (4.4.2)$$

Al sustituír el resultado de la ecuación (4.4.2) en la ecuación (4.1.12) se obtiene la función de onda para el caso diatómico

$$\Psi_2(x) = \Psi(0) \operatorname{Cos}kx + \frac{\Psi'(0) \operatorname{Sen}kx}{k} +$$

$$- \frac{2}{ak} \sum_{n=0}^{\infty} P_1 \Psi_2(na) \quad \operatorname{Sen}(k(x-na)) \quad U(x-na) +$$

$$- \frac{2}{ak} \sum_{n=0}^{\infty} P_2 \Psi_2(na+\beta_2 a) \operatorname{Sen}(k(x-na-\beta_2 a)) U(x-na-\beta_2 a) \quad (4.4.3)$$

Cuando los valores de x están comprendidos en el intervalo $0 \leq x \leq a$ solamente los términos de los sumandos correspondientes a n = 0 contribuyen a $\Psi_2(x)$ debido a las propiedades de la función de salto.

Al comparar la función de onda para el caso monoatómico-ecuación (4.2.13)- con la del caso diatómico - ecuación (4.4.3)- se encuentra que

$$\Psi_2(x) = \Psi_1(x) - \frac{2}{ak} P_2 \Psi_2(\beta_2 a) \operatorname{Sen}(k(x-\beta_2 a)) U(x-\beta_2 a) \qquad (4.4.4)$$

Esta diferencia ocurre solamente para valores de x tales que $x \geq \beta_2 a$; es decir, para puntos situados a la derecha del segundo átomo. En la celda unitaria a la izquierda de este átomo las dos funciones de onda tienen el mismo valor.

Al aplicar la condición de frontera (4.1.13) a la función de onda encontramos

$$e^{ik'a} \Psi_2(0) = \Psi_2(0) \operatorname{Cos}ka + \Psi'(0) \frac{\operatorname{Sen}ka}{k} - \frac{2}{ak} P_1 \Psi(0) \operatorname{Sen}ka\, U(0) +$$

$$- \frac{2}{ak} P_2 \Psi_2(\beta_2 a) \operatorname{Sen}k(a-\beta_2 a) \; U(a-\beta_2 a) \qquad (4.4.5)$$

y al utilizar

$$U(a) = 1$$

$$U(a-\beta_2 a) = 1$$

$$\Psi_2(\beta_2 a) = \Psi_1(\beta_2 a)$$

$$\Psi_1(\beta_2 a) = \Psi_1(0)\,\mathrm{Cos}\,k\beta_2 a + \Psi_1'(0)\frac{\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a}{k} - \frac{2P_1}{ak}\Psi_1(0)\,\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a$$

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) \quad , \quad \Psi_1'(0) = \Psi_2'(0)$$

obtenemos

$$\Psi_2(\beta_2 a) = \Psi_2(0)\,\mathrm{Cos}\,k\beta_2 a + \frac{\Psi_2'(0)\,\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a}{k} - \frac{2P_1}{ak}\Psi_2(0)\,\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a$$

Sustituyendo en (4.4.5), tenemos

$$e^{ik'a}\Psi_2(0) = \Psi_2(0)\,\mathrm{Cos}\,ka + \Psi_2'(0)\frac{\mathrm{Sen}\,ka}{k} - \frac{2P_1}{ak}\Psi_2(0)\,\mathrm{Sen}\,ka - \frac{2}{ak}P_2\,\mathrm{Sen}\,k(a-\beta_2)\Big[\Psi_2(0)\,\mathrm{Cos}\,k\beta_2 a + \Psi_2'(0)\frac{\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a}{k} - \frac{2P_1}{ak}\Psi_2(0)\,\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a\Big]$$

Simplificando

$$e^{ik'a}\Psi_2(0) = \Psi_2(0)\,\mathrm{Cos}\,ka + \Psi_2'(0)\frac{\mathrm{Sen}\,ka}{k} - \frac{2P_1}{ak}\mathrm{Sen}\,ka\,\Psi_2(0) + - \frac{2P_2}{ak}\mathrm{Sen}\,k(a-\beta_2 a)\,\mathrm{Cos}\,ka\beta_2\,\Psi_2(0) - \frac{2P_2}{ak}\mathrm{Sen}\,k(a-\beta_2 a)\frac{\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a}{k}\Psi_2'(0) + \frac{4P_2}{a^2k^2}P_1\,\mathrm{Sen}\,k(a-\beta_2 a)\,\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a\,\Psi_2(0).$$

$$\Psi_2(0)\Big[\mathrm{Cos}\,ka - e^{ik'a} - \frac{2P_1}{ak}\mathrm{Sen}\,ka - \frac{2P_2}{ak}\mathrm{Sen}\,k(a-\beta_2 a)\,\mathrm{Cos}\,k\beta_2 a + \frac{4P_2P_1}{a^2k^2}\mathrm{Sen}\,k(a-\beta_2 a)\,\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a\Big] + \Psi_2'(0)\Big[\frac{\mathrm{Sen}\,ka}{k} + - \frac{2}{ak}P_2\,\mathrm{Sen}\,k(a-\beta_2 a)\frac{\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a}{k}\Big] = 0$$

