Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

DINÁMICA DE UN ELECTRÓN EN UNA CADENA LINEAL

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

Licenciado en Física

por

Jesús Israel Morán Cortés

Asesorado por

Dr. Benito Flores Desirena

Puebla Pue.
Agosto de 2020

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

DINÁMICA DE UN ELECTRÓN EN UNA CADENA LINEAL

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

Licenciado en Física

por

Jesús Israel Morán Cortés

Asesorado por

Dr. Benito Flores Desirena

Puebla Pue.
Agosto de 2020

Título: DINÁMICA DE UN ELECTRÓN
EN UNA CADENA LINEAL
Estudiante: Jesús Israel Morán Cortés

COMITÉ

Dr. Roberto Ramírez Sánchez
Presidente

M.C. Pedro Tolentino Eslava
Secretario

Dr. Martín Rodolfo Palomino Merino
Vocal

Dr. Luis Manuel Arévalo Aguilar
Vocal

Dr. Benito Flores Desirena
Asesor

Dedico este trabajo a mis amados padres Rocío Cortés Barojas y Héctor Morán Maya; a mi querido hermano Miguel Morán Cortés; a mis abuelitos Amira Maya Lopez, Héctor Morán Ponce e Isidro Cortés Munive, pero en especial, a la memoria de mi abuela Rosario Barojas Sánchez; a mi profesor de preparatoria, el Dr. Miguel Ángel Zenteno Flores y finalmente, a mi amigo, el Dr. Iván Hernández Orzuna, quienes ya no están con nosotros.

Agradecimientos

Agradezco a Dios por colmarme de tantas bendiciones.

Agradezco a mis padres por su gran amor y apoyo incondicional durante toda mi vida, a mi querido hermano por su afecto, confianza y lealtad, y a mis abuelitos por su cariño y cuidados.

Agradezco a mis amigos por su motivación, su confianza, su apoyo y por haber compartido estos años de vida conmigo.

Agradezco a mis profesores a lo largo de mi vida estudiantil por compartir sus conocimientos, en particular al Dr. Benito Flores Desirena por asesorarme en el presente trabajo y por su continua motivación.

Índice general

Resumen **1**

Introducción **2**

1. Primer Modelo **5**
1.1. Un átomo . . . 5
1.2. Un par de átomos . . . 8
1.3. N Átomos idénticos . . . 10
1.4. Generalización . . . 11

2. Segundo Modelo **15**
2.1. Un Átomo . . . 15
2.2. Un par de átomos . . . 17
2.3. N Átomos idénticos . . . 20
2.4. N Moléculas Diatómicas . . . 22
2.5. Generalización . . . 25

3. Fórmula analítica general para N átomos idénticos **27**
3.1. Primer Modelo . . . 28
3.2. Segundo Modelo . . . 30
3.3. Fórmula general para energías ligadas ante N pozos de potencial . . . 31

4. Energías **35**
4.1. Análisis dimensional . . . 35
4.2. Primer Modelo . . . 37
4.2.1. Clúster lineal de N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio 37
4.2.2. Clúster lineal de N átomos diferentes distribuidos aleatoriamente en el espacio 39
4.2.3. Clúster lineal de N moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio . . . 40
4.2.4. Clúster lineal de N moléculas diatómicas diferentes distribuidos aleatoriamente en el espacio . . . 48
4.3. Segundo Modelo . . . 49
4.3.1. Clúster lineal de N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio 49
4.3.2. Clúster lineal de N moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio . . . 53
4.4. Comparación de un átomo con una serie infinita de pozos . . . 59

5. Densidades de probabilidad para una cadena lineal **63**
5.1. Cadena lineal de N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio . . . 63
5.1.1. Estado base . . . 64
5.1.2. Densidades de probabilidad del estado base para algunas cadenas lineales . 65

5.1.3. Segundo nivel de energía ligada 65
5.1.4. Densidades de probabilidad para algunas cadenas lineales en el segundo nivel de energía 67
5.1.5. Tercer nivel de energía ligada 68
5.1.6. Otros niveles de energía ligada 69
5.2. Breve análisis para una cadena lineal de $N = 5$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio 70
5.3. Cadena lineal de N átomos diferentes distribuidos aleatoriamente en el espacio . . 72
5.4. Transición de una cadena lineal de N átomos diferentes a una cadena lineal de N átomos idénticos 72

Conclusión **76**

A. Deducción de fórmulas analíticas particulares para dos átomos idénticos **79**
A.1. Primer modelo 79
A.2. Segundo modelo 80

B. Deducción de fórmulas analíticas particulares para un doble pozo de potencial **81**
B.1. Doble pozo de potencial tipo delta de Dirac 81
B.2. Doble pozo de potencial finito 82

C. Primer modelo: funciones de onda normalizadas y densidades de probabilidad **83**

D. Segundo modelo: funciones de onda normalizadas y densidades de probabilidad **87**

Bibliografía **91**

Resumen

En este trabajo se estudia la dinámica de un electrón a través de una cadena lineal de átomos o moléculas diatómicas y a través de una red. En la interacción electrón-clúster se consideran dos modelos con los cuales se encuentra la energía mecánica del electrón utilizando expresiones analíticas y se estudia las variaciones de los niveles de energía y funciones de onda para encontrar al electrón.

Introducción

En este trabajo se estudiará la dinámica de un electrón a través de una cadena lineal (clúster) de átomos o moléculas diatómicas y a través de una red. En la interacción electrón-clúster se considerarán dos modelos: el primero es un modelo de interacción puntual, representado por pozos de potencial del tipo delta de Dirac y en el segundo modelo se considerarán pozos de potencial rectangulares, además en ambos casos se agregará un potencial de paredes rectangulares de altura infinita en los extremos del clúster, los cuales confinarán al electrón dentro de este sistema.

Para hallar la energía mecánica de un electrón bajo la acción del potencial generado por el clúster lineal, se resolverá la ecuación de Schrödinger; sin embargo, debido a que los potenciales de interacción considerados serán constantes en determinados intervalos espaciales, la solución completa resultará simple, ya que las soluciones en las regiones de potencial constante resultarán sencillas de hallar, al final sólo se deberá conectar las soluciones de las distintas regiones espaciales, desde la continuidad de la función de onda y su derivada, para el caso de pozos de potencial rectangular, mientras que para los pozos de potencial tipo delta de Dirac, la última condición deberá cambiarse por otra que resulta desde la ecuación de Schrödinger, la cual dará una discontinuidad en la derivada mediada por la profundidad del pozo.

En el primer capítulo se analizará el primer modelo, mientras que en el segundo capítulo se analizará el segundo modelo para los cuales se obtendrán métodos matriciales generales para encontrar la solución no trivial a ambos sistemas y como parte de las soluciones se hallarán expresiones analíticas para determinar los niveles de energía del electrón ante el clúster lineal de átomos o moléculas diatómicas y a través de una red, esto último será analizado en el tercer capítulo. Además, en el cuarto capítulo se analizarán los efectos de los parámetros del potencial de interacción en los niveles de energía y funciones de onda.

En el quinto y último capítulo, también se estudiarán las variaciones de los niveles de energía y funciones de onda al introducir un pequeño desorden en la cadena lineal, respecto a la profundidad de los pozos tipo delta de Dirac. Al finalizar, se obtendrá una relación para las amplitudes de probabilidad entre los sistemas ordenado y desordenado en el caso de los potenciales tipo delta de Dirac.

Capítulo 1

Primer Modelo

En este capítulo analizaremos la dinámica de un electrón cuando éste se mueve a través de una cadena lineal de N_2 moléculas, donde cada molécula está formada por N_1 átomos y la interacción de los átomos de la cadena con el electrón se ha modelado por pozos de potencial delta de Dirac con dos barreras de potencial infinitas en los extremos del clúster para simular la cohesión de la cadena. Es claro que este sistema presenta energías ligadas ($E < 0$) y energías dispersivas ($E > 0$), las cuales se han estudiado usando la ecuación de Schrödinger unidimensional sin considerar la dependencia temporal de la función de onda.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{1.1}$$

Asimismo, se obtienen ecuaciones analíticas, en términos de las profundidades atómicas y de la separación entre los átomos y entre las moléculas, desde donde pueden determinarse las energías permitidas para un átomo, un par de átomos y una molécula diatómica. De manera general, se deduce una matriz de transición asociada a la cadena lineal de N_2 moléculas formadas por N_1 átomos cada una y usando tal matriz, es posible obtener cada uno de los resultados mostrados en este capítulo.

1.1. Un átomo

En esta sección se expone el caso más simple de un átomo modelado por un pozo de potencial delta de Dirac con una profundidad $a_0 > 0$. El electrón estará sometido a dos barreras de potencial infinitas en los extremos, las cuales se encuentran a distancias a_1 y a_2 del átomo, respectivamente. Este sencillo modelo se muestra en la *Figura 1.1*.

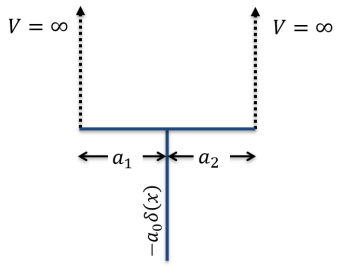

Figura 1.1: Potencial de interacción de un electrón con una cadena de un sólo átomo, el pozo de potencial corresponde a una delta de Dirac con intensidad negativa.

Usamos la ecuación de Schrödinger para hallar la energía a partir de la deducción de una expresión anlítica. Iniciamos el análisis para energías ligadas, definiendo al potencial y la energía de la siguiente manera:

$$V(x) \equiv -\frac{\hbar^2}{2\mu} a_0 \delta(x - a_1) \qquad y \qquad E \equiv -\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu},$$

se observa que a_0 y k deben tener unidades de inverso de distancia, ya que como sabemos $\delta(x - a_1)$ también tiene unidades de inverso de distancia. Igualmente, comentamos que hemos escogido $E < 0$ con $k \in \mathbb{R}$ debido a que estamos interesados en los niveles de energía ligados. Entonces, la ecuación (1,1) es de la siguiente forma:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - k^2\psi(x) = -a_0\delta(x - a_1)\psi(x). \tag{1.2}$$

En el diagrama de la *Figura 1.1* para este problema, se consideran dos regiones. Por esta razón, la solución general a la ecuación (1,2) está dada por:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A_1 e^{kx} + B_1 e^{-kx} & \text{si} \qquad 0 \leq x \leq a_1 \\ \psi_2(x) = A_2 e^{kx} + B_2 e^{-kx} & \text{si} \quad a_1 < x \leq a_1 + a_2. \end{cases} \tag{1.3}$$

Debido a las barreras de potencial infinitas en los extremos, se tiene que la función de onda debe anularse en $x = 0$ y en $x = a_1 + a_2$. Por la forma del potencial, la función de onda debe ser continua en $x = a_1$; sin embargo, la derivada de la función de onda presenta una discontinuidad en $x = a_1$ determinada por la intensidad que acompaña a la función $\delta(x - a_1)$, lo cual puede verificarse si se integra en el intervalo $(a_1 - \epsilon, a_1 + \epsilon)$ a la ecuación (1,2) y se toma el límite cuando $\epsilon \to 0$. Por tales motivos, se deben satisfacer las siguientes condiciones de frontera:

$$\begin{aligned} &\psi_1(x = 0) = 0, \\ &\psi_1(x = a_1) = \psi_2(x = a_1), \\ &\left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{a_1+\epsilon} - \left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{a_1-\epsilon} = -a_0\psi(x = a_1), \\ &\psi_2(x = a_1 + a_2) = 0. \end{aligned} \tag{1.4}$$

Aplicando las condiciones (1,4) en la solución general (1,3), se siguen las siguientes relaciones entre los pares de coeficientes.

$$\begin{aligned} &A_1 + B_1 = 0 \\ &\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \frac{a_0}{2k} \begin{pmatrix} \frac{2k}{a_0} - 1 & -e^{-2ka_1} \\ e^{2ka_1} & \frac{2k}{a_0} + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ &A_2 e^{k(a_1+a_2)} + B_2 e^{-k(a_1+a_2)} = 0 \end{aligned} \tag{1.5}$$

De donde $B_1 = -A_1$, realizando la multiplicación de matrices y sustituyendo el resultado en la última condición de frontera; se obtiene una relación analítica para hallar las energías ligadas a un átomo:

$$k \sinh[k(a_1 + a_2)] - a_0 \sinh(ka_1) \sinh(ka_2) = 0. \tag{1.6}$$

Ahora, estudiemos al sistema de la *Figura 1.2*. Si las barreras están lo suficientemente alejadas del átomo, entonces dicho sistema se puede analizar desde la ecuación obtenida para la *Figura 1.1* y en consecuencia, la ecuación (1,6) se convierte en la sencilla proporción:

$$k = \frac{a_0}{2} \quad \text{si} \quad a_1, a_2 \to +\infty. \tag{1.7}$$

Así, se obtiene una expresión encontrada en el libro *Wave Propagation* por *Markos and Soukoulis* para la energía del estado ligado a un pozo de potencial delta de Dirac:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{a_0^2}{4}. \tag{1.8}$$

Es decir, la solución (1,6) en el modelo para un átomo reproduce el resultado (1,8) de la energía ligada del electrón sometido a un pozo de potencial delta de Dirac sin barreras de potencial infinitas en los extremos. Note que en este caso la posición del origen coincide con la posición de la $\delta(x)$. *Véase Figura 1.2.*

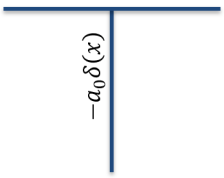

Figura 1.2: Un pozo de potencial delta de Dirac.

Por otro lado, al no considerar las paredes infinitas, resolver la ecuación diferencial (1,1) con un potencial de la forma $V(x) = -a\delta(x)$ donde a es una constante positiva y aplicando adecuadamente las condiciones de frontera, también se obtiene un solo estado ligado:

$$E = -\frac{\mu a^2}{2\hbar^2}, \tag{1.9}$$

la cual se encuentra en el libro *Quantum Mechanics* por *David J. Griffiths*. Asimismo, note que $a_0 = 2\mu a/\hbar^2$ e implica que (1,8) y (1,9) son expresiones equivalentes para la energía ligada al sistema de la *Figura 1.2*.

Regresando al potencial del clúster de la *Figura 1.1*, si queremos encontrar las energías dispersivas, las soluciones son muy similares a las anteriores. Sea

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} > 0 \quad \text{con } k \in \mathbb{R}.$$

La ecuación (1,3) se convierte en:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & \text{si} \quad 0 \le x \le a_1 \\ \psi_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} & \text{si} \quad a_1 < x \le a_1 + a_2, \end{cases}$$

y las relaciones (1,5) ahora son:

$$\begin{aligned} &A_1 + B_1 = 0 \\ &\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \frac{a_0}{2ik}\begin{pmatrix} \frac{2ik}{a_0} - 1 & -e^{-2ika_1} \\ e^{2ika_1} & \frac{2ik}{a_0} + 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ &A_2 e^{ik(a_1+a_2)} + B_2 e^{-ik(a_1+a_2)} = 0 \end{aligned}$$

Por tales ecuaciones, la solución no trivial para hallar las energías dispersivas de la *Figura 1.1* está dada por la siguiente expresión analítica:

$$a_0 \sin(ka_1)\sin(ka_2) - k\sin[k(a_1 + a_2)] = 0 \tag{1.10}$$

Para terminar con esta sección, note que la expresión (1,10) reproduce los niveles de energía para el caso unidimensional de un pozo de potencial inifinito porque haciendo que $a_0 \to 0$, esto da lugar a $\sin[k(a_1 + a_2)] = 0$ y poniendo $L = a_1 + a_2$ donde L es el ancho del pozo; esto implica que $k_n L = n\pi$ con $n = 1, 2, 3, \ldots$. Por lo tanto,

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2\mu L^2} \qquad \text{si } n = 1, 2, \ldots$$

Y como sabemos, corresponden a las energías permitidas para el caso unidimensional de un pozo de potencial infinito.

1.2. Un par de átomos

Proseguimos dando solución para un par de átomos idénticos representados por dos pozos de potencial delta de Dirac con la misma profundidad $a_0 > 0$ y separados por una distancia b, es análogo al caso anterior para un átomo. El diagrama del modelo se muestra en la *Figura 1.3*.

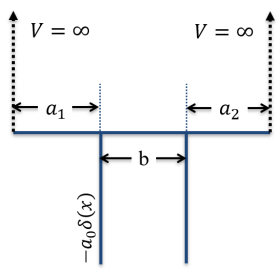

Figura 1.3: Modelo de un par de átomos idénticos.

Primero, se analizarán los niveles de energía ligados, entonces la ecuación de Schrödinger (1,1) a resolver es de la siguiente forma:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - k^2\psi(x) = -a_0[\delta(x - a_1) + \delta(x - (a_1 + b))]\psi(x). \tag{1.11}$$

Dado que el sistema de dos átomos se divide en tres regiones, la solución general a la ecuación (1,11) está dada por:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A_1 e^{kx} + B_1 e^{-kx} & \text{si} \quad 0 \le x \le a_1 \\ \psi_2(x) = A_2 e^{kx} + B_2 e^{-kx} & \text{si} \quad a_1 < x < a_1 + b \\ \psi_3(x) = A_3 e^{kx} + B_3 e^{-kx} & \text{si} \quad a_1 + b \le x \le a_1 + b + a_2. \end{cases} \tag{1.12}$$

Utilizando un razonamiento similar a un átomo, la función de onda debe satisfacer las siguientes condiciones de frontera:

$$\begin{aligned} &\psi_1(x = 0) = 0, \\ &\psi_1(x = a_1) = \psi_2(x = a_1), \\ &\left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{a_1+\epsilon} - \left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{a_1-\epsilon} = -a_0\psi(x = a_1), \\ &\psi_2(x = a_1 + b) = \psi_3(x = a_1 + b), \\ &\left.\frac{d\psi_3}{dx}\right|_{a_1+b+\epsilon} - \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{a_1+b-\epsilon} = -a_0\psi(x = a_1 + b), \\ &\psi_3(x = a_1 + b + a_2) = 0. \end{aligned} \tag{1.13}$$

Note que las primeras tres condiciones de frontera son las mismas para (1,4) y (1,13). Esto implica que, los coeficientes A_2 y B_2 estarán relacionados con A_1 y B_1 por la misma matriz de transición de las ecuaciones (1,5); y para los coeficietes A_3 y B_3, se tiene:

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \frac{a_0}{2k} \begin{pmatrix} \frac{2k}{a_0} - 1 & -e^{-2k(a_1+b)} \\ e^{2k(a_1+b)} & \frac{2k}{a_0} + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \tag{1.14}$$

Observemos que las ecuaciones matriciales de (1,5) y (1,14) relacionan los coeficientes de la función de onda antes y después de cada átomo. De esta manera, podemos obtener la relación entre los coeficientes A_3 y B_3 en términos de A_1 y B_1. Esto es:

$$\begin{aligned} &A_1 + B_1 = 0 \\ &\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \left(\frac{a_0}{2k}\right)^2 \begin{pmatrix} \frac{2k}{a_0} - 1 & -e^{-2k(a_1+b)} \\ e^{2k(a_1+b)} & \frac{2k}{a_0} + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2k}{a_0} - 1 & -e^{-2ka_1} \\ e^{2ka_1} & \frac{2k}{a_0} + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ &A_3 e^{k(a_1+b+a_2)} + B_3 e^{-k(a_1+b+a_2)} = 0. \end{aligned} \tag{1.15}$$

Así, con las ecuaciones (1,15), se obtiene que:

$$\begin{aligned} 0 = &\sinh[k(b + a_1 + a_2)] - \frac{a_0}{k}\{\sinh(ka_2)\sinh[k(b + a_1)] + \sinh(ka_1)\sinh[k(b + a_2)]\} \\ &+ \left(\frac{a_o}{k}\right)^2 \sinh(kb)\sinh(ka_1)\sinh(ka_2) \end{aligned} \tag{1.16}$$

es la solución analítica para saber cuáles son las energías ligadas a un par de átomos idénticos de la *Figura 1.3*.

Un cálculo interesante es poner $b = 0$ y en consecuencia, la ecuación (1,16) se reduce a:

$$k\sinh[k(a_1 + a_2)] - 2a_0\sinh(ka_1)\sinh(ka_2) = 0 \quad \text{si} \quad b = 0 \tag{1.17}$$

Comparando (1,17) con (1,6), se concluye que la primera es la expresión analítica de un átomo con intensidad $2a_0$ para energías ligadas, como debe suceder si se hace el límite en la ecuación (1,11).

Ahora, vamos a estudiar al electrón bajo la acción del potencial mostrado en la *Figura 1.4*, el cual se puede analizar a partir de las ecuaciones obtenidas de la *Figura 1.3* para un par de átomos idénticos, pues multiplicando por $e^{-k(a_1+a_2)}$ a la ecuación (1,16) y alejando infinitamente a las barreas de los átomos, se llega a la solución no trivial para un par de pozos de potencial delta de Dirac. *Véase Figura 1.4*.

$$\left(1 - \frac{a_0}{2k}\right)^2 e^{kb} - \left(\frac{a_0}{2k}\right)^2 e^{-kb} = 0 \tag{1.18}$$

Note que en los casos límites cuando $b \to \infty$ ó $b = 0$, entonces se obtiene la expresión (1,7) para un pozo delta de Dirac con profundidad a_0 y $2a_0$, respectivamente. Nuevamente, a manera de antecedente, es posible encontrar a la expresión analítica (1,18) en el libro *Wave Propagation* por *Markos and Soukoulis*.

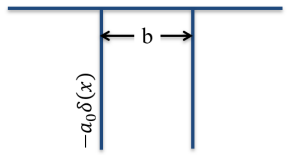

Figura 1.4: Un par de pozos delta de Dirac.