Sea

$$\delta_1 = \frac{-2P_1}{ak}\mathrm{Sen}\,ka - \frac{2P_2}{ak}\mathrm{Sen}\,k(a-\beta_2 a)\,\mathrm{Cos}\,k\beta_2 a + \frac{4P_1P_2}{a^2k^2}\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a\,\mathrm{Sen}\,k(a-\beta_2 a)$$

$$\delta_2 = \frac{-2P_2}{ak} \operatorname{Sen} k(a-\beta_2 a) \frac{\operatorname{Sen} k\beta_2 a}{k}$$

se tiene que

$$\Psi_2(0)\left[\operatorname{Cos} ka - e^{ik'a} + \delta_1\right] + \Psi_2'(0)\left[\frac{\operatorname{Sen} ka}{k} + \delta_2\right] = 0 \qquad (4.4.6)$$

Al aplicar la condición (4.1.14) a la primera derivada de la función de onda

$$e^{ika}\Psi_2'(0) = -\Psi_2(0)\, k \operatorname{Sen} ka + \Psi_2'(0)\operatorname{Cos} ka - \frac{2P_1}{a}\Psi_2(0)\operatorname{Cos} ka + \qquad (4.4.7)$$
$$- \frac{2}{a} P_2 \Psi_2(\beta_2 a)\operatorname{Cos} k(a-\beta_2 a)$$

y el hecho que

$$\Psi_2(\beta_2 a) = \Psi_1(\beta_2 a) = \Psi_1(0)\operatorname{Cos} k\beta_2 a + \Psi_1'(0)\frac{\operatorname{Sen} k\beta_2 a}{k} - \frac{2P_1}{ak}\Psi_1(0)\operatorname{Sen} k\beta_2 a$$
$$= \Psi_2(0)\operatorname{Cos} k\beta_2 a + \frac{\Psi_2'(0)\operatorname{Sen} k\beta_2 a}{k} - \frac{2P_1}{ak}\Psi_2(0)\operatorname{Sen} k\beta_2 a$$

se obtiene

$$e^{ik'a}\Psi_2'(0) = -\Psi_2(0)\, k\operatorname{Sen} ka + \Psi_2'(0)\operatorname{Cos} ka - \frac{2P_1}{a}\operatorname{Cos} ka\,\Psi_2(0) - \frac{2}{a}P_2\operatorname{Cos} k(a-\beta_2 a)\left[\Psi_2(0)\operatorname{Cos} k\beta_2 a + \right.$$
$$\left. + \Psi_2'(0)\frac{\operatorname{Sen} k\beta_2 a}{k} - \frac{2P_1}{ak}\Psi_2(0)\operatorname{Sen} k\beta_2 a\right]$$

Al expander el último término del lado derecho

$$e^{ik'a}\Psi_2'(0) = -\Psi_2(0)\, k\operatorname{Sen} ka + \Psi_2'(0)\operatorname{Cos} ka - \frac{2P_1}{a}\operatorname{Cos} ka\,\Psi_2(0) +$$
$$- \frac{2P_2}{a}\operatorname{Cos} k(a-\beta_2 a)\operatorname{Cos} k\beta_2 a\,\Psi_2(0) - \frac{2}{a}P_2\operatorname{Cos}(a-\beta_2 a)\frac{\operatorname{Sen} k\beta_2 a}{k}\Psi_2'(0) +$$
$$+ \frac{4P_2P_1}{ka^2}\operatorname{Cos} k(a-\beta_2 a)\operatorname{Sen} k\beta_2 a\,\Psi_2(0)$$

y agrupar se llega a

$$\Psi_2(0)\left[-k\operatorname{Sen} ka - \frac{2P_1}{a}\operatorname{Cos} ka - \frac{2P_2}{a}\operatorname{Cos} k(a-\beta_2 a)\operatorname{Cos} k\beta_2 a + \frac{4P_1P_2}{ka^2}\operatorname{Cos} k(a-\beta_2 a)\operatorname{Sen} k\beta_2 a\right] +$$
$$+ \Psi_2'(0)\left[-e^{+ik'a} + \operatorname{Cos} ka - \frac{2}{a}P_2\operatorname{Cos} k(a-\beta_2 a)\frac{\operatorname{Sen} k\beta_2 a}{k}\right] = 0$$