Para cerrar esta sección, se considera $E > 0$ en el diagrama de la *Figura 1.3* y de esta manera se encuentra la solución no trivial para hallar las energías dispersivas a un par de átomos idénticos:

$$\begin{aligned} 0 = &\sin[k(b+a_1+a_2)] - \frac{a_0}{k}\{\sin(ka_1)\sin[k(b+a_2)] + \sin(ka_2)\sin[k(b+a_1)]\} \\ &+ \left(\frac{a_0}{k}\right)^2 \sin(kb)\sin(ka_1)\sin(ka_2). \end{aligned} \tag{1.19}$$

La ecuación (1,19) puede determinarse por medio de dos caminos. El primero es partiendo de la solución a la ecuación de Schrödinger con:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} > 0,$$

y aplicando las respectivas condiciones de frontera (como se mostró para energías ligadas), consecuentemente se obtienen unas ecuaciones similares a (1,14), las cuales se reducen a la ecuación (1,19) para energías dispersivas. Por el primer camino de obtener a esta ecuación, podemos intuir que la segunda opción es más factible porque (1,19) se puede obtener desde (1,16) al hacer el cambio $k \to ik$ como también se debió cambiar en (1,12) por las correspondientes expresiones para el caso $E > 0$. Además, la ecuación (1,19) sigue siendo consistente con el caso unidimensional de un pozo de potencial infinito si hacemos $a_0 \to 0$ y $L = a_1 + b + a_2$.

1.3. N Átomos idénticos

Es posible generalizar un poco más usando inducción matemática para cualquier número de átomos. Un clúster lineal de N átomos idénticos es un sistema donde se tienen $N+1$ regiones y se deben obtener $N+1$ pares de coeficientes en la solución a la ecuación de Schödinger. Además, a cada átomo del sistema se le asocia una matriz de transición y con la ayuda de la multiplicación de las matrices asociadas a los átomos, se encuentra una matriz que describe al sistema del clúster lineal para N átomos idénticos; asimismo, la matriz obtenida es capaz de expresar a los coeficientes A_{N+1} y B_{N+1} en términos de A_1 y B_1 como veremos a continuación para cualquier número de átomos. Estos coeficientes son de gran utilidad para hallar la solución no trivial al sistema de acuerdo a lo visto anteriormente en los casos particulares para un átomo y un par de átomos idénticos.

Para ello, proseguimos a considerar a un clúster lineal constituido por N átomos modelados por N pozos de potencial delta de Dirac de una profundidad $a_0 > 0$ cada uno y separados por una distancia b uno del otro. En este sistema, también se consideran dos barreras de potencial infinitas en los extremos de la cadena atómica a las distancias a_1 del primer átomo y a_2 del último átomo. Para visualizar lo escrito anteriormente, véase el diagrama de la *Figura 1.5*.

Iniciemos considerando las energías ligadas ($E < 0$) para el diagrama de la *Figura 1.5*. Sea M_j la matriz de transición asociada al $j-$ésimo átomo del clúster lineal de la cadena átomica, la cual relaciona los coeficientes A_{j+1} y B_{j+1} con los coeficientes A_j y B_j, en otras palabras, relaciona los coeficientes de la función de onda antes y despúes de cada átomo del sistema, esto es:

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = M_j \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad \text{si} \quad j = 1, 2, ..., N \tag{1.20}$$

con

$$M_j = \frac{a_0}{2k} \begin{pmatrix} \frac{2k}{a_0} - 1 & -e^{-2k[a_1+(j-1)b]} \\ e^{2k[a_1+(j-1)b]} & \frac{2k}{a_0} + 1 \end{pmatrix} \tag{1.21}$$

Seguidamente, se da a conocer que siguiendo el orden de la multiplicación de las matrices de (1,20) para hallar cada par de coeficientes, se encuentra la fórmula general para la solución no trivial para encontrar las energías ligadas al clúster lineal constituido por N átomos idénticos.

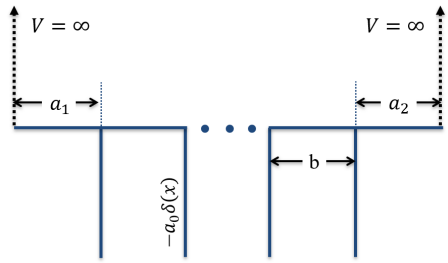

Figura 1.5: Modelo de un clúster lineal de N átomos idénticos.

Las fórmulas que deben seguirse son las ecuaciones (1,22) y es fácil observar que a partir de ellas, sí se reproducen los casos particulares para uno y dos átomos dadas por las ecuaciones (1,5) y (1,15), respectivamente. Por lo tanto, la solución no trivial para energías ligadas está dada por:

$$\begin{aligned} &A_1 + B_1 = 0, \\ &\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \\ &A_{N+1} e^{k[a_1+(N-1)b+a_2]} + B_{N+1} e^{-k[a_1+(N-1)b+a_2]} = 0, \end{aligned} \tag{1.22}$$

con

$$M = M_N M_{N-1} \cdots M_2 M_1. \tag{1.23}$$

En cambio, para las energías dispersivas ($E > 0$), solo debemos hacer el cambio $k \to ik$, como ya se realizó para uno y dos átomos en las secciones anteriores. Pero, en ambos casos, se tiene que (1,23) es la manera de multiplicar a las matrices asociadas de cada átomo para obtener a la matriz de transición general asociada al sistema del clúster lineal de N átomos idénticos y hallar las energías del sistema.

1.4. Generalización

En esta sección, se generaliza una matriz de transición asociada al sistema de un clúster lineal de N_2 moléculas compuestas por N_1 átomos cada una, en principio, los átomos de cada molécula pueden ser diferentes. Para este proceso, veremos que existe una matriz de transición asociada al $i-$ésimo átomo de cada $j-$ésima molécula en el clúster lineal. En general, este sistema cuenta con N_1N_2+1 regiones y nuevamente, su matriz resultante es eficaz para expresar los últimos coeficientes $A_{N_1N_2+1}, B_{N_1N_2+1}$ en términos de los primeros coeficientes A_1, B_1 de la solución general a la ecuación de Schrödinger.

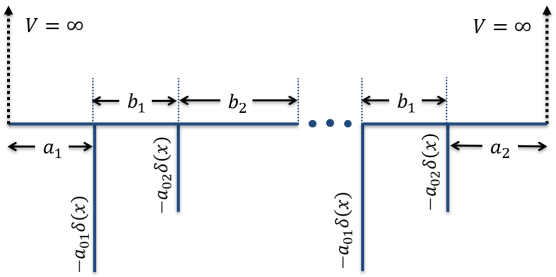

Figura 1.6: Modelo de un clúster lineal de N moléculas diatómicas.

La *Figura 1.6* muestra un caso particular de un clúster lineal para $N_2 = N$ moléculas formadas por $N_1 = 2$ átomos diferentes cada una. Los átomos de cada molécula se modelan con pozos de potencial delta de Dirac siendo $a_{01} > 0$ y $a_{02} > 0$ sus respectivas profundidades, la distancia b_1 es la separación entre los átomos de cada molécula y la distancia b_2 es la separación entre las moléculas. Igualmente, se han añadido las dos barreras de potencial infinitas en los extremos del sistema a las distancias a_1 del primer átomo y a_2 del último átomo para simular la cohesión de la cadena. No obstante, primero veremos la solución para el clúster lineal de $N_2 = N$ moléculas compuestas por $N_1 = 2$ átomos cada una, dicho de otra manera, la solución de un clúster lineal de N moléculas diatómicas.

Realizando ahora el cálculo correspondiente con las condiciones de frontera para obtener la solución no trivial, se encuentra que podemos relacionar a los coeficientes A_{2j+1} y B_{2j+1} con A_{2j-1} y B_{2j-1}, es decir, relacionar los coeficientes de la función de onda antes y después de cada molécula del sistema por medio de la multiplicación de dos tipos de matrices de transición. Esto es:

$$\begin{pmatrix} A_{2j} \\ B_{2j} \end{pmatrix} = M_j^1 \begin{pmatrix} A_{2j-1} \\ B_{2j-1} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \begin{pmatrix} A_{2j+1} \\ B_{2j+1} \end{pmatrix} = M_j^2 \begin{pmatrix} A_{2j} \\ B_{2j} \end{pmatrix}$$
$$\Rightarrow \begin{pmatrix} A_{2j+1} \\ B_{2j+1} \end{pmatrix} = M_j^2 M_j^1 \begin{pmatrix} A_{2j-1} \\ B_{2j-1} \end{pmatrix} \quad \text{si} \quad j = 1, 2, ..., N \tag{1.24}$$

con

$$M_j^1 = \frac{a_{01}}{2k} \begin{pmatrix} \frac{2k}{a_{01}} - 1 & -e^{-2k[a_1+(j-1)b_1+(j-1)b_2]} \\ e^{2k[a_1+(j-1)b_1+(j-1)b_2]} & \frac{2k}{a_{01}} + 1 \end{pmatrix} \tag{1.25}$$

y,

$$M_j^2 = \frac{a_{02}}{2k} \begin{pmatrix} \frac{2k}{a_{02}} - 1 & -e^{-2k[a_1+jb_1+(j-1)b_2]} \\ e^{2k[a_1+jb_1+(j-1)b_2]} & \frac{2k}{a_{02}} + 1 \end{pmatrix} \tag{1.26}$$

Las matrices (1,25) y (1,26) corresponden al caso cuando $E < 0$ y poniendo las condiciones obtenidas de los extremos del sistema, se obtiene que para energías ligadas, la solución no trivial es la siguiente:

$$\begin{aligned} &A_1 + B_1 = 0, \\ &\begin{pmatrix} A_{2N+1} \\ B_{2N+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \\ &A_{2N+1} e^{k[a_1+b_1N+b_2(N-1)+a_2]} + B_{2N+1} e^{-k[a_1+b_1N+b_2(N-1)+a_2]} = 0 \end{aligned} \tag{1.27}$$

Note que para este caso, utilizando moléculas diatómicas, la matriz asociada al sistema resulta de la multiplicación sucesiva de las matrices (1,25) y (1,26) por medio de la expresión (1,24). Así,

$$M = \left(M_N^2 M_N^1\right)\left(M_{N-1}^2 M_{N-1}^1\right) \cdots \left(M_2^2 M_2^1\right)\left(M_1^2 M_1^1\right) \tag{1.28}$$

Supongamos ahora que se tiene una molécula diatómica modelada por el potencial de la *Figura 1.7* y empecemos con el análisis para energías ligadas ($E < 0$).

De las ecuaciones (1,25) a la (1,28) cuando $N = 1$ molécula diatómica, se obtiene que:

$$\begin{aligned} 0 = &\sinh[k(b_1 + a_1 + a_2)] - \frac{a_{01}}{k} \sinh(ka_1) \sinh[k(b_1 + a_2)] \\ &- \frac{a_{02}}{k} \sinh(ka_2) \sinh[k(b_1 + a_1)] + \frac{a_{01}a_{02}}{k^2} \sinh(kb_1) \sinh(ka_1) \sinh(ka_2) \end{aligned} \tag{1.29}$$

es la expresión analítica para determinar las energías ligadas a una molécula diatómica. Desde luego, poniendo $a_{01} = a_{02} = a_0$ y $b_1 = b$, claramente la expresión (1,29) se reduce a (1,16) para

dos átomos idénticos y poniendo $a_{01} = a_{02} = (1/2)a_0$ y $b_1 = 0$, entonces se reduce a (1,6) para un átomo.

Por otro lado, si $E > 0$, entonces se hace el cambio $k \to ik$ y de la ecuación (1,29), se sigue que:

$$\begin{aligned} 0 = &\sin[k(b_1 + a_1 + a_2)] - \frac{a_{01}}{k}\sin(ka_1)\sin[k(b_1 + a_2)] \\ &- \frac{a_{02}}{k}\sin(ka_2)\sin[k(b_1 + a_1)] + \frac{a_{01}a_{02}}{k^2}\sin(kb_1)\sin(ka_1)\sin(ka_2) \end{aligned} \tag{1.30}$$

es la solución análoga para las energías disperivas a una molécula diatómica.

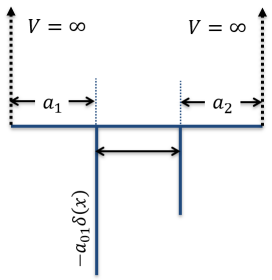

Figura 1.7: Modelo de una molécula diatómica.

Note que hasta aquí no hemos mostrado la solución para hallar las energias dispersivas al clúster lineal de N moléculas diatómicas y el motivo por el cual se ha dejado de escribir esas expresiones es que haciendo $k \to ik$, un cambio de variable, entonces se puede obtener la solución análoga para las energías dispersivas a partir de lo que se conoce para las energías ligadas como se ha estado realizando hasta el momento. Por tal motivo, la generalización a continuación solo es para energías ligadas al clúster lineal.

Finalmente, para cerrar este capítulo, sea N_2 el número de moléculas y N_1 el número de átomos en cada molécula. Sea M^i_j la matriz de transición asociada al $i-$ésimo átomo de cada $j-$ésima molécula en el clúster lineal y se define x^i_j como la distancia a la que se encuentra cada átomo en cada molécula del modelo. Pero cabe aclarar que los superíndices de la matriz M^i_j y de la distancia x^i_j hacen referencia a uno u otro átomo de la molécula y no son exponentes de los mismos. Entonces, se tiene:

$$\begin{aligned} &A_1 + B_1 = 0, \\ &\begin{pmatrix} A_{N_1N_2+1} \\ B_{N_1N_2+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \\ &A_{N_1N_2+1}e^{k\left(a_1 + x^{N_1}_{N_2} + a_2\right)} + B_{N_1N_2+1}e^{-k\left(a_1 + x^{N_1}_{N_2} + a_2\right)} = 0 \end{aligned} \tag{1.31}$$

con

$$\begin{aligned} M &= \prod_{j=1}^{N_2}\left(\prod_{i=1}^{N_1} M^{N_1+1-i}_{N_2+1-j}\right) = \prod_{j,i=1}^{N_2,N_1} M^{N_1+1-i}_{N_2+1-j} \\ M^i_j &= \frac{a_{0i}}{2k}\begin{pmatrix} \frac{2k}{a_{0i}} - 1 & -e^{-2k(a_1 + x^i_j)} \\ e^{2k(a_1 + x^i_j)} & \frac{2k}{a_{0i}} + 1 \end{pmatrix} \\ x^i_j &\equiv -b_i + (j-1)\sum_{k=1}^{N_1} b_k + \sum_{k=1}^{i} b_k \end{aligned} \tag{1.32}$$

Por lo tanto, para hallar las energías ligadas ($E < 0$) al sistema, las ecuaciones (1,31) y (1,32) forman la solución no trivial con mayor generalidad para un clúster lineal de N_2 moléculas compuestas por N_1 átomos cada una. Si queremos hallar las energías dispersivas, entonces debemos hacer el cambio de variable dicho anteriormente, es decir, sustituir k por ik y de esta manera, obtenemos las ecuaciones análogas para obtener las energías dispersivas ($E > 0$) del sistema.

Capítulo 2

Segundo Modelo

En este capítulo, también se analiza la dinámica de un electrón a través de una cadena lineal de N_2 moléculas compuestas por N_1 átomos, pero esta vez, cada átomo ha sido modelado por pozos de potencial finito y se han agregado dos barreras de potencial infinitas en los extremos del clúster lineal para simular la cohesión de la cadena. Este sistema cuántico se ha estudiado por medio de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en una dimensión para hallar las energías ligadas ($E < 0$) y las energías dispersivas ($E > 0$).

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{2.1}$$

También se deducen las expresiones analíticas para describir los estados de un átomo, un par de átomos idénticos y una molécula diatómica; asimismo, se verifica analíticamente que la expresión general para una molécula diátomica, se puede reducir a las expresiones para uno y dos átomos.

En general, se obtiene una matriz de transición asociada al clúster lineal de N_2 moléculas compuestas por N_1 átomos y con ella, es posible deducir cada uno de los resultados de este capítulo.

2.1. Un Átomo

En la presente sección, se estudia a un átomo modelado por un pozo de potencial finito de ancho b y profundidad $V_0 > 0$ donde el electrón ha sido sometido a dos barreras de potencial infinitas en los extremos del átomo, a distancias a_1 y a_2 del mismo, respectivamente.

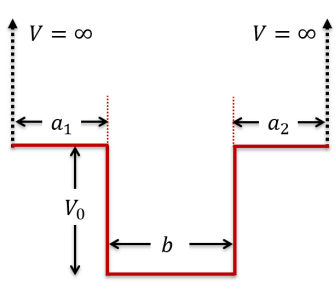

Figura 2.1: Un átomo modelado por un pozo de potencial finito.

Este es el caso más simple analizado en este capítulo, pero es bastante ilustrativo porque es posible obtener una expresión analítica para describir el comportamiento de los estados de un átomo y, a partir de ella, se deduce la solución no trivial a un pozo de potencial finito descrito en

diversos libros de textos. El diagrama de la *Figura 2.1* corresponde al potencial generado por un átomo, el cual está definido por:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad 0 \leq x < a_1 \\ -\frac{\hbar^2}{2\mu}V_0 & \text{si} \quad a_1 \leq x \leq a_1 + b \\ 0 & \text{si} \quad a_1 + b < x \leq a_1 + b + a_2 \end{cases} \tag{2.2}$$

Iniciando con el cálculo para energías ligadas, también se define:

$$E \equiv -\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \qquad \text{con} \quad k \in \mathbb{R} \tag{2.3}$$

Sea $q^2 = V_0 - k^2$. Note que se tienen tres regiones, entonces la solución general a la ecuación (2,1) es:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A_1 e^{kx} + B_1 e^{-kx} & \text{si} \quad 0 \leq x < a_1 \\ \psi_2(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx} & \text{si} \quad a_1 \leq x \leq a_1 + b \\ \psi_3(x) = A_3 e^{kx} + B_3 e^{-kx} & \text{si} \quad a_1 + b < x \leq a_1 + b + a_2 \end{cases} \tag{2.4}$$

Ya que se están considerando dos barreras de potencial infinitas en los extremos, esto implica que la función de onda debe desvanecerse en $x = 0$ y en $x = a_1 + b + a_2$. Además, por el hecho de que se trata de un pozo de potencial finito, entonces la función de onda y su derivada deben ser continuas en $x = a_1$ y $x = a_1 + b$. Por consiguiente, se deben cumplir las siguientes condiciones de frontera:

$$\begin{aligned} &\psi_1(x = 0) = 0, \\ &\psi_1(x = a_1) = \psi_2(x = a_1), \\ &\left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=a_1} = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=a_1}, \\ &\psi_2(x = a_1 + b) = \psi_3(x = a_1 + b), \\ &\left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=a_1+b} = \left.\frac{d\psi_3}{dx}\right|_{x=a_1+b}, \\ &\psi_3(x = a_1 + b + a_2) = 0. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Aplicando las condiciones (2,5) en la solución (2,4), se llega a que ambos pares de coeficientes están relacionados entre sí por medio de una matriz de transición. Esto es,

$$\begin{aligned} &A_1 + B_1 = 0 \\ &\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ &A_3 e^{k(a_1+b+a_2)} + B_3 e^{-k(a_1+b+a_2)} = 0 \end{aligned} \tag{2.6}$$

con

$$M_1 = \frac{1}{2kq} \begin{pmatrix} e^{-kb}[2kq\cos(qb) + (k^2 - q^2)\sin(qb)] & -(k^2 + q^2)e^{-k(2a_1+b)}\sin(qb) \\ (k^2 + q^2)e^{k(2a_1+b)}\sin(qb) & e^{kb}[2kq\cos(qb) - (k^2 - q^2)\sin(qb)] \end{pmatrix} \tag{2.7}$$

donde M_1 es la matriz de transición asociada a un átomo. Como resultado de las ecuaciones (2,6) y (2,7), se obtiene:

$$\sin(qb)[k^2\cosh(ka_1)\cosh(ka_2) - q^2\sinh(ka_1)\sinh(ka_2)] + kq\cos(qb)\sinh[k(a_1 + a_2)] = 0, \tag{2.8}$$

la cual es la solución analítica para hallar los estados ligados a un átomo.

Multiplicando ahora por $e^{-k(a_1+a_2)}$ y luego alejando lo suficiente a las barreras del átomo, se produce la solución no trivial para un pozo de potencial finito (sin barreras en los extremos). Es decir,

$$2kq\cos(qb) + (k^2 - q^2)\sin(qb) = 0, \quad \text{si} \quad a_1, a_2 \to +\infty \tag{2.9}$$

Cabe destacar que la solución (2,9) se encuentra en diversos libros textos.

Note que $V_0 = k^2 + q^2$ es la ecuación de un circulo de radio $\sqrt{V_0}$. De modo que podemos parametrizarla con:

$$\sin\theta = \frac{q}{\sqrt{V_0}} \quad \text{y} \quad \cos\theta = \frac{k}{\sqrt{V_0}} \tag{2.10}$$

Entonces, la ecuación (2,9) se cumple si

$$2\arcsin\left(\frac{q}{\sqrt{V_0}}\right) + qb = n\pi, \quad n \in \mathbb{N} \tag{2.11}$$

La ecuación (2,11) ha estado disponible desde 1958 en el libro *Quantum Mechanics* por Landau y Lifshitz.

Por otro lado, usando ahora identidades trigonométricas en la solución (2,9), se obtienen las soluciones pares e impares (Cohen et al., 2005).

$$\tan(qb) = \frac{k}{q} \quad \text{y} \quad \tan(qb) = -\frac{q}{k} \tag{2.12}$$

En resumen, (2,9), (2,11) y (2,12) son equivalentes entre sí; esto es, cada una de estas ecuaciones son soluciones para un pozo de potencial finito. Véase *Figura 2.2*.

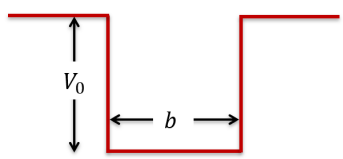

Figura 2.2: Diagrama de un pozo de potencial finito.

Para cerrar esta sección, regresemos al sistema de la *Figura 2.1*. Se tiene que definiendo:

$$E \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu},$$

y haciendo el cálculo análogo con $E > 0$, se cumple que:

$$\sin(qb)[q^2\sin(ka_1)\sin(ka_2) - k^2\cos(ka_1)\cos(ka_2)] - kq\cos(qb)\sin[k(a_1+a_2)] = 0 \tag{2.13}$$

es la solución analítica para hallar los estados dispersivos a un átomo.

2.2. Un par de átomos

Antes de hacer la generalización a un clúster lineal de N átomos idénticos, continuemos determinando la solución para dos átomos idénticos representados por un par de pozos simétricos de potencial finito, de ancho b y profundidad $V_0 > 0$ cada uno, acoplados por una barrera de ancho c. El potencial a consideración es el siguiente:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad 0 \le x < a_1 \\ -\frac{\hbar^2}{2\mu}V_0 & \text{si} \quad a_1 \le x \le a_1 + b \\ 0 & \text{si} \quad a_1 + b < x < a_1 + b + c \\ -\frac{\hbar^2}{2\mu}V_0 & \text{si} \quad a_1 + b + c \le x \le a_1 + 2b + c \\ 0 & \text{si} \quad a_1 + 2b + c < x \le a_1 + 2b + c + a_2 \end{cases} \tag{2.14}$$

Consideremos primero a los niveles de energía ligados al definir $E = -\hbar^2 k^2/2\mu$ con $k \in \mathbb{R}$. Note que $E < 0$ y es claro que el sistema de dos átomos se divide en cinco regiones, entonces esto da lugar a que la solución general a la ecuación (2,1) sea de la siguiente forma:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A_1 e^{kx} + B_1 e^{-kx} & \text{si} \quad 0 \leq x < a_1 \\ \psi_2(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx} & \text{si} \quad a_1 \leq x \leq a_1 + b \\ \psi_3(x) = A_3 e^{kx} + B_3 e^{-kx} & \text{si} \quad a_1 + b < x < a_1 + b + c \\ \psi_4(x) = A_4 e^{iqx} + B_4 e^{-iqx} & \text{si} \quad a_1 + b + c \leq x \leq a_1 + 2b + c \\ \psi_5(x) = A_5 e^{kx} + B_5 e^{-kx} & \text{si} \quad a_1 + 2b + c < x \leq a_1 + 2b + c + a_2 \end{cases} \tag{2.15}$$

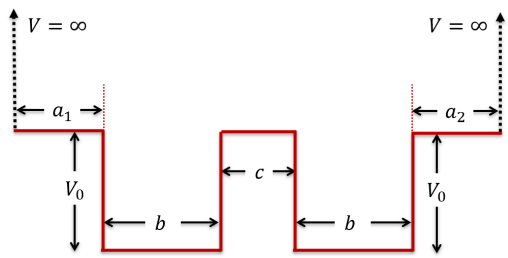

Figura 2.3: Un par de átomos idénticos modelados por pozos de potencial finito.

Haciendo un razonamiento similar a un átomo de la sección anterior, la función de onda debe obedecer las siguientes condiciones de frontera:

$$\begin{aligned} &\psi_1(x=0) = 0, \\ &\psi_1(x=a_1) = \psi_2(x=a_1), \\ &\left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=a_1} = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=a_1}, \\ &\psi_2(x=a_1+b) = \psi_3(x=a_1+b), \\ &\left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=a_1+b} = \left.\frac{d\psi_3}{dx}\right|_{x=a_1+b}, \\ &\psi_3(x=a_1+b+c) = \psi_4(x=a_1+b+c), \\ &\left.\frac{d\psi_3}{dx}\right|_{x=a_1+b+c} = \left.\frac{d\psi_4}{dx}\right|_{x=a_1+b+c}, \\ &\psi_4(x=a_1+2b+c) = \psi_5(x=a_1+2b+c), \\ &\left.\frac{d\psi_4}{dx}\right|_{x=a_1+2b+c} = \left.\frac{d\psi_5}{dx}\right|_{x=a_1+2b+c}, \\ &\psi_5(x=a_1+2b+c+a_2) = 0. \end{aligned} \tag{2.16}$$

Aplicando (2,16) en (2,15), se sigue que:

$$\begin{aligned} &A_1 + B_1 = 0 \\ &\begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} = M_2^1 M_1^1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ &A_2 e^{k(a_1+2b+c+a_2)} + B_2 e^{-k(a_1+2b+c+a_2)} = 0 \end{aligned} \tag{2.17}$$

con

$$M_1^1 = \frac{1}{2kq} \begin{pmatrix} e^{-kb}[2kq\cos(qb) + (k^2-q^2)\sin(qb)] & -(k^2+q^2)e^{-k(2a_1+b)}\sin(qb) \\ (k^2+q^2)e^{k(2a_1+b)}\sin(qb) & e^{kb}[2kq\cos(qb) - (k^2-q^2)\sin(qb)] \end{pmatrix} \tag{2.18}$$

y,

$$M_2^1 = \frac{1}{2kq}\begin{pmatrix} e^{-kb}[2kq\cos(qb) + (k^2-q^2)\sin(qb)] & -(k^2+q^2)e^{-k(2a_1+3b+2c)}\sin(qb) \\ (k^2+q^2)e^{k(2a_1+3b+2c)}\sin(qb) & e^{kb}[2kq\cos(qb) - (k^2-q^2)\sin(qb)] \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

A partir de las ecuaciones (2,17) y de las matrices (2,18) y (2,19), se obtiene la ecuación desde la cual se pueden determinar los niveles ligados del sistema:

$$\begin{aligned} 0 =& (k^2+q^2)^2\sinh[k(c-a_1-a_2)]\sin^2(qb) \\ &+2kq(k^2+q^2)\cosh(kc)\cosh[k(a_1-a_2)]\sin(2qb) \\ &+2(k^4-q^4)\sinh(kc)\cosh[k(a_1-a_2)]\sin^2(qb) \\ &+2kq(k^2-q^2)\cosh[k(c+a_1+a_2)]\sin(2qb) \\ &+[4k^2q^2\cos^2(qb) + (k^2-q^2)^2\sin^2(qb)]\sinh[k(c+a_1+a_2)] \end{aligned} \quad (2.20)$$

es la ecuación analítica para hallar los estados ligados de un eléctrón ligado a un potencial de dos átomos idénticos con modelo mostrado en la *Figura 2.3*.

Además, siendo $c = 0$, es decir, desaparenciendo la barrera entre los átomos, entonces a partir de (2,20) se verifica analíticamente la siguiente expresión:

$$\sin(2qb)[k^2\cosh(ka_1)\cosh(ka_2) - q^2\sinh(ka_1)\sinh(ka_2)] + kq\cos(2qb)\sinh[k(a_1+a_2)] = 0, \quad (2.21)$$

y comparando las ecuaciones (2,8) y (2,21), podemos afirmar que esta última ecuación es la solución no trivial para estados ligados a un átomo de ancho $2b$, la cual, se esperaba obtener.

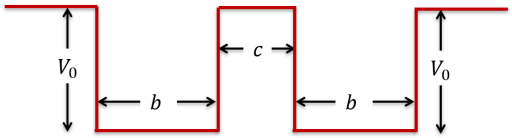

Figura 2.4: Diagrama de un doble pozo simétrico de potencial finito.

Estudiemos ahora un potencial de dos átomos idénticos con el modelo mostrado en la *Figura 2.4*, es decir, con las paredes de altura infinita localizadas en el infinito, este se analizará a partir de la ecuación analítica obtenida de la *Figura 2.3* para un par de átomos idénticos. Porque si multiplicamos por $e^{-k(a_1+a_2)}$ a la ecuación (2,20) y alejamos lo suficiente a las barreras de los átomos, se concluye que es posible obtener la solución no trivial para un doble pozo simétrico:

$$e^{kc}[2kq\cos(qb) + (k^2-q^2)\sin(qb)]^2 - (k^2+q^2)^2e^{-kc}\sin^2(qb) = 0, \quad (2.22)$$

y es claro que en los casos límites cuando $c \to \infty$ ó $c = 0$, la ecuación (2,22) se reduce a la expresión (2,9) para un pozo de potencial finito de ancho b y $2b$, respectivamente. Además, podemos simplificar a la ecuación (2,22) usando la parametrización propuesta en (2,10). Por tanto,

$$e^{kc}\sin^2(2\theta + qb) - e^{-kc}\sin^2(qb) = 0 \quad (2.23)$$

con

$$\theta = \arcsin\left(\frac{q}{\sqrt{V_0}}\right)$$

es una ecuación equivalente a (2,22) para un doble pozo simétrico.

Por otro lado, si se consideran los niveles de energía dispersivos ($E > 0$) y desarrollando un proceso equivalente, entonces se obtiene la ecuación analítica para hallar los estados dispersivos a

un par de átomos idénticos:

$$\begin{aligned}0 =&(k^2-q^2)^2\sin[k(c-a_1-a_2)]\sin^2(qb)\\&-2kq(k^2-q^2)\cos(kc)\cos[k(a_1-a_2)]\sin(2qb)\\&+2(k^4-q^4)\cos[k(a_1-a_2)]\sin(kc)\sin^2(qb)\\&-2kq(k^2+q^2)\cos[k(c+a_1+a_2)]\sin(2qb)\\&+[-4k^2q^2\cos^2(qb)+(k^2+q^2)^2\sin^2(qb)]\sin[k(c+a_1+a_2)]\end{aligned} \tag{2.24}$$

2.3. N Átomos idénticos

Es hora de generalizar a un clúster lineal de N átomos idénticos modelados por N pozos de potencial finito, de ancho b y profundidad $V_0 > 0$ cada uno, acoplados por barreras de ancho c entre los átomos. Nuevamente, se consideran dos barreras de potencial infinitas en los extremos de la cadena atómica a las distancias a_1 y a_2 del primer y último átomo, respectivamente.

El potencial de la *Figura 2.5* para una cadena lineal de N átomos está dada por:

$$V(x)=\begin{cases}0 & \text{si} \quad 0\le x<a_1\\ -\frac{\hbar^2}{2\mu}V_0 & \text{si} \quad a_1\le x\le a_1+b\\ 0 & \text{si} \quad a_1+b<x<a_1+b+c\\ \vdots & \\ 0 & \text{si} \quad a_1+(N-1)b+(N-2)c\le x\le a_1+(N-1)(b+c)\\ -\frac{\hbar^2}{2\mu}V_0 & \text{si} \quad a_1+(N-1)(b+c)<x\le a_1++Nb+(N-1)c\\ 0 & \text{si} \quad a_1+Nb+(N-1)c<x\le a_1++Nb+(N-1)c+a_2\end{cases} \tag{2.25}$$

Note que este potencial es para $N \geq 2$ átomos idénticos y dado que el sistema tiene $2N+1$ regiones, entonces vamos a obtener $2N+1$ pares de coeficientes en la solución a la ecuación de Schrödinger.

Comencemos considerando las energías ligadas ($E<0$) para el potencial mostrado en la *Figura 2.5*. Entonces, la solución general a la ecuación de Schrödinger es la siguiente:

$$\psi(x)=\begin{cases}\psi_1(x) & \text{si} \quad 0\le x<a_1\\ \psi_2(x) & \text{si} \quad a_1\le x\le a_1+b\\ \psi_3(x) & \text{si} \quad a_1+b<x<a_1+b+c\\ \vdots & \\ \psi_{2N-1}(x) & \text{si} \quad a_1+(N-1)b+(N-2)c\le x\le a_1+(N-1)(b+c)\\ \psi_{2N}(x) & \text{si} \quad a_1+(N-1)(b+c)<x\le a_1++Nb+(N-1)c\\ \psi_{2N+1}(x) & \text{si} \quad a_1+Nb+(N-1)c<x\le a_1++Nb+(N-1)c+a_2\end{cases} \tag{2.26}$$

con

$$\begin{aligned}\psi_{2j-1}(x)&=A_{2j-1}e^{kx}+B_{2j-1}e^{-kx}\\ \psi_{2j}(x)&=A_{2j}e^{iqx}+B_{2j}e^{-iqx}\\ \psi_{2j+1}(x)&=A_{2j+1}e^{kx}+B_{2j+1}e^{-kx}\end{aligned} \tag{2.27}$$

Cabe señalar que la función de onda (2,26) se compone a trozos por funciones de la forma (2,27) para cada $j=1,2,,\ldots,N$.

Sea M_j la matriz de transición asociada al $j-$ésimo átomo del clúster lineal de la cadena atómica. Esta matriz expresa a los coeficientes A_{2j+1} y B_{2j+1} en términos de A_{2j-1} y B_{2j-1} para cada $j=1,2,\ldots,N$. Es decir:

$$\begin{pmatrix}A_{2j+1}\\ B_{2j+1}\end{pmatrix}=M_j\begin{pmatrix}A_{2j-1}\\ B_{2j-1}\end{pmatrix} \quad \text{si} \quad j=1,2,...,N \tag{2.28}$$

Con la ayuda de (2,28) para relacionar los coeficientes y aplicando las condiciones de frontera en nuestra solución general (2,26), se desprende la solución no trivial a nuestro clúster lineal de N átomos idénticos para estados ligados.

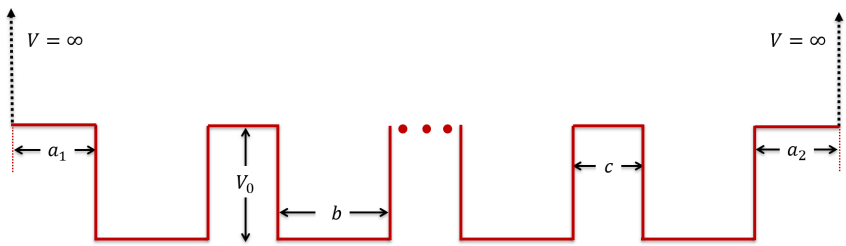

Figura 2.5: Modelo de un clúster lineal de N átomos idénticos.

Pongamos $V_0 = q^2 + k^2$. Entonces, la solución no trivial está dada por:

$$\begin{aligned} &A_1 + B_1 = 0 \\ &\begin{pmatrix} A_{2N+1} \\ B_{2N+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ &A_{2N+1} e^{k[a_1+Nb+(N-1)c+a_2]} + B_{2N+1} e^{-k[a_1+Nb+(N-1)c+a_2]} = 0 \end{aligned} \tag{2.29}$$

con

$$M_j = \frac{1}{2kq} \begin{pmatrix} e^{-kb}[2kq\cos(qb) + (k^2-q^2)\sin(qb)] & -(k^2+q^2)e^{-k[2a_1+(2j-1)b+2(j-1)c]}\sin(qb) \\ (k^2+q^2)e^{k[2a_1+(2j-1)b+2(j-1)c]}\sin(qb) & e^{kb}[2kq\cos(qb) - (k^2-q^2)\sin(qb)] \end{pmatrix} \tag{2.30}$$

Y gracias a las transformaciones (2,10), se llega a una expresión más compacta de esta última matriz. Luego,

$$M_j = \frac{V_0}{2kq} \begin{pmatrix} e^{-kb}\sin(2\theta + qb) & -e^{-k[2a_1+(2j-1)b+2(j-1)c]}\sin(qb) \\ e^{k[2a_1+(2j-1)b+2(j-1)c]}\sin(qb) & e^{kb}\sin(2\theta - qb) \end{pmatrix} \tag{2.31}$$

con

$$\theta = \arcsin\left(\frac{q}{\sqrt{V_0}}\right).$$

En la próxima sección, la forma de la matriz (2,31) será usada para expresar de manera general la solución no trivial de un clúster lineal de N_2 moléculas compuestas por N_1 átomos cada una.

Por otro lado, para las energías dispersivas ($E > 0$), solo debemos hacer el cambio $k \to ik$ en las funciones (2,27) y poniendo $V_0 = q^2 - k^2$, se obtiene:

$$\begin{aligned} &A_1 + B_1 = 0 \\ &\begin{pmatrix} A_{2N+1} \\ B_{2N+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ &A_{2N+1} e^{ik[a_1+Nb+(N-1)c+a_2]} + B_{2N+1} e^{-ik[a_1+Nb+(N-1)c+a_2]} = 0 \end{aligned} \tag{2.32}$$

con

$$M_j = \frac{1}{2ikq} \begin{pmatrix} e^{-ikb}[2ikq\cos(qb) - (k^2+q^2)\sin(qb)] & -(q^2-k^2)e^{-ik[2a_1+(2j-1)b+2(j-1)c]}\sin(qb) \\ (q^2-k^2)e^{ik[2a_1+(2j-1)b+2(j-1)c]}\sin(qb) & e^{ikb}[2ikq\cos(qb) + (k^2+q^2)\sin(qb)] \end{pmatrix} \tag{2.33}$$

En ambos casos, M es la matriz de transición general asociada a la cadena atómica dada por la siguiente multiplicación:

$$M = M_N M_{N-1} \cdots M_2 M_1 = \prod_{j=1}^{N} M_{N+1-j} \tag{2.34}$$

2.4. N Moléculas Diatómicas

Iniciemos con un caso particular para una molécula diatómica, es decir, una cadena lineal de dos átomos diferentes. Los átomos de la molécula se modelan por pozos de potencial finito, de anchos b_1, b_2 y profundidades $V_{01}, V_{02} > 0$, respectivamente; además, la separación entre átomos es c_1 como se observa en la *Figura 2.6*. De la misma manera, se consideran dos barreras de potencial infinitas en los extremos a las distancias a_1 del primer átomo y a_2 del segundo átomo para modelar la cohesión de la molécula. El potencial asociado a la molécula mostrada en la *Figura 2.6* está dado por:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad 0 \leq x < a_1 \\ V_1 & \text{si} \quad a_1 \leq x \leq a_1 + b_1 \\ 0 & \text{si} \quad a_1 + b_1 < x < a_1 + b_+ c_1 \\ V_2 & \text{si} \quad a_1 + b_1 + c_1 \leq x \leq a_1 + b_1 + c_1 + b_2 \\ 0 & \text{si} \quad a_1 + b_1 + c_1 + b_2 < x \leq a_1 + b_1 + c_1 + b_2 + a_2 \end{cases} \tag{2.35}$$

con

$$V_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} V_{01} \quad \text{y} \quad V_2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} V_{02}$$

Una vez más, damos inicio con el análisis para estados ligados ($E < 0$) y por ello, sean $q_1^2 = V_{01} - k^2$ y $q_2^2 = V_{02} - k^2$. Es claro que se tienen cinco regiones, entonces la solución general a la ecuación (2,1) con el potencial (2,35) es de la siguiente forma:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A_1 e^{kx} + B_1 e^{-kx} & \text{si} \quad 0 \leq x < a_1 \\ \psi_2(x) = A_2 e^{iq_1 x} + B_2 e^{-iq_1 x} & \text{si} \quad a_1 \leq x \leq a_1 + b_1 \\ \psi_3(x) = A_3 e^{kx} + B_3 e^{-kx} & \text{si} \quad a_1 + b_1 < x < a_1 + b_1 + c_1 \\ \psi_4(x) = A_4 e^{iq_2 x} + B_4 e^{-iq_2 x} & \text{si} \quad a_1 + b_1 + c_1 \leq x \leq a_1 + b_1 + c_1 + b_2 \\ \psi_5(x) = A_5 e^{kx} + B_5 e^{-kx} & \text{si} \quad a_1 + b_1 + c_1 + b_2 < x \leq a_1 + b_1 + c_1 + b_2 + a_2 \end{cases} \tag{2.36}$$

Seguidamente, se tiene que la función de onda (2,36) debe satisfacer estas condiciones de frontera:

$$\begin{aligned} &\psi_1(x = 0) = 0, \\ &\psi_1(x = a_1) = \psi_2(x = a_1), \\ &\left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=a_1} = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=a_1}, \\ &\psi_2(x = a_1 + b_1) = \psi_3(x = a_1 + b_1), \\ &\left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=a_1+b_1} = \left.\frac{d\psi_3}{dx}\right|_{x=a_1+b_1}, \\ &\psi_3(x = a_1 + b_1 + c_1) = \psi_4(x = a_1 + b_1 + c_1), \\ &\left.\frac{d\psi_3}{dx}\right|_{x=a_1+b_1+c_1} = \left.\frac{d\psi_4}{dx}\right|_{x=a_1+b_1+c_1}, \\ &\psi_4(x = a_1 + b_1 + c_1 + b_2) = \psi_5(x = a_1 + b_1 + c_1 + b_2), \\ &\left.\frac{d\psi_4}{dx}\right|_{x=a_1+b_1+c_1+b_2} = \left.\frac{d\psi_5}{dx}\right|_{x=a_1+b_1+c_1+b_2}, \\ &\psi_5(x = a_1 + b_1 + c_1 + b_2 + a_2) = 0. \end{aligned} \tag{2.37}$$