Al sustituír

$$\delta_4 = \frac{-2}{ak} P_2 \operatorname{Cos} k(a-\beta_2 a)\operatorname{Sen} k\beta_2 a$$

$$\delta_3 = \frac{-2P_1}{a} \,\mathrm{Cos}ka - \frac{2P_2}{a} \,\mathrm{Cos}\,k(a-\beta_2 a)\,\mathrm{Cos}\,k\beta_1 a \,+$$

$$+ \frac{4P_1P_2}{ka^2} \,\mathrm{Cos}\,k(a-\beta_2 a)\,\mathrm{Sen}\,k\beta_1 a$$

en la ecuación anterior y multiplicar por $e^{-ik'a}$ se tiene

$$\Psi_2(0)\left[-ke^{-ik'a}\,\mathrm{Sen}ka + \delta_3\, e^{-ik'a}\right] + \Psi_2'(0)\left[-1 + e^{-ik'a}\,\mathrm{Cos}ka + e^{-ik'a}\,\delta_4\right] = 0 \qquad (4.4.8)$$

(4.4.6) y (4.4.8) forman un sistema de ecuaciones lineales en $\Psi_2(0)$ y $\Psi_2'(0)$

$$\Psi_2(0)\left[\mathrm{Cos}ka - e^{+ik'a} + \delta_1\right] + \Psi_2'(0)\left[\frac{\mathrm{Sen}ka}{k} + \delta_2\right] = 0$$

$$\Psi_2(0)\left[-k\,\mathrm{Sen}ka + \delta_3\right]e^{-ik'a} + \Psi_2'(0)\left[e^{-ik'a}\,\mathrm{Cos}ka - 1 + \delta_4\, e^{-ik'a}\right] = 0$$

entonces

$$\mathrm{Det}_2 = \begin{vmatrix} \mathrm{Cos}ka - e^{ik'a} + \delta_1 & \frac{\mathrm{Sen}ka}{k} + \delta_2 \\ e^{-ik'a}\left[-k\,\mathrm{Sen}ka + \delta_3\right] & e^{-ik'a}\,\mathrm{Cos}ka - 1 + \delta_4\, e^{-ik'a} \end{vmatrix} = 0 \qquad (4.4.9)$$

Los términos δ_1 , δ_2 , δ_3 y δ_4 involucran el tamaño del potencial y aparecen por causa de la introducción de uno o más átomos en la celda unitaria.

Sea Z_1 la contribución de la diagonal principal al determinante

$$Z_1 = \left(\mathrm{Cos}ka - e^{ik'a} + \delta_1\right)\left(e^{-ik'a}\,\mathrm{Cos}ka - 1 + \delta_4\, e^{-ik'a}\right)$$

$$= \mathrm{Cos}^2ka\; e^{-ik'a} - \mathrm{Cos}ka + \delta_4\, e^{-ik'a}\,\mathrm{Cos}ka - \mathrm{Cos}ka + e^{-ik'a} - \delta_4 \,+$$

$$+ \delta_1\, e^{-ik'a}\,\mathrm{Cos}ka - \delta_1 + \delta_1\delta_4\, e^{-ik'a}$$

$$= e^{ik'a} - 2\,\mathrm{Cos}ka - (\delta_1 + \delta_4) + e^{-ik'a}\left[(\delta_1 + \delta_4)\,\mathrm{Cos}ka + \delta_1\,\delta_4\right] + e^{-ik'a}\,\mathrm{Cos}^2ka$$

y sea Z_2 los términos de la otra diagonal

$$Z_2 = -\left[e^{-ik'a} \left[-k \,\mathrm{Sen}\,ka + \delta_3 \right] \left[\frac{1}{k} \mathrm{Sen}\,ka + \delta_2 \right] \right]$$

$$= \left[k\, e^{-ik'a} \mathrm{Sen}\,ka - \delta_3 e^{-ik'a} \right] \left[\frac{1}{k} \mathrm{Sen}\,ka + \delta_2 \right]$$

$$= e^{-ik'a} \mathrm{Sen}^2 ka + \delta_2 k e^{-ik'a} \mathrm{Sen}\,ka - \delta_3 e^{-ik'a} \frac{\mathrm{Sen}\,ka}{k} - \delta_2 \delta_3 e^{-ik'a}$$

$$Z_2 = e^{-ik'a} \mathrm{Sen}^2 ka - e^{-ik'a} \left[\delta_3 \frac{\mathrm{Sen}\,ka}{k} - \delta_2 k \,\mathrm{Sen}\,ka + \delta_2 \delta_3 \right]$$

En virtud que $\mathrm{Det}_2 = 0$ se tiene que

$$Z_1 + Z_2 = 0$$

$$\mathrm{Det}_2 = e^{ik'a} - 2\cos ka - (\delta_1 + \delta_4) + e^{-ik'a} \cos^2 ka + e^{-ik'a} \left[(\delta_1 + \delta_4) \cos ka + \delta_1 \delta_4 \right] +$$

$$+ e^{-ik'a} \mathrm{Sen}^2 ka - e^{-ik'a} \left[\delta_3 \frac{\mathrm{Sen}\,ka}{k} - \delta_2 k \,\mathrm{Sen}\,ka + \delta_2 \delta_3 \right] = 0$$

$$= -2\cos ka - (\delta_1 + \delta_4) + e^{ik'a} + e^{-ik'a} (\cos^2 ka + \mathrm{Sen}^2 ka) + e^{-ik'a} \left[(\delta_1 + \delta_4) \cos ka + \right.$$

$$\left. \delta_1 \delta_4 - \delta_3 \frac{\mathrm{Sen}\,ka}{k} + \delta_2 k \,\mathrm{Sen}\,ka - \delta_2 \delta_3 \right] = 0$$

$$\mathrm{Det}_2 = -2\cos ka - (\delta_1 + \delta_4) + 2\cos k'a + e^{-ik'a} \left[(\delta_1 + \delta_4) \cos ka + \delta_1 \delta_4 - \delta_3 \frac{\mathrm{Sen}\,ka}{k} + \right.$$

$$\left. + \delta_2 k \,\mathrm{Sen}\,ka - \delta_2 \delta_3 \right] = 0 \qquad (4.4.10)$$

Las soluciones de interés son aquellas que representan ondas viajeras ($\Psi(x+na) = \exp(ik'na)\,\Psi(x)$) ; por ello se tomará k' como un número real. Para esto se deben cancelar los coeficientes de $e^{-ik'a}$ en la ecuación (4.4.10)

$$-2\cos ka - (\delta_1 + \delta_4) + 2\cos k'a = 0$$

$$2\cos k'a = 2\cos ka + (\delta_1 + \delta_4)$$

$$\cos k'a = \cos ka + \frac{(\delta_1 + \delta_4)}{2} \qquad (4.4.11)$$

que es una relación suficientemente general.

Como se considera el caso diatómico hay que sustituír los valores de δ_1 y δ_4 en la ecuación (4.4.11)

$$\cos k'a = \cos ka + \frac{1}{2}\left[\frac{-2P_1}{ak}\,\text{Sen}\,ka - \frac{2P_2}{ak}\cos k\beta_2 a\,\text{Sen}\,k(a-\beta_2 a) + \right.$$

$$\left. + \frac{4P_1P_2}{a^2k^2}\,\text{Sen}\,k\beta_2 a\,\text{Sen}\,k(a-\beta_2 a) - \frac{2P_2}{ak}\,\text{Sen}\,k\beta_2 a\cos k(a-\beta_2 a)\right]$$

Al simplificarla encontramos

$$\cos k'a = \cos ka - \frac{P_1}{ak}\,\text{Sen}\,ka - \frac{P_2}{ak}\cos k\beta_2 a\,\text{Sen}\,k(a-\beta_2 a) +$$

$$- \frac{P_2}{ak}\,\text{Sen}\,k\beta_2 a\cos k(a-\beta_2 a) + \frac{2P_1P_2}{a^2k^2}\,\text{Sen}\,k(a-\beta_2 a)\,\text{Sen}\,k\beta_2 a$$

$$= \cos ka - \frac{P_1}{ak}\,\text{Sen}\,ka - \frac{P_2}{ak}\,\text{Sen}\,(k\beta_2 a + ka - k\beta_2 a) +$$

$$+ \frac{2P_1P_2}{a^2k^2}\,\text{Sen}\,k(a-\beta_2 a)\,\text{Sen}\,k\beta_2 a$$

$$= \cos ka - \frac{P_1}{ak}\,\text{Sen}\,ka - \frac{P_2}{ak}\,\text{Sen}\,ka +$$

$$+ \frac{2P_1P_2}{a^2k^2}\,\text{Sen}\,k(a-\beta_2 a)\,\text{Sen}\,k\beta_2 a$$

$$\cos k'a = \cos ka - \frac{\text{Sen}\,ka}{ak}\left[P_1 + P_2\right] +$$

$$+ \frac{2P_1P_2}{a^2k^2}\,\text{Sen}\,k(a-\beta_2 a)\cdot\text{Sen}\,k\beta_2 a \qquad (4.4.12)$$

que es la relación de dispersión para el caso diatómico.

4.5. Caso triatómico

Como se vio anteriormente la relación de dispersión dada por la ecuación (4.4.11), para cualquier estructura monodimensional periódica, basada en funciones delta de Dirac depende únicamente de δ_1 y δ_4. Entonces, se puede obtener la relación entre la energía y el momentum para cualquier número P de átomos diferentes. Se procederá a analizar el caso triatómico (P = 3).

Sean $\beta_1 a$, $\beta_2 a$ y $\beta_3 a$ las localizaciones de los átomos en la celda unitaria ($\beta_i < 1$, i = 1,2,3) y P_1, P_2, P_3 el tamaño de la función delta de Dirac en esos puntos. Entonces la energía potencial para la red completa puede ser escrita como

$$U(x) = a \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^{3} P_i \, \delta\left[x - (n + \beta_i)a\right] \qquad (4.5.1)$$

con $\beta_1 = 0$.