Aplicando (2,37) en (2,36), se obtiene:

$$\begin{aligned} &A_1 + B_1 = 0 \\ &\begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} = M_1^2 M_1^1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ &A_2 e^{k(a_1+b_1+c_1+b_2+a_2)} + B_2 e^{-k(a_1+b_1+c_1+b_2+a_2)} = 0 \end{aligned} \tag{2.38}$$

siendo:

$$M_1^1 = \frac{V_{01}}{2kq_1}\begin{pmatrix} e^{-kb_1}\sin(2\theta_1 + q_1b_1) & -e^{-k(2a_1+b_1)}\sin(q_1b_1) \\ e^{k(2a_1+b_1)}\sin(q_1b_1) & e^{kb_1}\sin(2\theta_1 - q_1b_1) \end{pmatrix} \tag{2.39}$$

y,

$$M_1^2 = \frac{V_{02}}{2kq_2}\begin{pmatrix} e^{-kb_2}\sin(2\theta_2 + q_2b_2) & -e^{-k(2a_1+2b_1+2c_1+b_2)}\sin(q_2b_2) \\ e^{k(2a_1+2b_1+2c_1+b_2)}\sin(q_2b_2) & e^{kb_2}\sin(2\theta_2 - q_2b_2) \end{pmatrix} \tag{2.40}$$

con

$$\theta_1 = \arcsin\left(\frac{q_1}{\sqrt{V_{01}}}\right) \quad \text{y} \quad \theta_2 = \arcsin\left(\frac{q_2}{\sqrt{V_{02}}}\right)$$

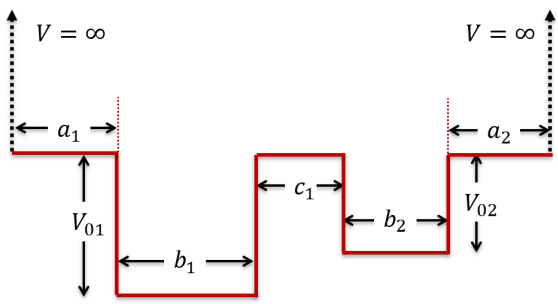

Figura 2.6: Modelo de una molécula diatómica

Las ecuaciones (2,38) con las matrices (2,39) y (2,40) generan:

$$\begin{aligned} 0 =& 2\sinh[k(c_1 - a_1 - a_2)](k^2 + q_1^2)(k^2 + q_2^2)\sin(q_1b_1)\sin(q_2b_2) \\ &+4kq_1(k^2 + q_2^2)\sin(q_2b_2)\cos(q_1b_1)\cosh[k(c_1 + a_1 - a_2)] \\ &+2(k^2 + q_2^2)(k^2 - q_1^2)\sin(q_2b_2)\sin(q_1b_1)\sinh[k(c_1 + a_1 - a_2)] \\ &+4kq_2(k^2 + q_1^2)\sin(q_1b_1)\cos(q_2b_2)\cosh[k(c_1 - a_1 + a_2)] \\ &-2(k^2 + q_1^2)(k^2 - q_2^2)\sin(q_1b_1)\sin(q_2b_2)\sinh[k(c_1 - a_1 + a_2)] \\ &+e^{k(c_1+a_1+a_2)}[2kq_1\cos(q_1b_1) + (k^2 - q_1^2)\sin(q_1b_1)]\cdot[2kq_2\cos(q_2b_2) + (k^2 - q_2^2)\sin(q_2b_2)] \\ &+e^{-k(c_1+a_1+a_2)}[2kq_1\cos(q_1b_1) - (k^2 - q_1^2)\sin(q_1b_1)]\cdot[2kq_2\cos(q_2b_2) - (k^2 - q_2^2)\sin(q_2b_2)], \end{aligned} \tag{2.41}$$

la cual es la ecuación analítica para hallar los niveles de energía ligados ($E < 0$) a una molécula diatómica. *Véase Figura 2.6.* Nótese que poniendo $q_1 = q_2 = q$, $b_1 = b_2 = b$ y $c_1 = c$, entonces la ecuación (2,41) se reduce a la solución (2,20) para los estados ligados a dos átomos idénticos. Asimismo, poniendo $q_1 = q_2 = q$, $b_1 = b_2 = (1/2)b$ y $c_1 = 0$, se verifica la solución (2,8) para estados ligados a un átomo.

Por otro lado, considerando $E > 0$, es posible obtener la solución analítica para hallar los estados dispersivos para una molécula diatómica, por suerte, no es necesario realizar todo el cálculo anterior pues a partir de la expresión (2,41) solo se le debe hacer el siguiente cambio de variable: $k \to ik$. A raíz de esto, la generalización en la próxima sección se hará solo para los estados ligados, puesto que, los estados dispersivos se pueden deducir a partir del cambio de variable mencionado.

Generalizando ahora a un clúster lineal de N moléculas diatómicas, añadimos un nuevo parámetro, la separación entre las moléculas es c_2 como se muestra en la *Figura 2.7* y conservando las caracteristicas anteriormente descritas para el sistema, se tiene que el potencial de la

cadena molecular estará dado por:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad 0 \leq x < a_1 \\ V_1 & \text{si} \quad a_1 \leq x \leq a_1 + b_1 \\ 0 & \text{si} \quad a_1 + b_1 < x < a_1 + b_+ c_1 \\ V_2 & \text{si} \quad a_1 + b_1 + c_1 \leq x \leq a_1 + b_1 + c_1 + b_2 \\ 0 & \text{si} \quad a_1 + b_1 + c_1 + b_2 < x \leq a_1 + b_1 + c_1 + b_2 + c_2 \\ \vdots & \\ 0 & \text{si} \quad a_1 + (N-1)(b_1 + c_1 + b_2) + (N-2)c_2 \leq x < a_1 + (N-1)(b_1 + c_1 + b_2 + c_2) \\ V_1 & \text{si} \quad a_1 + (N-1)(b_1 + c_1 + b_2 + c_2) \leq x \leq a_1 + Nb_1 + (N-1)(c_1 + b_2 + c_2) \\ 0 & \text{si} \quad a_1 + Nb_1 + (N-1)(c_1 + b_2 + c_2) < x < a_1 + N(b_1 + c_1) + (N-1)(b_2 + c_2) \\ V_2 & \text{si} \quad a_1 + N(b_1 + c_1) + (N-1)(b_2 + c_2) \leq x \leq a_1 + N(b_1 + c_1 + b_2) + (N-1)c_2 \\ 0 & \text{si} \quad a_1 + N(b_1 + c_1 + b_2) + (N-1)c_2 < x \leq a_1 + N(b_1 + c_1 + b_2) + (N-1)c_2 + a_2 \end{cases} \tag{2.42}$$

con

$$V_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} V_{01} \quad \text{y} \quad V_2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} V_{02}$$

Es claro que este potencial es para $N \geq 2$ moléculas y como el sistema tiene $4N+1$ regiones, se tendrán $4N+1$ pares de coeficientes en la solución a la ecuación de Schödinger y considerando las energías ligadas ($E < 0$) al sistema, entonces la solución general a dicha ecuación es la siguiente:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) & \text{si} \quad 0 \leq x < a_1 \\ \psi_2(x) & \text{si} \quad a_1 \leq x \leq a_1 + b_1 \\ \psi_3(x) & \text{si} \quad a_1 + b_1 < x < a_1 + b_+ c_1 \\ \psi_4(x) & \text{si} \quad a_1 + b_1 + c_1 \leq x \leq a_1 + b_1 + c_1 + b_2 \\ \psi_5(x) & \text{si} \quad a_1 + b_1 + c_1 + b_2 < x \leq a_1 + b_1 + c_1 + b_2 + c_2 \\ \vdots & \\ \psi_{4N-3}(x) & \text{si} \quad a_1 + (N-1)(b_1 + c_1 + b_2) + (N-2)c_2 \leq x < a_1 + (N-1)(b_1 + c_1 + b_2 + c_2) \\ \psi_{4N-2}(x) & \text{si} \quad a_1 + (N-1)(b_1 + c_1 + b_2 + c_2) \leq x \leq a_1 + Nb_1 + (N-1)(c_1 + b_2 + c_2) \\ \psi_{4N-1}(x) & \text{si} \quad a_1 + Nb_1 + (N-1)(c_1 + b_2 + c_2) < x < a_1 + N(b_1 + c_1) + (N-1)(b_2 + c_2) \\ \psi_{4N}(x) & \text{si} \quad a_1 + N(b_1 + c_1) + (N-1)(b_2 + c_2) \leq x \leq a_1 + N(b_1 + c_1 + b_2) + (N-1)c_2 \\ \psi_{4N+1}(x) & \text{si} \quad a_1 + N(b_1 + c_1 + b_2) + (N-1)c_2 < x \leq a_1 + N(b_1 + c_1 + b_2) + (N-1)c_2 + a_2 \end{cases} \tag{2.43}$$

donde

$$\begin{aligned} \psi_{4j-3}(x) &= A_{4j-3}e^{kx} + B_{4j-3}e^{-kx} \\ \psi_{4j-2}(x) &= A_{4j-2}e^{iq_1x} + B_{4j-2}e^{-iq_1x} \\ \psi_{4j-1}(x) &= A_{4j-1}e^{kx} + B_{4j-1}e^{-kx} \\ \psi_{4j}(x) &= A_{4j}e^{iq_2x} + B_{4j}e^{-iq_2x} \\ \psi_{4j+1}(x) &= A_{4j+1}e^{kx} + B_{4j+1}e^{-kx} \end{aligned} \tag{2.44}$$

Cabe mencionar que la función de onda (2,43) se compone a trozos por funciones de la forma (2,44) para cada $j = 1, 2, \ldots, N$.

Aplicando las condiciones de frontera a la solución (2,43), se encuentran dos tipos de matrices de transición capaces de relacionar pares de coeficientes entre sí de la forma de (2,45). Por tal motivo, sea M_j^1 la matriz de transición asociada al primer átomo de la $j-$ésima molécula tal que:

$$\begin{pmatrix} A_{4j-1} \\ B_{4j-1} \end{pmatrix} = M_j^1 \begin{pmatrix} A_{4j-3} \\ B_{4j-3} \end{pmatrix},$$

y sea M_j^2 la matriz de transición asociada al segundo átomo de la $j-$ésima molécula tal que:

$$\begin{pmatrix} A_{4j+1} \\ B_{4j+1} \end{pmatrix} = M_j^2 \begin{pmatrix} A_{4j-1} \\ B_{4j-1} \end{pmatrix}$$

Así,

$$\begin{pmatrix} A_{4j+1} \\ B_{4j+1} \end{pmatrix} = M_j^2 M_j^1 \begin{pmatrix} A_{4j-3} \\ B_{4j-3} \end{pmatrix} \quad \text{si} \quad j = 1, 2, ..., N \tag{2.45}$$

Por lo tanto, para los estados ligados ($E < 0$), se concluye que:

$$\begin{aligned} &A_1 + B_1 = 0 \\ &\begin{pmatrix} A_{4N+1} \\ B_{4N+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ &A_{4N+1} e^{k[a_1+N(b_1+c_1+b_2)+(N-1)c_2]} + B_{4N+1} e^{-k[a_1+N(b_1+c_1+b_2)+(N-1)c_2]} = 0 \end{aligned} \tag{2.46}$$

donde

$$M = \left(M_N^2 M_N^1\right)\left(M_{N-1}^2 M_{N-1}^1\right)\cdots\left(M_2^2 M_2^1\right)\left(M_1^2 M_1^1\right) = \prod_{j=1}^{N} M_j^2 M_j^1 \tag{2.47}$$

siendo:

$$\begin{aligned} M_j^1 &= \frac{V_{01}}{2kq_1}\begin{pmatrix} e^{-kb_1}\sin(2\theta_1 + q_1 b_1) & -e^{-k[2a_1+(2j-1)b_1+2(j-1)(c_1+b_2+c_2)]}\sin(q_1 b_1) \\ e^{k[2a_1+(2j-1)b_1+2(j-1)(c_1+b_2+c_2)]}\sin(qb) & e^{kb_1}\sin(2\theta_1 - q_1 b_1) \end{pmatrix} \\ M_j^2 &= \frac{V_{02}}{2kq_2}\begin{pmatrix} e^{-kb_2}\sin(2\theta_2 + q_2 b_2) & -e^{-k[2a_1+2j(b_1+c_1)+(2j-1)b_2+2(j-1)c_2]}\sin(q_2 b_2) \\ e^{k[2a_1+2j(b_1+c_1)+(2j-1)b_2+2(j-1)c_2]}\sin(q_2 b_2) & e^{kb_2}\sin(2\theta_2 - q_2 b_2) \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.48}$$

con

$$\theta_1 = \arcsin\left(\frac{q_1}{\sqrt{V_{01}}}\right), \qquad \theta_2 = \arcsin\left(\frac{q_2}{\sqrt{V_{02}}}\right)$$

De esta manera, usando (2,46), (2,47) y (2,48), se obtiene la solución no trivial para hallar los estados ligados a un clúster lineal de N moléculas diatómicas. Véase *Figura 2.7*.

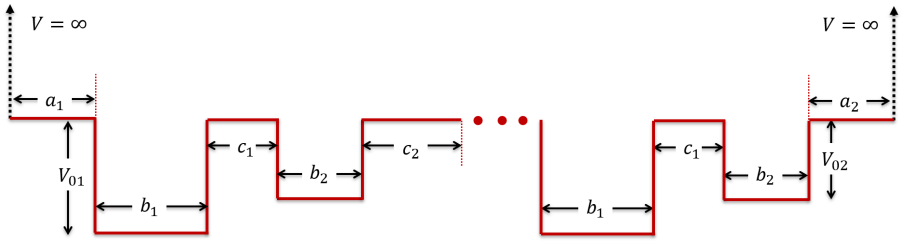

Figura 2.7: Modelo de un clúster lineal de N moléculas diatómicas.

Por otro lado, si queremos hallar los estados dispersivos ($E > 0$) de la *Figura 2.7*, entonces se hace el cambio $k \to ik$ como se ha estado mencionando desde el capítulo anterior.

2.5. Generalización

En esta última sección del capítulo, sea N_2 el número de moléculas y N_1 el número de átomos en cada molécula, se generaliza a M como la matriz de transición asociada al sistema de un clúster lineal de N_2 moléculas compuestas por N_1 átomos cada una; en principio, los átomos de cada molécula pueden ser diferentes. Sea M_j^i la matriz de transición asociada al $i-$ésimo átomo de la $j-$ésima molécula en la cadena lineal y se define la cantidad x_j^i como la distancia a la que se encuentra cada átomo en cada molécula del sistema. Visto que el sistema general tiene $2N_1N_2 + 1$ regiones, entonces:

$$\begin{aligned} &A_1 + B_1 = 0, \\ &\begin{pmatrix} A_{2N_1N_2+1} \\ B_{2N_1N_2+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \\ &A_{2N_1N_2+1} e^{k\left(a_1 + x_{N_2}^{N_1} + a_2\right)} + B_{2N_1N_2+1} e^{-k\left(a_1 + x_{N_2}^{N_1} + a_2\right)} = 0 \end{aligned} \tag{2.49}$$

con

$$
\begin{aligned}
M &= \prod_{j=1}^{N_2}\left(\prod_{i=1}^{N_1} M_{N_2+1-j}^{N_1+1-i}\right) = \prod_{j,i=1}^{N_2,N_1} M_{N_2+1-j}^{N_1+1-i} \\
M_j^i &= \frac{V_{0i}}{2kq_i}\begin{pmatrix} e^{-kb_i}\sin(2\theta_i + q_i b_i) & -e^{kb_i}e^{-2k(a_1+x_j^i)}\sin(q_i b_i) \\ e^{-kb_i}e^{2k(a_1+x_j^i)}\sin(q_i b_i) & e^{kb_i}\sin(2\theta_i - q_i b_i) \end{pmatrix} \\
x_j^i &\equiv -c_i + (j-1)\sum_{k=1}^{N_1}(b_k + c_k) + \sum_{k=1}^{i}(b_k + c_k) \\
V_{0i} &= q_i^2 + k^2 \\
\theta_i &= \arcsin\left(\frac{q_i}{\sqrt{V_{0i}}}\right)
\end{aligned}
\tag{2.50}
$$

Por lo tanto, las ecuaciones (2,49) y (2,50) establecen la solución con mayor generalidad para energías ligadas a un clúster lineal de N_2 moléculas compuestas por N_1 átomos cada una.

Capítulo 3

Fórmula analítica general para N átomos idénticos

En este capítulo hallamos fórmulas analíticas generales para hallar las energías ligadas ($E < 0$) y las energías dispersivas ($E > 0$) ante un clúster lineal de N átomos idénticos modelados por pozos de potencial delta de Dirac y por pozos de potencial finito como lo muestran las *Figuras 1.5* y *2.5* en los capítulos anteriores, respectivamente. Asimismo, se obtienen fórmulas analíticas generales para hallar las energías ligadas ante un sistema periódico constituido por pozos de potencial delta de Dirac y por pozos de potencial finito como se observan en las correspondientes *Figuras 3.1* y *3.2* de este capítulo.

Iniciemos dando a conocer algunos resultados de la referencia [9] que trata con medios ópticos periódicos y estructuras periódicas estratificadas, y aunque no nos enfocamos en ese estudio en específico, sí nos interesa saber su formalismo teórico para el tratamiento de estructuras periódicas; en nuestro caso, para aplicarlo a una cadena lineal de N átomos idénticos.

De modo que, al considerar un sistema periódico finito y lineal, compuesto de N átomos idénticos, es posible obtener una matriz de transición a la N-ésima potencia que relaciona a los coeficientes de la función de onda antes y después de la cadena lineal atómica en la forma de la siguiente expresión:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}^N \begin{pmatrix} A_\beta \\ B_\beta \end{pmatrix}, \tag{3.1}$$

donde los coeficientes A_β y B_β son los últimos coeficientes de la solución a la ecuación de Schrödinger con $\beta = \beta(N)$, el cual cambiará en cada modelo.

Por otro lado, se tiene que el determinante de la matriz dada en (3.1) es uno, esto es:

$$a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = 1. \tag{3.2}$$

Utilizando el teorema de Floquet-Bloch donde Λ es el periodo del sistema y K es el vector de Bloch, se obtiene la siguiente identidad:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}^N = \begin{pmatrix} \frac{a_{11}\sin(NK\Lambda)-\sin[(N-1)K\Lambda]}{\sin(K\Lambda)} & \frac{a_{12}\sin(NK\Lambda)}{\sin(K\Lambda)} \\ \frac{a_{21}\sin(NK\Lambda)}{\sin(K\Lambda)} & \frac{a_{22}\sin(NK\Lambda)-\sin[(N-1)K\Lambda]}{\sin(K\Lambda)} \end{pmatrix}, \tag{3.3}$$

con

$$\cos(K\Lambda) = \frac{1}{2}(a_{11} + a_{22}). \tag{3.4}$$

Para finalizar con los resultados del atículo, se observa que la matriz del lado derecho en la igualdad (3.3) es de gran utilidad para hallar los eigenvalores de un sistema finito de una cadena

lineal de N átomos idénticos al aplicarla en las ecuaciones descritas en los capítulos previos, esto se verá a continuación. Véase *Figura 1.5* y *Figura 2.5*.

Por otro lado, en realidad, los elementos de la matriz al lado derecho de la expresión (3.3) siempre se pueden expresarse en términos de la ecuación (3.4). Ya que por la identidad trigonométrica (5.68) del *Manual de fórmulas y tablas matemáticas* de la serie *SCHAUM*, se tiene que:

$$\frac{\sin(NK\Lambda)}{\sin(K\Lambda)} = \sum_{s=1}^{J}(-1)^{s+1}\binom{N-s}{s-1}\left[2\cos(K\Lambda)\right]^{N-2s+1}, \qquad \forall N \in \mathbb{N} \tag{3.5}$$

Sin embargo, la *sumatoria* en la identidad trigonométrica (3.5) tiene dos límites superiores porque se debe tomar como límite superior a $J = \frac{1}{2}(N+1)$ si N es impar, pero si N es par, entonces $J = \frac{1}{2}N$ es el límite superior de la suma.

3.1. Primer Modelo

Comenzamos recordando que si consideramos las energías ligadas ($E < 0$) para el diagrama de la *Figura 1.5*, se obtiene la solución no trivial (1.22) al imponer las condiciones de frontera y usar la relación (1.20) para cada átomo con la matriz de transición (1.21) asociada al j-ésimo átomo del clúter lineal de la cadena atómica.

Por otro lado, se puede mostrar que (1.20) con (1.21) se convierten en:

$$\begin{pmatrix} e^{k(a_1+jb)}A_{j+1} \\ e^{-k(a_1+jb)}B_{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(1-\frac{a_0}{2k}\right)e^{kb} & -\frac{a_0}{2k}e^{kb} \\ \frac{a_0}{2k}e^{-kb} & \left(1+\frac{a_0}{2k}\right)e^{-kb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{k[a_1+(j-1)b]}A_j \\ e^{-k[a_1+(j-1)b]}B_j \end{pmatrix} \quad \text{si} \quad j = 1, 2, ..., N \tag{3.6}$$

Ahora, vamos a redefinir a los coeficientes de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} e^{k[a_1+(j-1)b]}A_j \\ e^{-k[a_1+(j-1)b]}B_j \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \tag{3.7}$$

Note que esta redefinición es válida porque se cumple para cada par de coeficiones consecutivos. De forma tal que si hacemos $j \to j+1$ en (3.7), se obtienen las redefiniciones para los coeficientes del extremo izquierdo de la igualdad (3.6), esto es:

$$\begin{pmatrix} e^{k(a_1+jb)}A_{j+1} \\ e^{-k(a_1+jb)}B_{j+1} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} \tag{3.8}$$

Así, dadas las redefiniciones (3.7) y (3.8), la igualdad (3.6) ahora es:

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(1-\frac{a_0}{2k}\right)e^{kb} & -\frac{a_0}{2k}e^{kb} \\ \frac{a_0}{2k}e^{-kb} & \left(1+\frac{a_0}{2k}\right)e^{-kb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad \text{si} \quad j = 1, 2, ..., N \tag{3.9}$$

A manera de comentario, observe que el determinante de la matriz de transición en (3.9) es igual a la unidad, en otras palabras, la matriz en (3.9) cumple con la expresión (3.2). Asimismo, es claro que esta nueva matriz de transición que relaciona a los coeficientes ya no depende de la posición de los átomos en la cadena lineal. Aplicando ahora la relación (1.20) en (3.9) para cada átomo y poniendo a los primeros coeficientes en términos de los últimos coeficientes de la solución a la ecuación de Schrödinger, se cumple que:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(1+\frac{a_0}{2k}\right)e^{-kb} & \frac{a_0}{2k}e^{kb} \\ -\frac{a_0}{2k}e^{-kb} & \left(1-\frac{a_0}{2k}\right)e^{kb} \end{pmatrix}^N \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix} \tag{3.10}$$

Note que (3.10) tiene la forma de la expresión (3.1) con $\beta(N) = N + 1$ y también note que $\Lambda = b$ es el periodo de la cadena lineal atómica. Seguidamente, si aplicamos las ecuaciones (3.1) y (3.3) en la ecuación (3.10) y dado que redefinimos los coeficientes, entonces las ecuaciones (1.22) se convierten en:

$$\begin{aligned} &A_1 e^{-ka_1} + B_1 e^{ka_1} = 0 \\ &\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{a_{11}\sin(NKb) - \sin[(N-1)Kb]}{\sin(Kb)} & \frac{a_{12}\sin(NKb)}{\sin(Kb)} \\ \frac{a_{21}\sin(NKb)}{\sin(Kb)} & \frac{a_{22}\sin(NKb) - \sin[(N-1)Kb]}{\sin(Kb)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix} \\ &A_{N+1} e^{-k(b-a_2)} + B_{N+1} e^{k(b-a_2)} = 0 \end{aligned} \tag{3.11}$$

con

$$\begin{aligned} a_{11} &= \left(1 + \frac{a_0}{2k}\right) e^{-kb}, \quad a_{12} = \frac{a_0}{2k} e^{kb}, \\ a_{21} &= -\frac{a_0}{2k} e^{-kb} \quad \text{y} \quad a_{22} = \left(1 - \frac{a_0}{2k}\right) e^{kb}. \end{aligned} \tag{3.12}$$

Realizando los cálculos correspondientes en las ecuaciones (3.11) con los elementos de matriz (3.12), se obtiene que:

$$0 = \sinh[k(a_1 + a_2 - b)] \frac{\sin[(N-1)Kb]}{\sin(Kb)} + \left\{ \frac{a_0}{k} \sinh(ka_1) \sinh(ka_2) - \sinh[k(a_1 + a_2)] \right\} \frac{\sin(NKb)}{\sin(Kb)}, \tag{3.13}$$

donde el vector de Bloch queda determinado por la ecuación (3.4), la cual da lugar a la expresión:

$$\cos(Kb) = \cosh(kb) - \frac{a_0}{2k} \sinh(kb). \tag{3.14}$$

Por lo tanto, las ecuaciones (3.13) y (3.14) forman la fórmula analítica general para hallar las energías ligadas ($E < 0$) ante un clúster lineal de N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio, donde cada átomo ha sido modelado por un pozo de potencial delta de Dirac como se muestra en la *Figura 1.5*. En realidad, las ecuaciones (3.13) y (3.14) siempre llevan a una sola ecuación usando la identidad trigonométrica (3.5) si $N \geq 2$; en particular, el cálculo explícito con $N = 2$ para obtener la ecuación analítica (1.16) a partir de las ecuaciones (3.13) y (3.14) se encuentra en la primera sección *A.1* del *Apéndice A* y como resultado, poder hallar las energías ligadas ($E < 0$) ante un par de átomos idénticos como se muestran en la *Figura 1.3*

Por otro lado, si consideramos las energías dispersivas ($E > 0$) en la *Figura 1.5*, debemos hacer el cambio $k \to ik$ en las ecuaciones (3.13) y (3.14). Esto es:

$$0 = \sin[k(a_1 + a_2 - b)] \frac{\sin[(N-1)Kb]}{\sin(Kb)} + \left\{ \frac{a_0}{k} \sin(ka_1) \sin(ka_2) - \sin[k(a_1 + a_2)] \right\} \frac{\sin(NKb)}{\sin(Kb)} \tag{3.15}$$

con

$$\cos(Kb) = \cos(kb) - \frac{a_0}{2k} \sin(kb) \tag{3.16}$$

Entonces, las ecuaciones (3.15) y (3.16) forman la fórmula analítica general para hallar las energías dispersivas ($E > 0$) ante un clúster lineal de N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio de la *Figura 1.5*.

Para terminar con esta sección, es interesante notar que (3.15) y (3.16) reproducen los niveles de energía para el pozo unidimensional de potencial infinito porque si hacemos que $a_0 \to 0$, entonces desde la ecuación (3.16) se observa que no existe diferencia entre el vector de Bloch K y el vector de propagación k, y de la ecuación (3.15), al anular el término proporcional a a_0 se obtiene exacatamente $0 = \sin[k(a_1 + (N-1)b + a_2)]$ y al poner $L = a_1 + (N-1)b + a_2$ donde L es el ancho del pozo, se sigue que:

$$k_n L = n\pi \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2\mu L^2} \quad \text{si} \quad n = 1, 2, \ldots, \tag{3.17}$$

las cuales corresponden a los estados permitidos del caso unidimensional de un pozo de potencial infinito.

3.2. Segundo Modelo

Similarmente para el segundo modelo, recordemos ahora que si consideramos las energías ligadas ($E < 0$) en el diagrama de la *Figura 2.5*, se obtiene la solución no trivial (2.29) al aplicar las condiciones de frontera y usar la relación (2.28) para cada átomo con la matriz de transferencia (2.30) asociada al $j-$ésimo átomo del clúster lineal de la cadena atómica.

Considere ahora las siguientes redefiniciones:

$$\begin{pmatrix} e^{k[a_1+(j-1)(b+c)]}A_{2j-1} \\ e^{-k[a_1+(j-1)(b+c)]}B_{2j-1} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} A_{2j-1} \\ B_{2j-1} \end{pmatrix} \text{ y } \begin{pmatrix} e^{k[a_1+j(b+c)]}A_{2j+1} \\ e^{-k[a_1+j(b+c)]}B_{2j+1} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} A_{2j+1} \\ B_{2j+1} \end{pmatrix} \tag{3.18}$$

Y de manera análoga a la sección anterior, podemos mostrar que redefiniendo a los coeficientes de la forma (3.18) y poniendo a los primeros coeficientes en términos de los últimos coeficientes de la solución a la ecuación de Schrödinger, entonces (2.28) con (2.30) se convierten en:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-kc}\left[\cos(qb) + \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin(qb)\right] & \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q}\right)e^{kc}\sin(qb) \\ -\frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q}\right)e^{-kc}\sin(qb) & e^{kc}\left[\cos(qb) - \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin(qb)\right] \end{pmatrix}^N \begin{pmatrix} A_{2N+1} \\ B_{2N+1} \end{pmatrix} \tag{3.19}$$

Es claro que (3.19) es consistente con la forma de (3.1), pero para este caso $\beta(N) = 2N+1$ y el periodo de la cadena lineal atómica es $\Lambda = b+c$. Proseguimos a aplicar las ecuaciones (3.1) y (3.3) en la ecuación (3.19) y como redefinimos los coeficientes, se concluye que las ecuaciones (2.29) se convierten en:

$$\begin{aligned} &A_1 e^{-ka_1} + B_1 e^{ka_1} = 0 \\ &\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{a_{11}\sin[KN(b+c)] - \sin[K(N-1)(b+c)]}{\sin[K(b+c)]} & \frac{a_{12}\sin[KN(b+c)]}{\sin[K(b+c)]} \\ \frac{a_{21}\sin[KN(b+c)]}{\sin[K(b+c)]} & \frac{a_{22}\sin[KN(b+c)] - \sin[K(N-1)(b+c)]}{\sin[K(b+c)]} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{2N+1} \\ B_{2N+1} \end{pmatrix} \\ &A_{2N+1}e^{-k(c-a_2)} + B_{2N+1}e^{k(c-a_2)} = 0 \end{aligned} \tag{3.20}$$

con

$$\begin{aligned} a_{11} &= e^{-kc}\left[\cos(qb) + \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin(qb)\right], \\ a_{12} &= \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q}\right)e^{kc}\sin(qb), \\ a_{21} &= -\frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q}\right)e^{-kc}\sin(qb) \quad \text{y} \\ a_{22} &= e^{kc}\left[\cos(qb) - \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin(qb)\right] \end{aligned} \tag{3.21}$$

Note que es posible verificar la ecuación (3.2) tomando en cuenta los elementos de matriz (3.21).

Ahora, simplificando las ecuaciones (3.20) usando las ecuaciones (3.21), se obtiene que:

$$\begin{aligned} 0 = &\sinh[k(a_1+a_2-c)]\frac{\sin[K(N-1)(b+c)]}{\sin[K(b+c)]} - \sinh[k(a_1+a_2)]\cos(qb)\frac{\sin[KN(b+c)]}{\sin[K(b+c)]} \\ &- \left[\frac{k}{q}\cosh(ka_1)\cosh(ka_2) - \frac{q}{k}\sinh(ka_1)\sinh(ka_2)\right]\sin(qb)\frac{\sin[KN(b+c)]}{\sin[K(b+c)]}, \end{aligned} \tag{3.22}$$

y por la ecuación (3.4), el vector de Bloch queda determinado por:

$$\cos[K(b+c)] = \cosh(kc)\cos(qb) - \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sinh(kc)\sin(qb) \tag{3.23}$$

En conclusión, la ecuación (3.22) con (3.23) constituyen la fórmula analítica general para hallar las energías ligadas ($E < 0$) ante un clúster lineal de N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio, donde cada átomo ha sido modelado por un pozo de potencial finito como se muestra en la *Figura 2.5*. Nuevamente, en realidad, las ecuaciones (3.22) y (3.23) conducen a una sola ecuación al usar la identidad trigonométrica (3.5) si $N \geq 2$. Particularmente para $N = 2$, las ecuaciones generales (3.22) y (3.23) se reducen a la ecuación analítica (2.20) para hallar los estados ligados ($E < 0$) ante dos átomos idénticos como se observan en la *Figura 2.3* y para verificarlo rápidamente, en la segunda sección *A.2* del *Apéndice A*, se tiene explícitamente que las ecuaciones (3.22) y (2.20) conllevan a la misma ecuación cuando $a_1 = a_2 = 0$.

En cambio, si consideremos las energías dispersivas ($E > 0$) en este sistema, entonces debemos realizar el cambio $k \to ik$ en las ecuaciones (3.22) y (3.23). Esto es:

$$\begin{aligned} 0 = &\sin[k(a_1+a_2-c)]\frac{\sin[K(N-1)(b+c)]}{\sin[K(b+c)]} - \sin[k(a_1+a_2)]\cos(qb)\frac{\sin[KN(b+c)]}{\sin[K(b+c)]} \\ &- \left[\frac{k}{q}\cos(ka_1)\cos(ka_2) - \frac{q}{k}\sin(ka_1)\sin(ka_2)\right]\sin(qb)\frac{\sin[KN(b+c)]}{\sin[K(b+c)]}, \end{aligned} \tag{3.24}$$

con

$$\cos[K(b+c)] = \cos(kc)\cos(qb) - \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q}\right)\sin(kc)\sin(qb) \tag{3.25}$$

Por lo tanto, la ecuación (3.24) con (3.25) constituyen la fórmula analítica general para hallar las energías dispersivas ($E > 0$) ante un clúster lineal de N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio. Véase *Figura 2.5*.

3.3. Fórmula general para energías ligadas ante N pozos de potencial

Describimos aquí los sistemas más comúnmente relacionados con nuestra cadena lineal, es decir, consideramos las energías ligadas ($E < 0$) ante N pozos de potencial pero sin pared de potencial inifinito en sus extremos, como se muestra en la *Figura 3.1* para el caso del modelo de pozos tipo delta de Dirac y como se ve en la *Figura 3.2* para el caso de pozos de potencial rectangulares.

Así, se sabe que para las energías ligadas ($E < 0$) ante un potencial periódico sin las barreras en los extremos, la función de onda $\psi(x)$ debe ser bien comportada, en particular, $\psi_1(x)$ y $\psi_\beta(x)$ deben tender a cero en $x \to -\infty$ y $x \to \infty$, respectivamente; donde el origen se ha situado en la posición del primer pozo. Por tales motivos, se debe imponer que $B_1 = 0$ y $A_\beta = 0$. Sustituyendo ahora la matriz de transición (3.3) en (3.1), se tiene que:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{a_{11}\sin(NK\Lambda) - \sin[(N-1)K\Lambda]}{\sin(K\Lambda)} & \frac{a_{12}\sin(NK\Lambda)}{\sin(K\Lambda)} \\ \frac{a_{21}\sin(NK\Lambda)}{\sin(K\Lambda)} & \frac{a_{22}\sin(NK\Lambda) - \sin[(N-1)K\Lambda]}{\sin(K\Lambda)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ B_\beta \end{pmatrix},$$

Es claro que:

$$0 = \frac{a_{22}\sin(NK\Lambda) - \sin[(N-1)K\Lambda]}{\sin(K\Lambda)} \tag{3.26}$$

Esto quiere decir que para un potencial periódico formado por pozos de potencial, la información de los eigenvalores estará contenida en la cuarta entrada de la matriz de transición general asociada

a la cadena lineal. Note que no se ha especificado si nos situamos en el primer o segundo modelo, ya que, la expresión (3.26) se cumple para un potencial periódico formado por pozos de potencial delta de Dirac o por pozos de potencial finito. Sin embargo, las únicas diferencias que tendrán se encuentran en las expresiones correspondientes al elemento de matriz a_{22} y al vector de Bloch K, las cuales son distintas para cada caso.

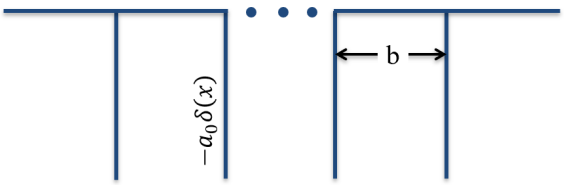

Figura 3.1: Diagrama de N pozos delta de Dirac.

Por lo tanto, sustituyendo el elemento de matriz a_{22} de las expresiones (3.12) en la ecuación (3.26) siendo el periodo $\Lambda = b$, se tiene que:

$$0 = e^{kb}\left(1 - \frac{a_0}{2k}\right)\frac{\sin(NKb)}{\sin(Kb)} - \frac{\sin[(N-1)Kb]}{\sin(Kb)}, \tag{3.27}$$

donde K es el vector de Bloch dado en (3.14). Luego, las ecuaciones (3.27) y (3.14) forman la ecuación analítica general para hallar las energías ligadas ($E < 0$) ante un potencial periódico formado por N pozos de potencial delta de Dirac. Véase *Figura 3.1*.

En realidad, se sabe que la ecuación (3.27) se escribe en términos de la ecuación (3.14) si usamos la idéntidad trigonométrica (3.5). En el caso general para $N \geq 2$, se tiene que la ecuación (3.27) podemos expresarla de la siguiente forma explícita:

$$\begin{aligned} 0 =& e^{kb}\left(1 - \frac{a_0}{2k}\right)\sum_{s=1}^{J_1}(-1)^{s+1}\binom{N-s}{s-1}\left[2\cosh(kb) - \frac{a_0}{k}\sinh(kb)\right]^{N-2s+1} \\ &- \sum_{s=1}^{J_2}(-1)^{s+1}\binom{N-s-1}{s-1}\left[2\cosh(kb) - \frac{a_0}{k}\sinh(kb)\right]^{N-2s} \end{aligned} \tag{3.28}$$

Luego, a raíz de la ecuación explícita (3.28) para $N = 2$, es posible obtener la ecuación analítica (1.18) del *Capítulo 1. Primer Modelo* para hallar las energías ligadas ($E < 0$) ante un doble pozo de potencial tipo delta de Dirac mostrado en la *Figura 1.4* y tal cálculo se desarrolla explícitamente en la primera sección *B.1* del *Apéndice B*.

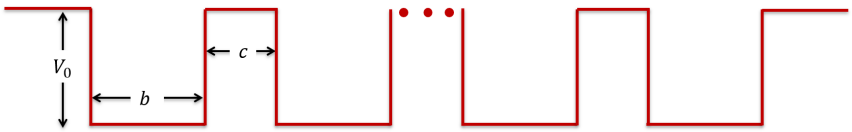

Figura 3.2: Diagrama de N pozos de potencial finito.

Similarmente, sustituyendo el elemento de matriz a_{22} de las expresiones (3.21) en la ecuación (3.27) siendo el periodo $\Lambda = b + c$, se sigue que:

$$0 = e^{kc}\left[\cos(qb) - \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin(qb)\right]\frac{\sin[KN(b+c)]}{\sin[K(b+c)]} - \frac{\sin[K(N-1)(b+c)]}{\sin[K(b+c)]}, \tag{3.29}$$

donde K es el vector de Bloch dado en (3.23). Así, las ecuaciones (3.29) y (3.23) generan la ecuación analítica general para hallar las energías ligadas ($E < 0$) ante un potencial periódico formado por N pozos de potencial finito. Véase *Figura 3.2*.

Nuevamente, se sabe que la ecuación (3.29) puede escribirse en términos de la ecuación (3.23) usando la identidad trigonométrica (3.5) y en el caso general para $N \geq 2$, se obtiene que la ecuación (3.29) toma la siguiente forma explícita:

$$\begin{aligned} 0 =& e^{kc}\left[\cos(qb) - \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin(qb)\right] \times \\ & \sum_{s=1}^{J_1}(-1)^{s+1}\binom{N-s}{s-1}\left[2\cosh(kc)\cos(qb) - \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sinh(kc)\sin(qb)\right]^{N-2s+1} \\ & - \sum_{s=1}^{J_2}(-1)^{s+1}\binom{N-s-1}{s-1}\left[2\cosh(kc)\cos(qb) - \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sinh(kc)\sin(qb)\right]^{N-2s} \end{aligned} \tag{3.30}$$

Seguidamente, poniendo $N = 2$ en la ecuación explícita (3.30), se obtiene la ecuación analítica (2.22) del *Capítulo 2. Segundo Modelo* para hallar las energías ligadas ($E < 0$) ante un doble pozo de potencial finito mostrado en la *Figura 2.4* y dicho cálculo se expone explícitamente en la segunda sección *B.2* del *Apéndice B*.

Cabe destacar que las *sumatorias* en las ecuaciones (3.28) y (3.30) tienen dos límites superiores en cada una de las sumas pues se debe tomar como límite superior al valor $J_1 = J_2 = \frac{1}{2}N$ en ambas sumas si N es un número par, pero si N es impar, entonces los límites superiores de las sumas serán $J_1 = \frac{1}{2}(N+1)$ y $J_2 = \frac{1}{2}(N-1)$, respectivamente.

Como comentario final, la expresión (3.26) se encuentra en la referencia [9] y la ecuación trascendental (3.29), donde K es el vector de Bloch dado en la ecuación (3.23), fue obtenida por *Pochi Yeh* en el libro *Optical Waves in Layered Media*.

Capítulo 4

Energías

En este capítulo, analizaremos el comportamiento de las energías ligadas y de las energías dispersivas en ambos modelos; a saber, usando la forma general de las matrices de transferencia encontradas, se calculan numéricamente las energías para un clúster lineal atómico y para un clúster lineal con moléculas diatómicas para los modelos descritos anteriormente en los *Capítulos 1 y 2*. A manera de extra, la cadena lineal no necesariamente debe tener el mismo tipo de átomos o moléculas diatómicas y se aclarará dependiendo en qué caso nos situemos.

4.1. Análisis dimensional

Primeramente, se hace un análisis dimensional para calcular adecuadamente las energías y estudiar al sistema cuántico en el cual hemos partido de la ecuación de Schrödinger donde se define la cantidad $\mu \equiv rm_e$ como la masa efectiva, r es algún número real, por lo general $0 < r \leq 1$, y m_e es la masa del electrón. Por otro lado, se definió el valor de la energía de la siguiente manera:

$$E = \pm\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \Rightarrow k^2 = \mp\frac{2\mu}{\hbar^2}E$$

Note que $E < 0$ si son energías ligadas y $E > 0$ si son energías dispersivas.

Sea b_0 el parámetro de normalización y multiplicando ahora por b_0^2, entonces:

$$(kb_0)^2 = \mp\frac{2\mu b_0^2}{\hbar^2}E$$

y en virtud de obtener una igualdad con cantidades adimensionales, se definen:

$$k_N = kb_0 \quad \text{y} \quad E_N = \frac{2\mu b_0^2}{\hbar^2}E \tag{4.1}$$

Las expresiones (4.1) están normalizadas y se relacionan por la siguiente igualdad:

$$k_N^2 = \mp E_N \Rightarrow E_N = \pm k_N^2 \tag{4.2}$$

Entonces,

$$E = \pm\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{rb_0^2}k_N^2 \tag{4.3}$$

En vista del factor constante en (4.3), podemos obtener un valor de la energía en *joules* o *electronvoltios* dependiendo del sistema de unidades que se deseé usar y, comenzamos por recordar los valores de la constante de Plank reducida y la masa del electrón para calcular $\hbar^2/2m_e$.

$$\hbar = 1.054571 \times 10^{-34} J \cdot s \quad \text{y} \quad m_e = 9.109382 \times 10^{-31} kg$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m_e} \simeq 6.104256 \times 10^{-39} J \cdot m^2$$

Además, se sabe que $1eV = 1.602176 \times 10^{-19} J$ y 1 Å$= 1 \times 10^{-10} m$. En consecuencia,

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \simeq 6.104256 \times 10^{-39} J \cdot m^2 \simeq \frac{(6.104256 \times 10^{-39})(1 \times 10^{10})^2}{1.602176 \times 10^{-19}} eV \cdot \text{Å}^2 \simeq 3.809978 eV \cdot \text{Å}^2$$

Sin embargo, para este análisis aproximaremos hasta el segundo decimal, esto es:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \simeq 6.10 \times 10^{-39} J \cdot m^2 \quad \text{ó} \quad \frac{\hbar^2}{2m_e} \simeq 3.81 eV \cdot \text{Å}^2 \,. \tag{4.4}$$

Sustituyendo los valores (4.4) en la ecuación (4.3), se sigue que:

$$E = \pm \frac{6.10 \times 10^{-39} J \cdot m^2}{r b_0^2} k_N^2 \quad \text{ó} \quad E = \pm \frac{3.81 eV \cdot \text{Å}^2}{r b_0^2} k_N^2 \tag{4.5}$$

son las expresiones para la energía en *joules* o *electronvoltios*, respectivamente.