Se puede encontrar la función de onda utilizando las ecuaciones (4.3.4), (4.3.6) y la ecuación anterior

$$\left\{ \frac{L\{U(x)\,\Psi(x)\}}{\lambda^2 + k^2} \right\} = a \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{3} P_i \, \Psi(na + \beta_i) \, \mathrm{Sen}\,k(x - na - \beta_i a) \; U(x - na - \beta_i a) \qquad (4.5.2)$$

$$\Psi_3(x) = \Psi(0) \, \mathrm{Cos}\,kx + \Psi'(0) \frac{\mathrm{Sen}\,kx}{k} + \frac{2}{ak} \sum_{i=1}^{3} P_i \, \Psi_3(\beta_i a) \, \mathrm{Sen}\,k(x - \beta_i a) \; U(x - \beta_i a) \qquad (4.5.3)$$

Es fácil ver de la estructura de la ecuación (4.5.3) que se cumple la siguiente relación

$$\Psi_3(x) = \Psi_2(x) - \frac{2}{ak} P_3 \Psi_3(\beta_3 a) \times \operatorname{Sen}[k(x-\beta_3 a)]\, U(x-\beta_3 a) \qquad (4.5.4)$$

Al aplicar las condiciones de frontera (4.1.13) y (4.1.14) se llega a la siguiente relación para el caso triatómico (Apéndice A)

$$\begin{aligned} \operatorname{Cos} k'a = {} & \operatorname{Cos} ka - \frac{P_1}{ak}\operatorname{Sen} ka - \frac{P_2}{ak}\operatorname{Sen} ka - \frac{P_3}{ak}\operatorname{Sen} ka + \\ & + \frac{2P_1P_2}{a^2k^2}\operatorname{Sen} k\beta_2 a \operatorname{Sen} k(a-\beta_2 a) + \frac{2P_1P_3}{a^2k^2}\operatorname{Sen} k\beta_3 a \operatorname{Sen} k(a-\beta_3 a) + \\ & + \frac{2P_2P_3}{a^2k^2}\operatorname{Sen} k(\beta_3 a-\beta_2 a)\operatorname{Sen}(k\beta_2 a + ka - k\beta_3 a) + \\ & - \frac{4P_1P_2P_3}{(ak)^3}\operatorname{Sen} k\beta_2 a \operatorname{Sen} k(a-\beta_3 a)\operatorname{Sen} k(\beta_3 a-\beta_2 a) \end{aligned}$$

5. CONCLUSIONES

5.1. En una red cristalina sin imperfecciones un electrón se propaga sin sufrir efectos de scattering.

5.2. El método de transformada de Laplace, para encontrar relaciones de dispersión, puede ser generalizado al caso de un cristal monodimensional con un número arbitrario de átomos por celda unitaria.

5.3. Para el caso en que el electrón se considera como una partícula libre, o sea cuando se ignoran los efectos de la red, se encuentra que la energía depende del cuadrado del número de onda.

5.4. Si el tamaño P de la función delta de Dirac se hace tender a infinito, en el caso de un átomo por celda unitaria

$$\text{Cos}k' = \text{Cos}ka - (P\ \text{Sen}ka)/ak$$

se tienen soluciones finitas para esta relación de dispersión sólo si Senka = 0, o sea $ka = n\pi$, que es el caso que corresponde a los niveles de energía para una partícula encerrada en una barrera infinita de potencial.

BIBLIOGRAFIA

Churchill, Ruel. *Operational Mathematics*. Tercera edición.
1972 McGraw Hill, U.S.A.

Dicke, Robert H. y James P. Wittke. *Introduction to Quantum Mechanics*.
1960 Addison Wesley, U.S.A.

Feynman, R. et.al. *Física*, volumen III. Fondo Educativo
1971 Interamericano, E.U.A.

Kittel, Charles. *Introducción a la Física del Estado Sólido*.
1975 Editorial Reverté, Madrid.

Santana, Paulo Henrique y Abel Rosoto. "Uso de la transfor-
1973 mada de Laplace para resolver el problema de potencial monodimensional periódico." *American Journal of Physics*, volumen 41, tomo 10. Octubre.