No obstante, es importante mencionar que el clúster lineal y su solución general serán expresados en términos de cantidades normalizadas para poder interpretar mejor físicamente al sistema. Así pues, de las ecuaciones (4.5), es claro que el parámetro b_0 tiene unidadades de longitud, ya sean *metros* si usamos la primera o bien, *ángstroms* si se usa la segunda; a partir de esto, las distancias en los modelos serán directamente proporcionales a este parámetro de normalización.

Para el primer modelo en el *Capítulo 1*:

$$\begin{aligned} b_{iN} &= \frac{bi}{b_0} \Rightarrow bi = b_{iN} \cdot b_0 \\ a_{1N} &= \frac{a_1}{b_0} \Rightarrow a_1 = a_{1N} \cdot b_0 \\ a_{2N} &= \frac{a_2}{b_0} \Rightarrow a_2 = a_{2N} \cdot b_0 \\ a_{0iN} &= a_{0i} b_0 \Rightarrow a_{0i} = \frac{a_{0iN}}{b_0} \end{aligned} \tag{4.6}$$

Para el segundo modelo en el *Capítulo 2*:

$$\begin{aligned} b_{iN} &= \frac{bi}{b_0} \Rightarrow bi = b_{iN} \cdot b_0 \\ c_{iN} &= \frac{ci}{b_0} \Rightarrow ci = c_{iN} \cdot b_0 \\ a_{1N} &= \frac{a_1}{b_0} \Rightarrow a_1 = a_{1N} \cdot b_0 \\ a_{2N} &= \frac{a_2}{b_0} \Rightarrow a_2 = a_{2N} \cdot b_0 \\ V_{iN} &= -V_{0iN} \end{aligned} \tag{4.7}$$

con

$$V_i = -\frac{6.10 \times 10^{-39} J \cdot m^2}{r b_0^2} V_{0iN} \quad \text{ó} \quad V_i = -\frac{3.81 eV \cdot \text{Å}^2}{r b_0^2} V_{0iN} \tag{4.8}$$

Obviaremos el cálculo del potencial para ser dimensionalmente correcto en el segundo modelo porque es análogo al cálculo para la energía.

4.2. Primer Modelo

En esta sección se encuentran numéricamente los niveles normalizados de energía ligada ($E_N < 0$) y de energía dispersiva ($E_N > 0$) para el primer modelo con potenciales tipo delta de Dirac para modelar a un clúster lineal de N_2 moléculas formadas por N_1 átomos cada una por medio de su solución general no trivial en términos de cantidades normalizadas. Usando (1.31) y (1.32) del primer capítulo con (4.6) de la sección anterior, la solución general ahora es:

$$\begin{aligned}
&A_1 + B_1 = 0, \\
&\begin{pmatrix} A_{N_1N_2+1} \\ B_{N_1N_2+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \\
&A_{N_1N_2+1} e^{k_N\left(a_{1N}+x_{N_2}^{N_1}+a_{2N}\right)} + B_{N_1N_2+1} e^{-k_N\left(a_{1N}+x_{N_2}^{N_1}+a_{2N}\right)} = 0
\end{aligned} \tag{4.9}$$

con

$$\begin{aligned}
M &= \prod_{j=1}^{N_2}\left(\prod_{i=1}^{N_1} M_{N_2+1-j}^{N_1+1-i}\right) = \prod_{j,i=1}^{N_2,N_1} M_{N_2+1-j}^{N_1+1-i} \\
M_j^i &= \frac{a_{0iN}}{2k_N}\begin{pmatrix} \frac{2k_N}{a_{0iN}} - 1 & -e^{-2k_N(a_{1N}+x_j^i)} \\ e^{2k_N(a_{1N}+x_j^i)} & \frac{2k_N}{a_{0iN}} + 1 \end{pmatrix} \\
x_j^i &\equiv -b_{iN} + (j-1)\sum_{k=1}^{N_1} b_{kN} + \sum_{k=1}^{i} b_{kN}
\end{aligned} \tag{4.10}$$

4.2.1. Clúster lineal de N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio

Inicialmente, considere un clúster lineal formado por N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio, es decir, un clúster lineal de $N_2 = N$ moléculas formadas por $N_1 = 1$ solo tipo de átomos cada una, entonces se programó iterativamente la solución (4.9) con (4.10) y, de esta manera, se llegan a las energías normalizadas para distintos números de átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio.

Por otra parte, el arreglo de la cadena lineal se pone con distancias homogéneas, en otras palabras, las distancias entre átomos se ponen iguales a las distancias de las paredes infinitas de potencial a los átomos más cercanos; debido a esto, se eligen las siguientes distancias normalizadas $b_N = a_{1N} = a_{2N} = 5.0$ con una intensidad $a_{0N} = 2.0$ para cada átomo. Asimismo, el número de átomos a analizar se ha elegido en potencias de dos, en particular, se calcula para $N = 2^n$ átomos idénticos con $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5$.

La *Figura 4.1* muestra los niveles normalizados de energía ligada ($E_N < 0$), los cuales resultaron de forma tal que se obtuvieron N estados ligados como resutado de tener N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio con los parámetros descritos previamente.

Cabe señalar que $E_N = -0.9998$ es el valor central (o mediana) y $\overline{E}_N = -0.9991$ es la media aritmética de los niveles normalizados de energía ligada al sistema de $N = 32$ átomos idénticos, ya que, para un átomo con una profundidad $a_{0N} = 2.0$ y $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, se obtiene que su único nivel normalizado de energía ligada es $E_{1N} = -0.9998$. Lo anterior se debe a que los niveles de energía ligada, ante cadenas lineales de N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio, se distribuyen casi simétricamente alrededor del nivel normalizado de energía ligada a un átomo. Véase *Figura 4.1*.

A medida que las paredes infinitas se alejan a los extremos de los pozos los niveles decrecen, de tal forma que en el caso de paredes muy lejanas $E_{1N} = -1.0$, sin embargo, vemos que la

dependencia no es lineal, cuando las paredes están sólo a una distancia de la separación entre pozos la energía sólo difiere en dos diez milecimas de lo que sería en el infinito.

La *Figura 4.2*, en cambio, ilustra los niveles normalizados de energía dispersiva ($E_N > 0$) donde se obtienen $N+1$ estados dispersivos por cada banda de energía a partir de tener N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio con distancias homogéneas.

Es interesante notar que independientemente del número de átomos, se obtiene que $E_{1N} = 0.3947$ es el valor del primer nivel normalizado de energía dispersiva correspondiente al estado base ubicado en la primera banda de energía. También, note que el primer nivel normalizado ubicado en la segunda banda de energía dispersiva se conserva para cualquier número de átomos en la cadena lineal. Véase *Figura 4.2*.

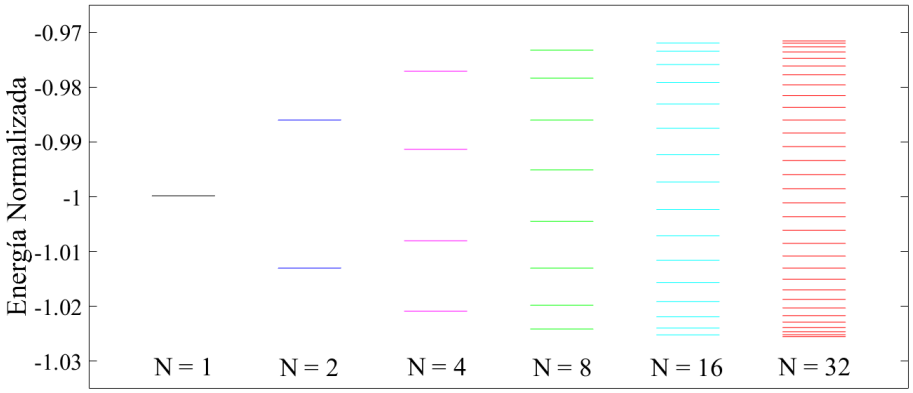

Figura 4.1: Niveles normalizados de energía ligada ante un clúster lineal de $N = 1, 2, 4, 8, 16, 32$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio con $b_N = a_{1N} = a_{2N} = 5.0$ y $a_{0N} = 2.0$.

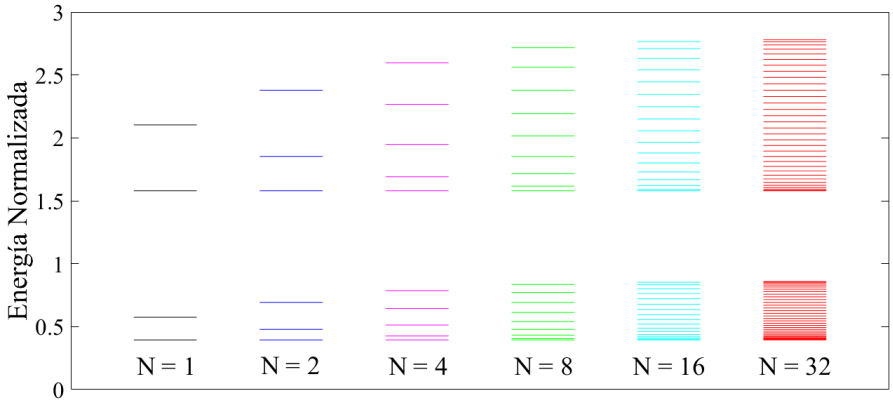

Figura 4.2: Niveles normalizados de energía dispersiva ante un clúster lineal de $N = 1, 2, 4, 8, 16, 32$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio con $b_N = a_{1N} = a_{2N} = 5.0$ y $a_{0N} = 2.0$.

Finalmente, se han generado las funciones de onda *normalizadas* y las densidades de probabilidad mostradas en el *Apéndice C*, las cuales corresponden a los cuatro estados ligados y a los primeros cinco estados dispersivos ante $N = 4$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio. Véase *Apéndice C*.

A manera de *plus*, en la *Figura 4.3* se han agrupado a todas las funciones de onda de los cuatro estados ligados y primeros cinco estados dispersivos ante una cadena lineal de $N = 4$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio.

Claramente se observa que en la parte inferior de la *Figura 4.3* donde se encuentran los estados ligados, se tiene que la función de onda del estado base es una función par, es decir, se cumple que $\psi_1(-x) = \psi_1(x)$. Mientras que la función de onda del segundo estado ligado es una función impar, es decir, $\psi_2(-x) = -\psi_2(x)$. Asimismo, se observa que $\psi_3(x)$ es par y $\psi_4(x)$ es impar. Por otro lado, en la parte superior de la *Figura 4.3* donde se localizan los estados dispersivos, se tiene que la función de onda $\psi_1(x)$ del estado base es par, así como $\psi_3(x)$ y $\psi_5(x)$ son funciones pares, pero $\psi_2(x)$ y $\psi_4(x)$ son funciones impares.

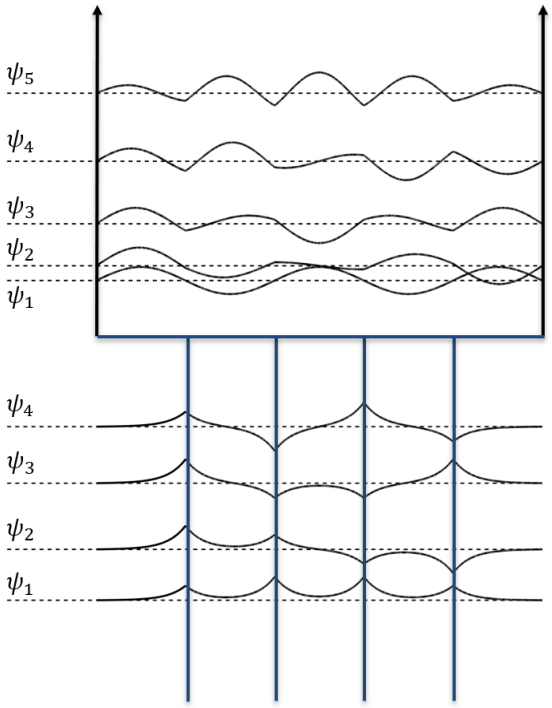

Figura 4.3: Funciones de onda de los estados ligados y primeros cinco estados dispersivos ante un clúster lineal de $N = 4$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio con $b_N = a_{1N} = a_{2N} = 5.0$ y $a_{0N} = 2.0$.

4.2.2. Clúster lineal de N átomos diferentes distribuidos aleatoriamente en el espacio

Previamente se analizó una cadena lineal de átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio, ahora centraremos el estudio en una cadena lineal de átomos diferentes distribuidos aleatoriamente en el espacio. En este cálculo, las intensidades de los potenciales atómicos son distintos, varían en un intervalo determinado y están distribuidas aleatoriamente en el espacio. La *Figura 4.4* muestra los niveles normalizados de energía ligada ante $N = 32$ átomos con profundidades diferentes distribuidos aleatoriamente en el espacio y note que se obtienen 32 estados ligados, lo cual, se esperaba obtener; sin embargo, la distribución de dichos niveles cambia considerablemente debido a pequeños cambios en el intervalo de las intensidades normalizadas.

De derecha a izquierda, vamos a examinar a la *Figura 4.4* para la cual, en cualquier intervalo de las intensidades normalizadas, hay 32 profundidades uniformemente distribuidas en un cierto intervalo de energía, pero aleatoriamente distribuidas en el espacio. La banda de energía ligada en color rojo corresponde al caso cuando todos los pozos atómicos tienen la misma profundidad $a_{0N} = 2.00$.

Por otro lado, la banda en color verde se consigue a partir de variar las intensidades de las profundidades atómicas de 1.95 a 2.05, donde el valor mínimo y el valor máximo de este intervalo son 2.5 % menor y mayor, respectivamente, respecto a las profundidades de los átomos de la banda de energía en color rojo.

Aumentando ahora un 5 % a la intensidad $a_{0N} = 2.00$, considerarla como el valor máximo del intervalo correspondiente a la banda de energía en color cyan y manteniendo el mismo valor mínimo de la intensidad del intervalo de la banda en color verde, entonces se consigue que el intervalo de las intensidades de las profundidades atómicas sea de 1.95 a 2.10 para las cuales, se obtiene la banda de energía en color cyan. Así se fue haciendo los incrementos o los decrementos en los intervalos sumándoles un 2.5 % que corresponde a aumentar o disminuir en un 0.05 a ambos extremos del intervalo de variación de las intensidades de las profundidades atómicas.

El desorden de las energias ligadas es muy evidente para la banda de color negro en el extremo izquierdo de la *Figura 4.4* pues es casi 6 veces más extensa que la banda roja y tan solo bastó un decremento en el valor mínimo al unisono de un incremento en el valor máximo de un 7.5 % respecto al valor $a_{0N} = 2.00$ para obtener los valores extremos de las intensidades del intervalo para la banda de color negro, es decir, poner la variación de las intensidades de las profundidades atómicas en el intervalo de 1.85 a 2.15.

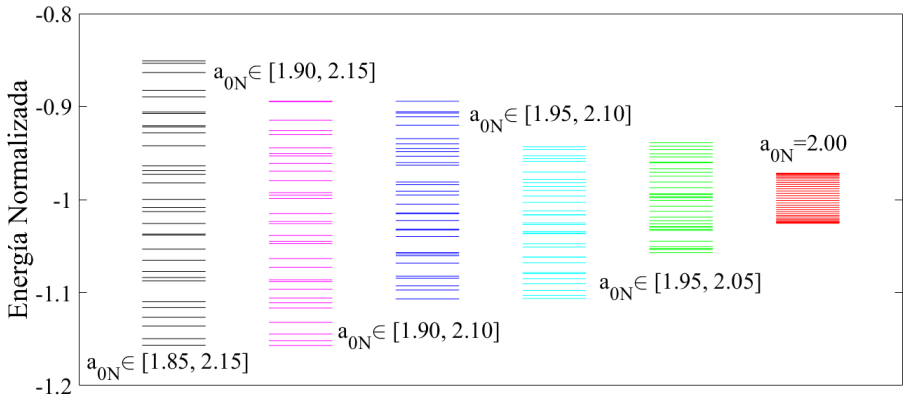

Figura 4.4: Niveles normalizados de energía ligada ante un clúster lineal de $N = 32$ átomos con profundidades diferentes distribuidos aleatoriamente en el espacio siendo $b_N = a_{1N} = a_{2N} = 5.0$.

Para finalizar el análisis del clúster lineal de $N = 32$ átomos con profundidades diferentes distribuidos aleatoriamentre en el espacio, es intersante notar que el promedio de los niveles normalizados de energía ligada está al rededor de $\overline{E}_N = -1.000$ para las bandas de energía en color rojo, verde, azul marino y negro; la razón es que en esos casos se cambió en la misma proporción tanto al valor máximo como al valor mínimo en el intervalo de variación de la intensidad manteniendo al valor central fijo, pero con cambios más pronunciados, esto no se seguirá cumpliendo. Además, al ver a la *Figura 4.4* de izquierda a derecha, se puede observar que un aumento en el valor mínimo de la intensidad implica una disminución en los valores de los niveles superiores de la banda y una disminución en el valor máximo de la intensidad implica un aumento en los valores de los niveles inferiores de la banda pues esto se debe a que las profundidades de los pozos en realidad son negativas.

4.2.3. Clúster lineal de N moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio

Una vez terminado con el estudio para una cadena lineal de átomos, se prosigue a analizar a un clúster lineal de N moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio, en

otras palabras, un clúster lineal de $N_2 = N$ moléculas compuestas por $N_1 = 2$ tipos de átomos cada una; y en seguida, se calculan las energías normalizadas ante distintos números de moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio para distintas carácteristicas en las intensidades de los átomos y en la separación entre sus átomos y moléculas.

En un primer acercamiento a este nuevo sistema, considere los siguientes parámetros normalizados: $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $b_{1N} = 2.5$, $b_{2N} = 5.0$, $a_{01N} = 2.0$ y $a_{02N} = 1.9$ para $N = 2^n$ moléculas diatómicas idénticas con $n = 1, 2, \ldots, 5$. Note que la distancia de separación entre átomos en las moléculas es la mitad de la separación entre las moléculas y la profundidad del segundo átomo en la molécula es solo un 5 % menor respecto al primero. La *Figura 4.5* ilustra el comportamiento de los estados ligados bajo estos parámetros ante N moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio, pero a diferencia de la cadena lineal atómica, aquí se forman dos bandas de energía y cada una de ellas tiene N estados ligados.

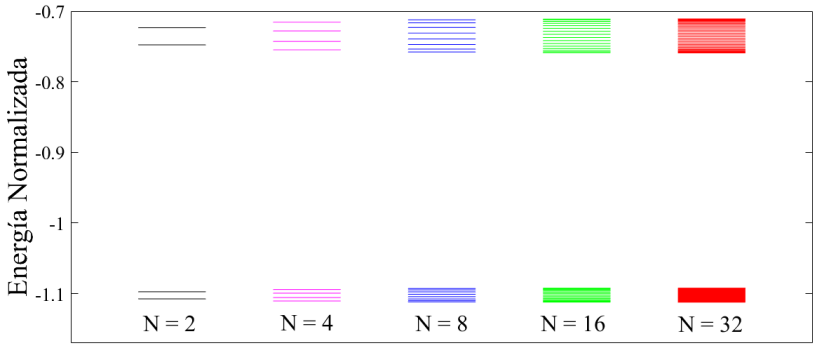

Figura 4.5: Niveles normalizados de energía ligada ante un clúster lineal de $N = 2, 4, 8, 16, 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio con los parámetros $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $b_{1N} = 2.5$, $b_{2N} = 5.0$, $a_{01N} = 2.0$ y $a_{02N} = 1.9$.

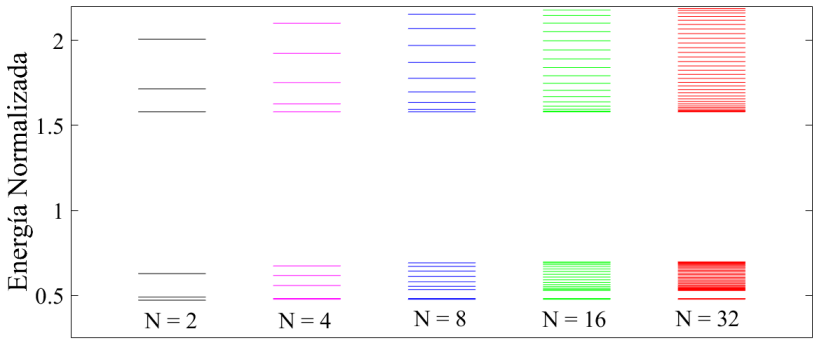

Figura 4.6: Niveles normalizados de energía dispersiva ante un clúster lineal de $N = 2, 4, 8, 16, 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio con los parámetros $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $b_{1N} = 2.5$, $b_{2N} = 5.0$, $a_{01N} = 2.0$ y $a_{02N} = 1.9$.

Por otro lado, en la *Figura 4.6* se muestran los niveles normalizados de energía dispersiva y un *gap* entre las primeras dos bandas de energía con $N + 1$ estados dispersivos cada una. Fijémonos ahora en la parte inferior de la primer banda de energía dispersiva en color rojo generada ante

$N = 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio, note que existe una ligera separación entre dos de sus niveles de energía con el resto, pero su segunda banda presenta un comportamiento distinto pues sus estados inferiores se encuentran muy próximos entre sí a diferencia de sus estados superiores de la misma.

Para continuar con esta subsección, fijamos ahora a un clúster lineal de $N = 32$ moléculas diátomicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio con las mismas características en la intensidad normalizada del primer átomo en cada molécula y en las distancias normalizadas entre átomos y moléculas, no obstante se disminuye en un 2.5 % a la intensidad normalizada del segundo átomo en cada molécula hasta tener una intensidad del 10 % menor respecto al primero, es decir, se incia con $a_{02N} = 2.0$ y se finaliza con $a_{02N} = 1.8$ manteniendo a $a_{01N} = 2.0$. Al variar a la segunda intensidad de esta manera, se conservan el número estados ligados en ambas bandas, pero provoca que las bandas de energía ligada asciendan y se observa que se modifica más intensamente a la segunda banda de energía ligada. Véase *Figura 4.7*.

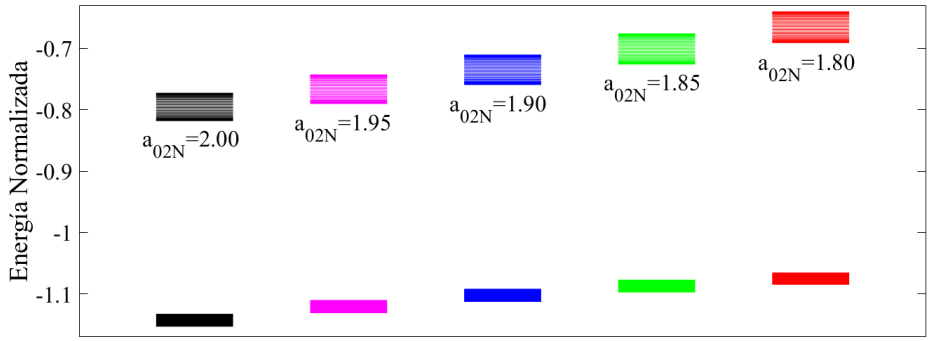

Figura 4.7: Niveles normalizados de energía ligada ante un clúster lineal de $N = 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio con los parámetros $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $b_{1N} = 2.5$, $b_{2N} = 5.0$ y $a_{01N} = 2.0$.

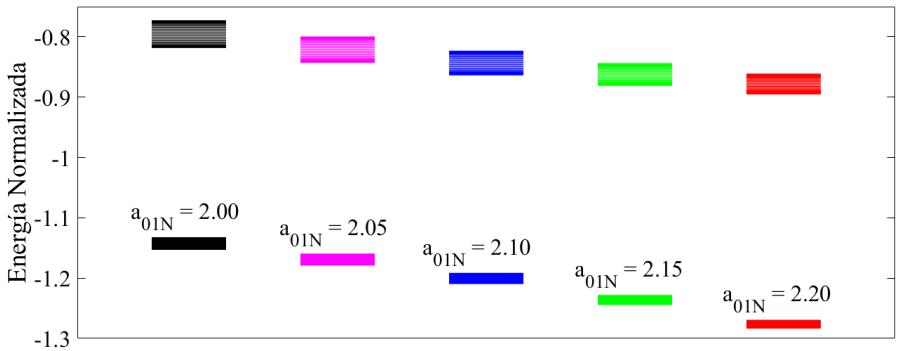

Figura 4.8: Niveles normalizados de energía ligada ante un clúster lineal de $N = 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio con los parámetros $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $b_{1N} = 2.5$, $b_{2N} = 5.0$ y $a_{02N} = 2.0$.

Estudiando brevemente a la *Figura 4.8* y a diferencia de la *Figura 4.7*, aquí fijamos $a_{02N} = 2.0$ y aumentamos en un 2.5 % a la intensidad normalizada del primer átomo en cada molécula hasta con-

seguir una intensidad del 10 % mayor respecto al segundo, esto es, $a_{01N} = 2.00, 2.05, 2.10, 2.15, 2.20$; entonces se mantiene el número de estados ligados en cada banda, pero esta vez, provocando el efecto contrario. Las bandas de energía ligada descienden si aumentamos la intensidad de a_{01N} y ahora se observa que se modifica más intensamente la primer banda de energía ligada. Véase *Figura 4.8*.

Si ahora *unimos* las *Figuras 4.7* y *4.8*, entonces obtenemos la *Figura 4.9* y resulta ser intrigante porque se combinan ambos comportamientos. Sabemos que para estados ligados, las bandas de energía ascienden a menor intensidad y descienden a mayor intensidad de los átomos ya que este comportamiento es debido a que las intensidades son en realidad negativas. Por lo tanto, si variamos las intensidades de los átomos en las moléculas simultáneamente, entonces la banda de energía ligada superior asciende al disminuir la intensidad normalizada del segundo átomo mientras que la banda de energía ligada inferior desciende al aumentar la intensidad del primer átomo pues al pozo más profundo se le asigna la primer banda y al pozo menos profundo se le asigna la segunda banda; por supuesto, conservando el número de estados por cada banda de energía ligada.

El comportamiento que ambos obedecen es que para pozos más profundos las posiciones energéticas de las bandas descienden . Véase *Figura 4.9*.

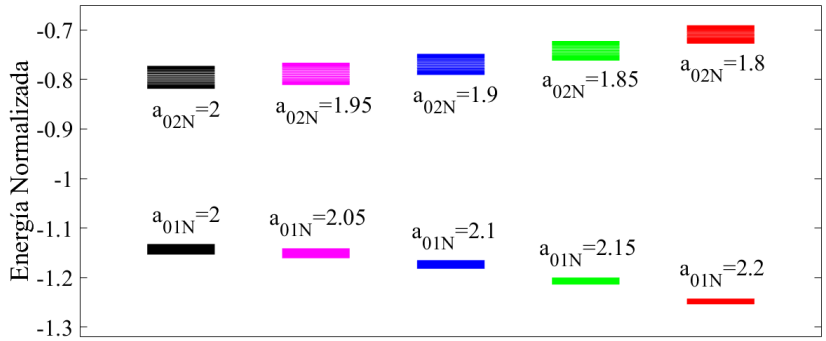

Figura 4.9: Niveles normalizados de energía ligada ante un clúster lineal de $N = 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio con $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $b_{1N} = 2.5$ y $b_{2N} = 5.0$.

Por otro lado, en la *Figura 4.10* se obtienen 33 estados dispersivos en cada banda de energía y coincide para átomos con intensidades diferentes en las moléculas, excepto en un caso. La primer banda en color negro tiene tan solo 31 estados dispersivos porque los átomos de las moléculas ahora tienen las mismas intensidades, entonces el número de estados son influidos únicamente por la separación entre los átomos en cada molécula diatómica y por la separación entre las moléculas diatómicas; por consiguiente, le corresponde un análisis diferente al mostrado hasta el momento. Además, el comportamiento de los estados dispersivos son muy similares, aún con la diferencia al variar simultáneamente a las intensidades de ambos átomos en las moléculas diatómicas idénticas.

Continuando con el estudio del comportamiento de los niveles de energía ante un clúster lineal de $N = 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio, ahora vamos a variar la separación entre las moléculas diatómicas, así como la separación entre los átomos de cada molécula diatómica.

Considerando los siguientes parámetros normalizados: $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $a_{01N} = 2.1$, $a_{02N} = 1.9$ y establecemos que la distancia normalizada de separación entre las moléculas diatómicas sea $b_{2N} = 5.0$. Pero, disminuimos en un 10 % a la distancia normalizada de separación entre los átomos de cada molécula diatómica respecto a la distancia de separación entre dichas moléculas hasta conseguir que la separación entre los átomos en las moléculas diatómicas sea la mitad de la

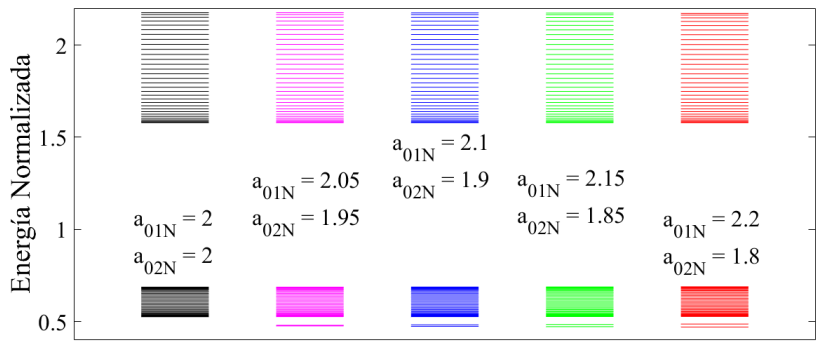

Figura 4.10: Niveles normalizados de energía dispersiva ante un clúster lineal de $N = 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio con $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $b_{1N} = 2.5$ y $b_{2N} = 5.0$.

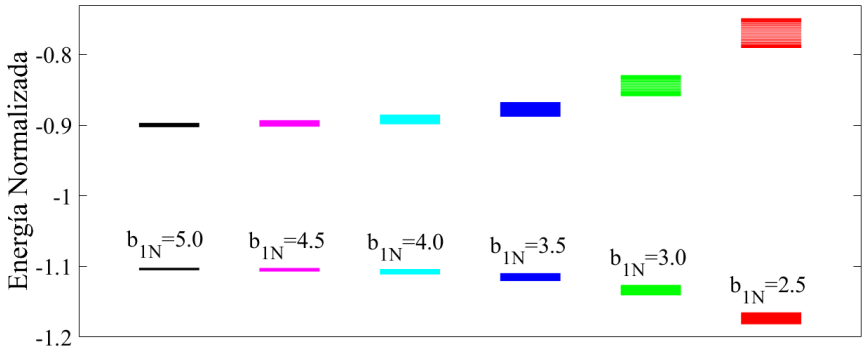

Figura 4.11: Energías normalizadas ligadas ante un clúster lineal de $N = 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas unifomemente en el espacio con los parámetros normalizados $a_{1N} = a_{2N} = 5$, $a_{01N} = 2.1$, $a_{02N} = 1.9$ y $b_{2N} = 5$.

distancia entre las moléculas diatómicas, esto es, la separación entre los átomos de cada molécula diatómica toma los siguientes valores $b_{1N} = 5.0, 4.5, 4.0, 3.5, 3.0, 2.5$. En consecuencia, note que la banda de energía ligada superior asciende mientras que la banda de energía ligada inferior desciende y se modifica más intensamente a la banda superior al disminuir la separación entre los átomos de cada molécula diatómica. Asimismo, se mantienen los 32 estados ligados por cada banda de energía. Véase *Figura 4.11*.

Por otro lado, también se calcularon los niveles normalizados de energía dispersiva mostrados en la *Figura 4.12* y, para cada valor de la distancia de separación entre los átomos de cada molécula diatómica, existen cambios muy significativos en el comportamiento de los niveles de energía en cada una de sus respectivas bandas. Fijémos ahora cuando $b_{1N} = 5.0$, dando lugar a las bandas de energía dispersiva en color negro de la *Figura 4.12* y para esta separación, se muestran las primeras cuatro bandas de energía dispersiva, pero las dos primeras bandas en la parte inferior se encuentran muy ligeramente separadas entre sí al igual que las dos últimas bandas en la parte superior; por tanto, cada par de bandas en color negro vistas de esta manera, hacen ilusión a una sola banda de energía con $2 \times 32 + 1$ estados dispersivos.

El anterior párrafo es posible verificarlo si seguimos con el estudio en la *Figra 4.12*, pero

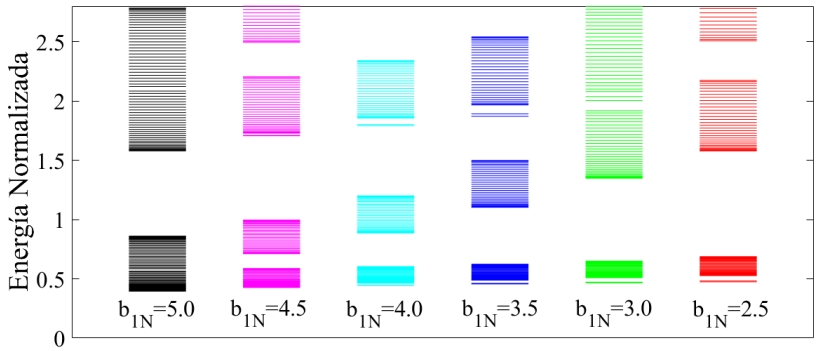

Figura 4.12: Energías normalizadas dispersivas ante un clúster lineal de $N = 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas unifomemente en el espacio con los parámetros normalizados $a_{1N} = a_{2N} = 5$, $a_{01N} = 2.1$, $a_{02N} = 1.9$ y $b_{2N} = 5$.

sitúandonos ahora en las próximas bandas de energía dispersiva en color magenta generadas cuando la separación normalizada entre los átomos de cada molécula es $b_{1N} = 4.5$, entonces se aprecia inmediatamente que sus dos primeras bandas en la parte inferior tienen una notoria separación entre ellas, así como las dos bandas de energía en color magenta en la parte superior. Además, la primera banda y la tercera banda de energía dispersiva en color magenta tienen 33 estados dispersivos cada una, no obstante la segunda banda tiene tan solo 32 estados dispersivos de tal manera que concuerda con el número de estados que se tenían desde las bandas de energía dispersiva en color negro.

Siguiendo con las observaciones de las bandas de energía dispersiva de la *Figura 4.12*, nos fijamos ahora en las bandas de energía de los colores cyan y azul marino que corresponden a los valores $b_{1N} = 4.0$ y $b_{1N} = 3.5$ como sus correspondientes distancias normalizadas de separación entre los átomos en cada molécula. Estas distancias normalizadas conllevan a distinguir mejor a las dos primeras bandas de energía dispersiva una de la otra; y en el caso de la parte inferior de la primer y tercer banda de energía, note que coexisten dos estados dispersivos que se encuentran ligeramente separados del resto de su respectiva banda. Aún con ello, las bandas conservan el número de estados dispersivos, en particular, la primer banda de energía contiene 33 estados dispersivos, la segunda banda tiene 32 estados dispersivos, etc. Véase las bandas en colores cyan y azul marino de la *Figura 4.12*.

También nótese que para cualquier distancia mostrada en la *Figura 4.12*, la primer banda de energía dispersiva se mantiene casi en la misma posición respecto a las demás. Sin embargo, la segunda banda de energía dispersiva asciende rápidamente conforme se disminuye la distancia normalizada de separación entre los átomos de cada molécula diatómica. Así, la segunda y la tercer banda en color negro generadas cuando $b_{1N} = 5.0$, que en principio se encuentran muy separadas entre sí, al disminuir la separación normalizada entre los átomos en las moléculas diatómicas hasta tres quintas partes de la separación entre dichas moléculas, es decir, cuando $b_{1N} = 3.0$ y generar las bandas en color verde, entones observamos que la segunda y la tercer banda de energía dispersiva se aproximan mucho entre sí. Pero, al poner la distancia de separación entre los átomos en las moléculas diatómicas como la mitad de la separación entre moléculas diatómicas, es decir, al poner $b_{1N} = 2.5$; nuevamente la segunda y la tercer banda en color rojo se alejan una de la otra, pero la segunda banda de energía dispersiva en color rojo ahora contiene a 33 estados dispersivos. Véase la *Figura 4.12*.

Siguiendo con el análisis, estudiemos las *Figuras 4.13* y *4.14* que muestran los niveles de energía normalizada ante un clúster lineal de $N = 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas

uniformemente en el espacio, pero en lugar de variar la separación entre los átomos de cada molécula diatómica, ahora nos dirigimos a variar la distancia de separación entre las moléculas diatómicas. Poniendo los parámetros normalizados: $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $a_{01N} = 2.1$, $a_{02N} = 1.9$, fijamos a $b_{1N} = 5.0$ y disminuimos en un 10 % a la distancia normalizada de sepración entre las moléculas diatómicas hasta conseguir una distancia 50 % menor que la distancia normalizada de separación entre los átomos de cada molécula diatómica, es decir, la separación entre las moléculas diatómicas toma los siguientes valores normalizados: $b_{2N} = 5.0, 4.5, 4.0, 3.5, 3.0, 2.5$.

Iniciando con la *Figura 4.13* para los niveles normalizados de energía ligada, nuevamente tenemos que la banda de energía ligada superior asciende mientras que la banda de energía ligada inferior desciende y cada una de estas bandas contienen 32 estados ligados. Además, la segunda banda en la parte superior parece modificarse a mayor medida que la primer banda en la parte inferior al disminuir la separación entre las moléculas diatómicas. En particular, es interesante notar que para cualquier separación entre las moléculas diatómicas mostradas en la *Figura 4.13*, ambas bandas *abandonan* a un nivel de energía conforme se varía esta distancia; en otras palabras, el último estado ligado de la primer banda se mantiene constante, así como el primer estado ligado de la segunda banda también se mantiene constante mientras que las bandas descienden o ascienden, respectivamente.

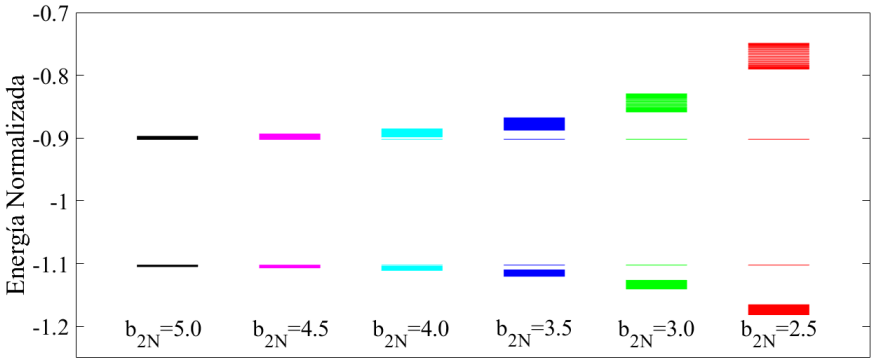

Figura 4.13: Niveles normalizados de energía ligada ante un clúster lineal de $N = 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas unifomemente en el espacio con los parámetros normalizados $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $a_{01N} = 2.1$, $a_{02N} = 1.9$ y $b_{1N} = 5.0$.

En contraparte, también se calcularon numéricamente los niveles normalizados de energía dispersiva que se muestran en la *Figura 4.14* e igualmente, proseguimos analizando las bandas de energía normalizada dispersiva para las distintas distancias de separación entre las moléculas diatómicas. Aquí también se observan cambios muy significativos en el comportamiento de los niveles de energía dispersiva en cada una de sus bandas, pero recuerde que la banda en color negro para $b_{2N} = 5.0$ de la *Figura 4.14* se analizó previamente en la *Figura 4.12* pues las bandas negras en las *Figuras 4.12* y *4.14* corresponden al mismo sistema con los mismos parámetros normalizados.

Por otro lado, si comparamos las *Figuras 4.12* y *4.14*, entonces se aprecian similares entre sí; aunque, el número de estados dispersivos en cada banda no necesariamente coincide. Por ejemplo, la primer banda de energía dispersiva en color magenta de la *Figura 4.14* tiene 34 estados dispersivos y la segunda banda en color magenta tiene ahora 31 estados dispersivos; en cambio, las dos primeras bandas de energía dispersiva en color rojo de la *Figura 4.14* tienen 34 estados dispersivos cada una, pero con la diferencia de que dos de los estados dispersivos de la primer banda se encuentran separados de ella, como se observa en la *Figura 4.14*. Por lo tanto, lo anterior difiere en el número de estados dispersivos con lo obtenido en la *Figura 4.12*.

Para finalizar el análisis del comportamiento de los niveles de energía ante un clúster lineal de

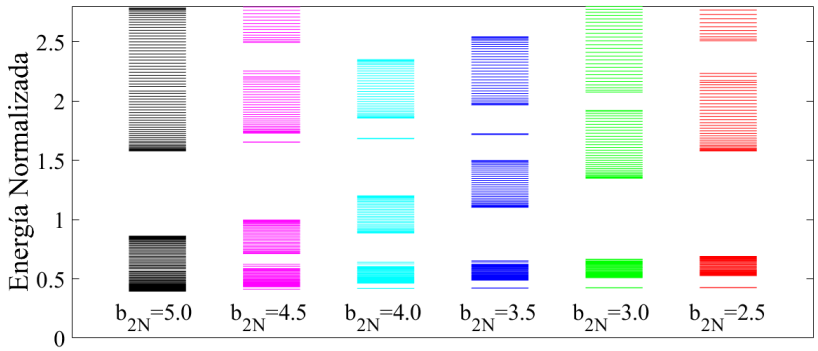

Figura 4.14: Niveles normalizados de energía dispersiva ante un clúster lineal de $N = 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas unifomemente en el espacio con los parámetros normalizados $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $a_{01N} = 2.1$, $a_{02N} = 1.9$ y $b_{1N} = 5.0$.