APENDICE A

Deducción para la relación de dispersión en el caso triatómico

$$\Psi_3(x) = \Psi_2(x) - \frac{2}{ak} P_3 \Psi_3(\beta_3 a)\, \mathrm{Sen}\, k(x-\beta_3 a)\, U(x-\beta_3 a) \qquad (A.1)$$

al sustituír

$$\Psi_2(x) = \Psi_1(x) - \frac{2}{ak} P_2 \Psi_2(\beta_2 a) \times \mathrm{Sen}\,(k(x-\beta_2 a))\, U(x-\beta_2 a)$$

$$\Psi_1(x) = \Psi_1(0) \mathrm{Cos} kx + \Psi_1'(0) \frac{\mathrm{Sen} kx}{k} - \frac{2P_1}{ak} \Psi_1(0)\, \mathrm{Sen} kx\, U(x)$$

entonces

$$\Psi_3(x) = \Psi_3(0) \mathrm{Cos} kx + \Psi_3'(0) \frac{\mathrm{Sen} kx}{k} - \frac{2P_1}{ak} \Psi_3(0)\, \mathrm{Sen} kx\, U(x) - \frac{2}{ak} P_2 \Psi_2(\beta_2 a)\, \mathrm{Sen}\, k(x-\beta_2 a)\, U(x-\beta_2 a) +$$

$$- \frac{2}{ak} P_3 \Psi_3(\beta_3 a)\, \mathrm{Sen}\, k(x-\beta_2 a)\, U(x-\beta_3 a) \qquad (A.2)$$

Al aplicar la condición (4.1.13) a $\Psi_3(x)$ se tiene

$$e^{ik'a} \Psi_3(0) = \Psi_3(0) \mathrm{Cos} ka + \Psi_3'(0) \frac{\mathrm{Sen} ka}{k} - \frac{2P_1}{ak} \Psi_3(0)\, \mathrm{Sen} ka +$$

$$- \frac{2}{ak} P_2 \Psi_2(\beta_2 a)\, \mathrm{Sen}\, k(a-\beta_2 a) - \frac{2}{ak} P_3 \Psi_3(\beta_3 a)\, \mathrm{Sen}\, k(a-\beta_3 a) \qquad (A.3)$$

De (A.1) y (A.2) es evidente que

$$\Psi_2(\beta_2 a) = \Psi_3(0) \mathrm{Cos}\, k\beta_2 a + \frac{1}{k} \Psi_3'(0)\, \mathrm{Sen}\, k\beta_2 a - \frac{2P_1}{ak} \Psi_3(0)\, \mathrm{Sen}\, k\beta_2 a$$

$$\Psi_3(\beta_3 a) = \Psi_3(0) \mathrm{Cos}\, k\beta_3 a + \Psi_3'(0) \frac{\mathrm{Sen}\, k\beta_3 a}{k} - \frac{2P_1}{ak} \Psi_3(0)\, \mathrm{Sen}\, k\beta_3 a +$$

$$- \frac{2}{ak} P_2 \Psi_2(\beta_2 a)\, \mathrm{Sen}\, k(\beta_3 a - \beta_2 a)$$

al sustituír estas últimas dos ecuaciones en (A.3) se encuentra que

$$e^{ik'a} \Psi_3(0) = \Psi_3(0) \mathrm{Cos} ka + \frac{\Psi_3'(0)\, \mathrm{Sen} ka}{k} - \frac{2P_1}{ak} \Psi_3(0)\, \mathrm{Sen} ka +$$

$$+ -\frac{2P_2}{ak} \operatorname{Sen} k(a-\beta_2 a)\left[\Psi_3(0)\operatorname{Cos} k\beta_2 a + \Psi_3'(0)\frac{\operatorname{Sen} ka\beta_2}{k} - \frac{2P_1}{ak}\Psi_3(0)\operatorname{Sen} k\beta_2 a\right] +$$

$$- \frac{2P_3}{ak} \operatorname{Sen} k(a-\beta_3 a)\left[\Psi_3(0)\operatorname{Cos} k\beta_3 a + \Psi_3'(0)\frac{\operatorname{Sen} k\beta_3 a}{k} - \frac{2P_1}{ak}\Psi_3(0)\operatorname{Sen} k\beta_3 a +\right.$$

$$- \frac{2P_2}{ak} \operatorname{Sen} k(\beta_3 a-\beta_2 a)\operatorname{Cos} k\beta_2 a\, \Psi_3(0) - \frac{2P_2}{ak}\operatorname{Sen} k(\beta_3 a-\beta_2 a)\Psi_3'(0)\frac{\operatorname{Sen} k\beta_2 a}{k} +$$

$$\left. + \frac{4P_1P_2}{(ak)^2}\operatorname{Sen} k(\beta_3 a-\beta_2 a)\operatorname{Sen} k\beta_2 a\, \Psi_3(0)\right]$$

Según la ecuación (4.4.11) la relación de dispersión sólo depende de δ_1 y δ_4 por lo que únicamente se toman en cuenta los coeficientes de $\Psi_3(0)$; entonces

$$\delta_1 = -\frac{2P_1}{ak}\operatorname{Sen} ka - \frac{2P_2}{ak}\operatorname{Sen}(k(a-\beta_2 a))\operatorname{Cos} k\beta_2 a + \frac{4P_1P_2}{(ak)^2}\operatorname{Sen}(k(a-\beta_2 a))\operatorname{Sen} k\beta_2 a +$$

$$- \frac{2P_3}{ak}\operatorname{Sen}(k(a-\beta_3 a))\operatorname{Cos} k\beta_3 a + \frac{4P_1P_3}{(ak)^2}\operatorname{Sen}(k(a-\beta_3 a))\operatorname{Sen} k\beta_3 a +$$

$$+ \frac{4P_2P_3}{(ak)^2}\operatorname{Sen} k(\beta_3 a-\beta_2 a)\operatorname{Cos} k\beta_2 a\operatorname{Sen} k(a-\beta_3 a) +$$

$$- \frac{8P_1P_2P_3}{a^3k^3}\operatorname{Sen} k\beta_2 a\operatorname{Sen}\left[k(\beta_3 a-\beta_2 a)\right]\operatorname{Sen}(k(a-\beta_3 a))$$

Al aplicar la condición (4.1.14) se encuentra que

$$e^{ik'a}\Psi_3'(0) = -\Psi(0)k\operatorname{Sen} ka + \Psi'(0)\operatorname{Cos} ka - \frac{2P_1}{a}\operatorname{Cos} ka\, \Psi_3(0) +$$

$$- \frac{2P_2}{a}\Psi_2(\beta_2 a)\operatorname{Cos}\left[k(a-\beta_2 a)\right] - \frac{2P_3}{a}\operatorname{Cos}\left[k(a-\beta_3 a)\right]\cdot\Psi_3(\beta_3 a)$$

$$e^{ik'a}\Psi_3'(0) = -\Psi(0)k\operatorname{Sen} ka + \Psi'(0)\operatorname{Cos} ka - \frac{2P_1}{a}\operatorname{Cos} ka\, \Psi_3(0) +$$

$$- \frac{2P_2}{a}\operatorname{Cos}\left[k(a-\beta_2 a)\right]\left[\Psi_3(0)\operatorname{Cos} k\beta_2 a + \Psi_3'(0)\frac{\operatorname{Sen} k\beta_2 a}{k} - \frac{2P_1}{ak}\Psi_3(0)\operatorname{Sen} k\beta_2 a\right] +$$

$$- \frac{2P_3}{a}\operatorname{Cos}\left[k(a-\beta_3 a)\right]\left[\Psi_3(0)\operatorname{Cos} k\beta_3 a + \Psi_3'(0)\frac{\operatorname{Sen} k\beta_3 a}{k} - \frac{2P_1}{ak}\Psi_3(0)\operatorname{Sen} k\beta_3 a +\right.$$

$$- \frac{2P_2}{ak}\operatorname{Cos} k\beta_2 a\operatorname{Sen}\left[k(\beta_3 a-\beta_2 a)\right]\Psi_3(0) - \frac{2P_2}{ak^2}\operatorname{Sen} k\beta_2 a\operatorname{Sen}\left[k(\beta_3 a-\beta_2 a)\right]\Psi_3'(0) +$$

$$\left. + \frac{4P_1P_2}{(ak)^2}\operatorname{Sen} k\beta_2 a\operatorname{Sen}\left[k(\beta_3 a-\beta_2 a)\right]\Psi_3(0)\right]$$

Para encontrar δ_4 sólo se consideran los coeficientes de $\Psi_3'(0)$. Así se tiene que

$$\delta_4 = \frac{-2P_2}{ak}\,\mathrm{Cos}\left[k(a-\beta_2 a)\right]\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a - \frac{2P_3}{ak}\,\mathrm{Cos}\left[k(a-\beta_3 a)\right]\mathrm{Sen}\,k\beta_3 a \;+$$

$$+\;\frac{4P_2P_3}{(ak)^2}\,\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a\,\mathrm{Cos}\left[k(a-\beta_3 a)\right]\;\mathrm{Sen}\left[k(\beta_3 a-\beta_2 a)\right]$$

al utilizar la ecuación (4.4.11) se obtiene

$$\mathrm{Cos}\,k'a = \mathrm{Cos}\,ka - \frac{P_1}{ak}\,\mathrm{Sen}\,ka - \frac{P_2}{ak}\,\mathrm{Sen}\left[k(a-\beta_2 a)\right]\mathrm{Cos}\,k\beta_2 a \;+$$

$$+\;\frac{2P_1P_2}{(ak)^2}\,\mathrm{Sen}\left[k(a-\beta_2 a)\right]\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a - \frac{P_3}{ak}\,\mathrm{Sen}\left[k(a-\beta_3 a)\right]\mathrm{Cos}\,k\beta_3 a \;+$$

$$+\;\frac{2P_1P_3}{(ak)^2}\,\mathrm{Sen}\left[k(a-\beta_3 a)\right]\mathrm{Sen}\,k\beta_3 a + \frac{2P_2P_3}{(ak)^2}\,\mathrm{Sen}\,k(\beta_3 a-\beta_2 a)\,\mathrm{Cos}\,k\beta_2 a\,\mathrm{Sen}\,k(a-\beta_3 a) \;+$$

$$-\;4P_1P_2P_3\,\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a\;\mathrm{Sen}\left[k(\beta_3 a-\beta_2 a)\right]\;\mathrm{Sen}\left[k(a-\beta_3 a)\right] \;+$$

$$-\;\frac{P_2}{ak}\,\mathrm{Cos}\left[k(a-\beta_2 a)\right]\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a - \frac{P_3}{ak}\,\mathrm{Cos}\left[k(a-\beta_3 a)\right]\mathrm{Sen}\,k\beta_3 a \;+$$

$$+\;\frac{2P_2P_3}{(ak)^2}\,\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a\,\mathrm{Cos}\left[k(a-\beta_3 a)\right]\;\mathrm{Sen}\left[k(\beta_3 a-\beta_2 a)\right]$$

y, finalmente, después de desarrollar y simplificar se tiene

$$\mathrm{Cos}\,k'a = \mathrm{Cos}\,ka - \frac{P_1}{ak}\,\mathrm{Sen}\,ka - \frac{P_2}{ak}\,\mathrm{Sen}\,ka - \frac{P_3}{ak}\,\mathrm{Sen}\,ka \;+$$

$$+\;\frac{2P_1P_2}{(ak)^2}\,\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a\;\mathrm{Sen}\left[k(a-\beta_2 a)\right] + \frac{2P_1P_3}{(ak)^2}\,\mathrm{Sen}\,k\beta_3 a\;\mathrm{Sen}\,k(a-\beta_3 a) \;+$$

$$+\;\frac{2P_2P_3}{(ak)^2}\,\mathrm{Sen}\left[k(\beta_3 a-\beta_2 a)\right]\;\mathrm{Sen}\left[k\beta_2 a + ka - k\beta_3 a\right] \;+$$

$$-\;\frac{4P_1P_2P_3}{(ak)^3}\,\mathrm{Sen}\,k\beta_2 a\;\mathrm{Sen}\,k(a-\beta_3 a)\;\mathrm{Sen}\left[k(\beta_3 a-\beta_2 a)\right]$$

APENDICE B

Transformadas de Laplace utilizadas en el trabajo

$$f(\lambda) = L\{F(x)\} \equiv \int_0^\infty F(x)\, e^{-\lambda x}\, dx \qquad (B.1)$$

Dada $f(\lambda)$ se puede obtener $F(x)$ para una función que satisface (B.1). Así, la transformada inversa de Laplace de una función $f(\lambda)$ es una función $F(x)$ que satisface

$$F(x) = L^{-1}\{f(\lambda)\} \qquad (B.2)$$

Si se cumple la ecuación (B.2)

$$L^{-1}\{e^{-a\lambda} f(\lambda)\} = F(x-a)\, U(x-a) \qquad (B.3)$$

donde la función de salto $U(x)$ viene dada por

$$U(x-a) = 1 \qquad x > a$$

$$U(x-a) = 0 \qquad x < a$$

Se vio en el capítulo 2 que si a_1 y a_2 son constantes

$$L^{-1}\{a_1 f_1(\lambda) + a_2 f_2(\lambda)\} = a_1 F_1(x) + a_2 F_2(x) \qquad (B.4)$$

Si $f(\lambda) = 1/(\lambda^2 + k^2)$, $F(x) = \frac{\text{Sen}\,kx}{k}$ (B.5)

Además, si $f(\lambda) = \lambda/(\lambda^2 + k^2)$, $F(x) = \text{Cos}\,kx$ (B.6)

Combinando las ecuaciones (B.5) y (B.6) con (B.3) se nota que

$$f(\lambda) = \frac{e^{-a\lambda}}{\lambda^2 + k^2}$$

Por lo tanto

$$F(x) = \frac{\operatorname{Sen} k(x-a)}{k} \, U(x-a)$$

Además

$$f(\lambda) = \frac{\lambda e^{-a\lambda}}{\lambda^2 + k^2}$$

implica

$$F(x) = \operatorname{Cos} k(x-a) \, U(x-a)$$

Se demostró en el capítulo 2 que

$$L\left\{\frac{dF(x)}{dx}\right\} = \lambda f(\lambda) - F(0)$$

y $$L\left\{\frac{d^2 F(x)}{dx^2}\right\} = \lambda^2 f(\lambda) - \lambda F(0) - \left.\frac{dF}{dx}\right|_{x=0}$$

APENDICE C

La función delta de Dirac

La función delta de Dirac se define, para el caso mono-dimensional, de la siguiente manera

$$\delta(x) = 0 \qquad x \neq 0 \tag{C.1}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\, dx = 1 \tag{C.2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, \delta(x)\, dx = f(0) \tag{C.3}$$

aquí se asume que $\delta(x)$ es continua en x = 0.

Las fórmulas equivalentes con traslación son

$$\delta(x-a) = 0 \qquad x \neq a$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, \delta(x-a) = f(a)$$