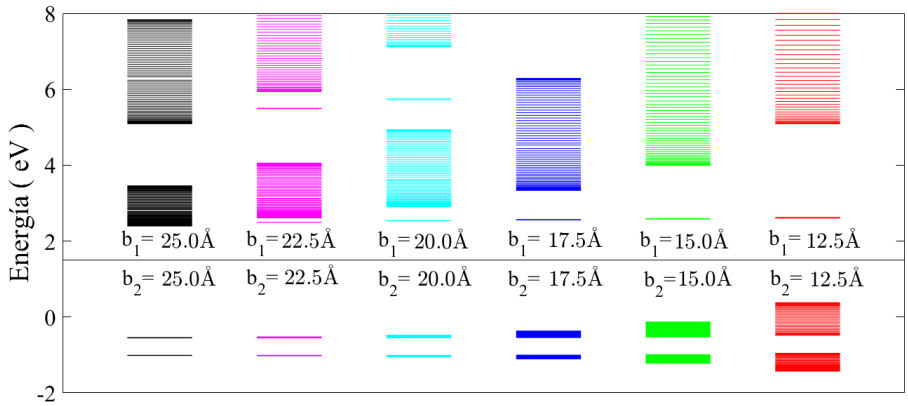

Figura 4.15: Energías ante un clúster lineal de $N = 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas unifomemente en el espacio con los parámetros $a_1 = a_2 = 25$ Å, $a_{01} = 0.42\, m^{-1}$ y $a_{02} = 0.38\, m^{-1}$.

$N = 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio, ya no vamos a considerar cantidades normalizadas sino que pondremos la energía en electronvoltios y utilizaremos la masa efectiva del *Arseniuro de Galio (GaAs)* dada por $\mu = rm_e$ con $r = 0.067$ y el parámetro de normalización $b_0 = 5.0$ Å para usar las relaciones (4.6). En la *Figura 4.15* se muestra el comportamiento de los niveles de energía tanto ligados como dispersivos, donde ponemos a la distancia de separación entre las moléculas diatómicas igual a la distancia de separación entre los átomos de cada molécula y posteriormente, se disminuyen a ambas distancias al mismo tiempo, esto es, las distancias antes mencionadas toman los siguientes valores: $b_1 = b_2 = 25.0$ Å, 22.5 Å , 20.0 Å, 17.5 Å, 15.0 Å, 12.5 Å.

Analizando la *Figura 4.15*, se tiene que cada par de distancias b_1 y b_2 generan dos bandas de energía ligada ($E < 1.5\ eV$) con 32 estados ligados cada una. En el caso cuando $b_1 = b_2 = 12.5$ Å, encontramos un *gap* con un ancho de $0.47\ eV$ y al tomar las diferencias de los valores de las energías extremas de las bandas ligadas en color rojo, se tiene que el ancho de la primer banda ligada es de $0.47\ eV$ y el ancho de la segunda banda ligada es $0.86\ eV$. Por otro lado, fijémonos ahora en las bandas de energía dispersiva ($E > 1.5\ eV$) y conforme se dismiuyen las distancias b_1 y b_2, dos estados dispersivos van quedando apartados del resto de los niveles encontrados en las bandas de

energía dispersiva; en el caso de las bandas en color rojo para estados dispersivos, se tiene que la energía dispersiva en el estado base es $E_1 = 2.60\ eV$ y el segundo nivel de energía se encuentra en $E_2 = 2.62\ eV$, los cuales se localizan aislados de los demás.

4.2.4. Clúster lineal de N moléculas diatómicas diferentes distribuidos aleatoriamente en el espacio

Anteriormente, se estudió una cadena lineal de moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio, pero ahora se estudia brevemente a una cadena lineal de moléculas diatómicas diferentes distribuidas aleatoriamente en el espacio. Y una vez más, se propone la masa efectiva del *Arseniuro de Galio (GaAs)* dada por $\mu = rm_e$ con $r = 0.067$ y el parámetro de normalización $b_0 = 5$ Å para usar las relacions (4.6); en este nuevo caso, las intensidades de los potenciales moleculares son distintos, también varían en un intervalo dado y están distribuidos aleatoriamente. Este cálculo se lleva a cabo variando aleatoriamente las intensidades de los átomos en cada molécula y en la *Figura 4.16* se presentan dos bandas de energía ligada, con 32 estados cada una, generadas ante $N = 32$ moléculas diatómicas diferentes distribuidas aleatoriamente en el espacio para distintos parámetros del sistema.

Las primeras tres bandas de energía ligada ubicadas en la parte izquierda de la *Figura 4.16*, corresponden al caso cuando la separación entre los átomos de cada molécula diatómica es la mitad que la separación entre las moléculas diatómicas, esto es, $b_1 = 12.5$ Å y $b_2 = 25.0$ Å. Las bandas de energía en color negro, magenta y cyan son generadas cuando las intensidades de los potenciales se permiten variar aleatoriamente en los siguientes tres pares distintos de intervalos: (I) de 0.30 m^{-1} a 0.36 m^{-1} y de 0.38 m^{-1} a 0.44 m^{-1}, (II) de 0.32 m^{-1} a 0.36 m^{-1} y de 0.38 m^{-1} a 0.42 m^{-1}, (III) de 0.34 m^{-1} a 0.36 m^{-1} y de 0.38 m^{-1} a 0.40 m^{-1}; para las intensidades del primer y segundo átomo en cada molécula diatómica, respectivamente.

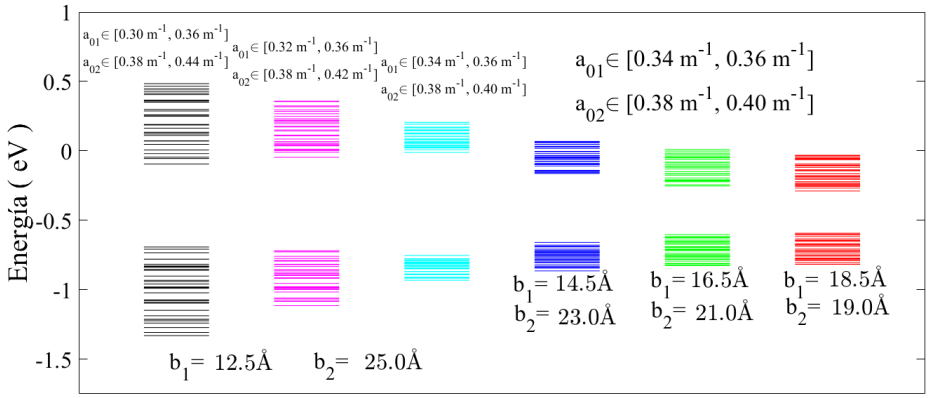

Figura 4.16: Energías ligadas ante un clúster lineal de $N = 32$ moléculas diferentes distribuidas aleatoriamente en el espacio cuyo parámetro de normalización es $b_0 = 5$ Å y $a_1 = a_2 = 25$ Å.

En particular, note que si reducimos los intervalos de variación de las intensidades de los potenciales moleculares, entonces el ancho de las bandas de energía ligada se reducen considerablemente. En particular, fijémonos en las bandas en color negro para las cuales, se tienen los anchos de 0.64 eV y 0.58 eV que corresponden al ancho de la primera banda y de la segunda banda de energía ligada en color negro, respectivamente. Además, los anchos de las primeras bandas en color magenta y cyan son 37.5 % y 71.8 %, respectivamente, menores respecto al ancho de la primera banda en color negro. Pero, los anchos de las segundas bandas de energía en color magenta y cyan son 31.0 % y 62.0 % menores respecto al ancho de la segunda banda de energía en color negro. Por lo tanto, la primera banda de energía ligada se contrae más intensamente. Véase *Figura 4.16*.

En cambio, las tres bandas de energía ligada localizadas en la parte derecha de la *Figura 4.16*, corresponden al caso (III) cuando las intensidades de los potenciales varían aleatoriamente de 0.34 m^{-1} a 0.36 m^{-1} y de 0.38 m^{-1} a 0.40 m^{-1} para las intensidades del primer y segundo átomo en cada molécula diatómica, respectivamente. Pero, las bandas de energía en color azul marino, verde y rojo son generadas a partir de proponer las distancias: (IV) $b_1 = 14.5$ Å y $b_2 = 23.0$ Å, (V) $b_1 = 16.5$ Å y $b_2 = 21.0$ Å, (VI) $b_1 = 18.5$ Å y $b_2 = 19.0$ Å; como la separación entre los átomos en cada molécula diatómica y la separación entre las moléculas diatómicas, respectivamente.

Así, al fijar solamente a un par de intervalos de variación de las intensidades de los potenciales moleculares y variar las distancias de separación, se observa que los anchos de las bandas de energía ligada no se contraen significativamente. Véase *Figura 4.16*.

4.3. Segundo Modelo

Una vez más, en esta nueva sección se encuentran numéricamente las energías normalizadas tanto ligadas ($E_N < 0$) como dispersivas ($E_N > 0$) para un segundo modelo de un clúster lineal de N_2 moléculas formadas por N_1 átomos cada una por medio de su solución general no trivial en términos de cantidades normalizadas de manera semejante a lo realizado para el primer modelo de la sección anterior. Utilizando ahora las ecuaciones (2.49) y (2.50) del *Capítulo 2* con las relaciones (4.7) de la *Sección 4.1* de este capítulo, la solución general es:

$$\begin{aligned}
&A_1 + B_1 = 0, \\
&\begin{pmatrix} A_{2N_1N_2+1} \\ B_{2N_1N_2+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \\
&A_{2N_1N_2+1} e^{k_N\left(a_{1N}+x_{N_2}^{N_1}+a_{2N}\right)} + B_{2N_1N_2+1} e^{-k_N\left(a_{1N}+x_{N_2}^{N_1}+a_{2N}\right)} = 0
\end{aligned} \tag{4.11}$$

con

$$\begin{aligned}
M &= \prod_{j=1}^{N_2}\left(\prod_{i=1}^{N_1} M_{N_2+1-j}^{N_1+1-i}\right) = \prod_{j,i=1}^{N_2,N_1} M_{N_2+1-j}^{N_1+1-i} \\
M_j^i &= \frac{V_{0iN}}{2k_N q_{iN}} \begin{pmatrix} e^{-k_N b_{iN}} \sin(2\theta_i + q_{iN} b_{iN}) & -e^{k_N b_{iN}} e^{-2k_N(a_{1N}+x_j^i)} \sin(q_{iN} b_{iN}) \\ e^{-k_N b_{iN}} e^{2k_N(a_{1N}+x_j^i)} \sin(q_{iN} b_{iN}) & e^{k_N b_{iN}} \sin(2\theta_i - q_{iN} b_{iN}) \end{pmatrix} \\
x_j^i &\equiv -c_{iN} + (j-1)\sum_{k=1}^{N_1}(b_{kN} + c_{kN}) + \sum_{k=1}^{i}(b_{kN} + c_{kN}) \\
V_{0iN} &= q_{iN}^2 + k_N^2 \\
\theta_i &= \arcsin\left(\frac{q_{iN}}{\sqrt{V_{0iN}}}\right)
\end{aligned} \tag{4.12}$$

4.3.1. Clúster lineal de N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio

En primer lugar, supongamos un clúster lineal formado por N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio, es decir, un clúster lineal de $N_2 = N$ moléculas compuestas por $N_1 = 1$ solo tipo de átomos cada una. Así, vamos a programar iterativamente la solución (4.11) con (4.12) para encontrar numéricamente las energías normalizadas ante distintos números de átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio. También, definimos una expresión en términos de la longitud de enlace de los átomos en la molécula y la distancia de separación entre

ellas dadas por b_N y c_N, respectivamente. Esta expresión es llamada *fracción de llenado* y estará definida por:

$$f = \frac{1}{1 + \frac{b_N}{c_N}} \tag{4.13}$$

En el estudio del arreglo de la cadena lineal atómica se fijan los siguientes parámetros normalizados: los átomos extremos de la cadena lineal están a $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$ de las barreras de potencial infinitas y la energía potencial de cada átomo es $V_N = -V_{0N} = -1.0$.

Considere $N = 2^n$ átomos idénticos para $n = 0, 1, \ldots, 5$ y $b_N = c_N = 4.0$. Note que el ancho de los átomos es igual a la distancia de separación entre ellos y, por tanto, $f = 1/2$ es la fracción de llenado en este caso. La *Figura 4.17* ilustra el comportamiento de los niveles normalizados de energía ligada bajo estos parámetros ante N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio y, como resultado, se generan dos bandas de energía ligada al aumentar el número de átomos, la primera banda tiene N estados ligados, pero el número de niveles de la segunda banda de energía ligada varía conforme agregamos átomos a la cadena lineal.

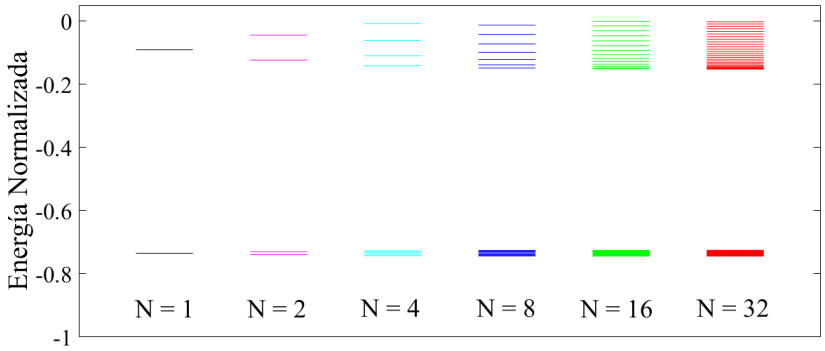

Figura 4.17: Niveles normalizados de energía ligada ante un clúster lineal de $N = 1, 2, 4, 8, 16, 32$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio cuya energía potencial es $V_N = -1.0$ para cada átomo con $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $b_N = c_N = 4.0$ y $f = 1/2$.

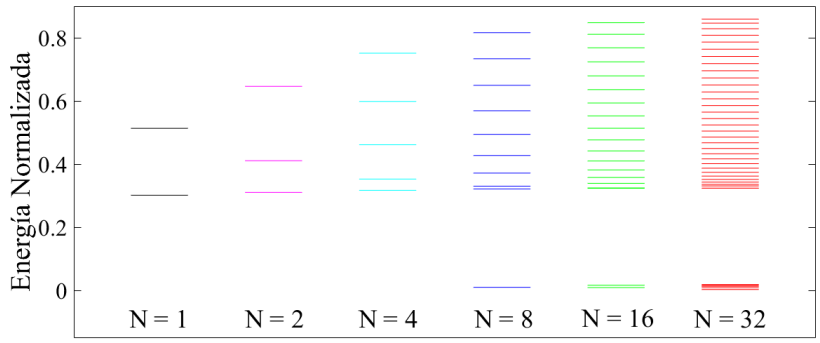

Figura 4.18: Niveles normalizados de energía dispersiva ante un clúster lineal de $N = 1, 2, 4, 8, 16, 32$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio cuya energía potencial es $V_N = -1.0$ para cada átomo con $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $b_N = c_N = 4.0$ y $f = 1/2$.

En particular, si nos fijamos ahora en las bandas de energía ligada en color rojo para $N = 32$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio, entonces la primera banda tiene 32 estados ligados y la segunda banda solamente tiene 27 estados ligados. Donde es interesante obtener que $\overline{E}_N = -0.7347$ es la media aritmética de los valores de las energías normalizadas ubicadas en la primera banda ligada en color rojo, ya que, $E_{1N} = -0.7347$ es el nivel normalizado de energía ligada en el estado base ante un único átomo con energía potencial $V_N = -1.0$. Véase *Figura 4.17*.

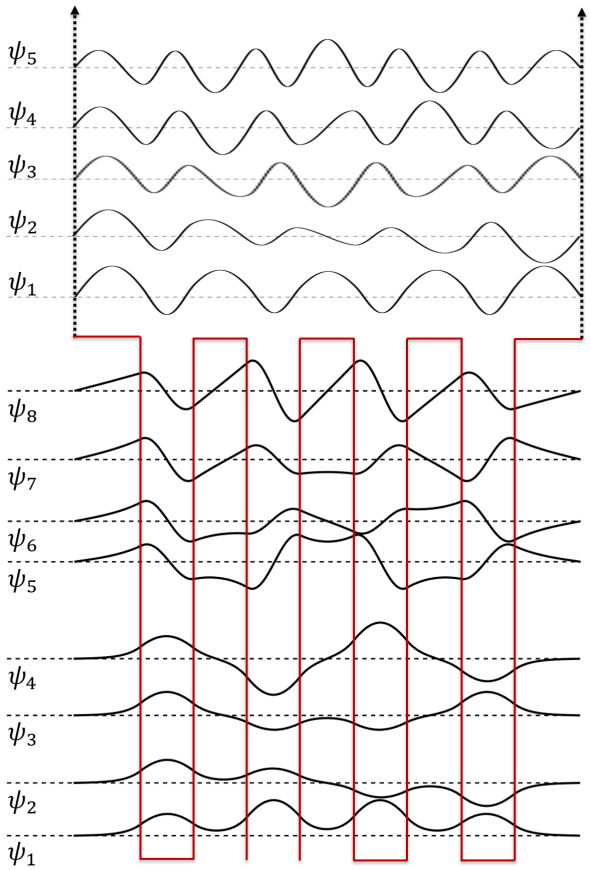

Figura 4.19: Funciones de onda de los estados ligados y primeros cinco estados dispersivos ante un clúster lineal de $N = 4$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio con $f = 1/2$.

Por otro lado, la *Figura 4.18* muestra los niveles normalizados de energía dispersiva ante N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio con $f = 1/2$ como la fracción de llenado. La segunda banda de energía tiene $N + 1$ estados dispersivos, pero es importante notar que la primera banda de energía dispersiva se manifiesta a partir de $N = 8$ átomos idénticos pues el número de estados dispersivos en la primera banda incrementa al aumentar el número de átomos de la cadena lineal a causa de los estados ligados, aparentemente faltantes, de la segunda banda de energía ligada; puesto que, si sumamos el número de estados de la segunda banda de energía ligada de la *Figura 4.17* con el número de estados de la primera banda de energía dispersiva de la *Figura 4.18*, entonces obtenemos un total N estados.

Por ejemplo, la primera banda de energía dispersiva en color rojo tiene 5 estados dispersivos y previamente se comentó que la segunda banda de energía ligada en color rojo tiene 27 estados ligados y al sumar ambas cantidades, se obtienen un total de 32 estados. Por lo tanto, los estados ligados faltantes de la *Figura 4.17* han *migrado* como estados dispersivos de tal manera que forman

la primera banda de energía dispersiva de la *Figura 4.18*.

Además, se han generado las funciones de onda *normalizadas* y las densidades de probabilidad mostradas en el *Apéndice D*, las cuales corresponden a los ocho estados ligados y a los primeros cinco estados dispersivos ante $N = 4$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio mostrados en las *Figuras 4.17* y *4.18* con $f = 1/2$ como fracción de llenado.. Véase *Apéndice D*.

Nuevamente, a manera de *plus*, en la *Figura 4.19* se han agrupado a todas las funciones de onda de los ocho estados ligados y primeros cinco estados dispersivos ante una cadena lineal de $N = 4$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio.

Fijémos ahora a una cadena lineal de $N = 32$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio cuya energía potencial es de $V_N = -1.0$ para cada átomo, donde las distancias de los átomos extremos de la cadena lineal están a $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$ de las barreras de potencial infinitas y estudiemos un par de casos que describen diferentes comportamientos de los niveles de energía a partir de cómo se relaciona el ancho de los átomos con la distancia de separación entre ellos en la fracción de llenado.

Supongamos una dependencia lineal entre el ancho de los átomos y la distancia de separación entre ellos. Las *Figuras 4.20* y *4.21* muestran las energías normalizadas tanto ligadas como dispersivas donde se observa la *migración* de los niveles de energía usando diferentes fracciones de llenado, las cuales han sido calculadas a partir de la expresión (4.13).

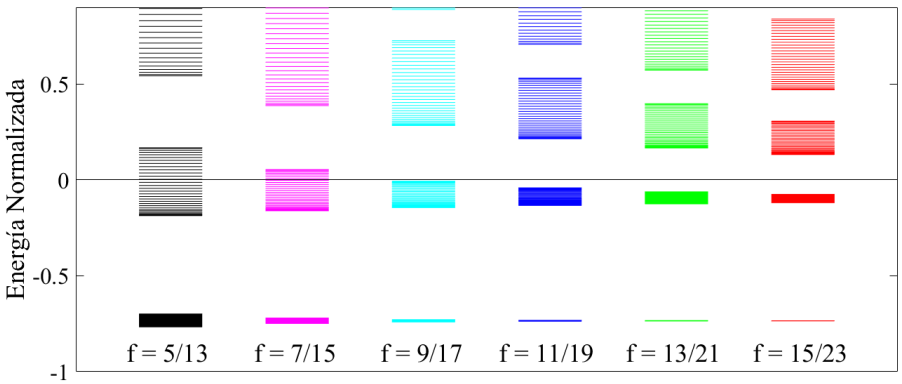

Figura 4.20: Energías normalizadas ante un clúster lineal de $N = 32$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio cuya energía potencial es $V_N = -1.0$ para cada átomo con $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$ y $b_N = 4.0$.

Primero consideré $b_N = 4.0$ como el ancho de los átomos y $c_N = 2.5, 3.5, 4.5, 5.5, 6.5, 7.5$ son los valores que toma la distancia de separación entre los átomos en la cadena lineal. Esto da lugar a la *Figura 4.20* que muestra los niveles normalizados de energía ligada ($E_N < 0$) y de energía dispersiva ($E_N > 0$) ante $N = 32$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio. Situándonos en la primera banda de energía ligada, se tienen 32 estados ligados para cualquier fracción de llenado y podemos apreciar que al ir aumentando el valor de la fracción de llenado, los niveles normalizados de energía ligada tienden a su media aritmética $\overline{E}_N = -0.7347$, la cual es constante para cada fracción de llenado y es el valor de la energía normalizada en el estado base para un sólo átomo mencionado anteriormente.

Por otro lado, observe que las bandas de energia dispersiva en la parte superior de la *Figura 4.20* van descendiendo al mismo tiempo que se van compactando. Asimismo, se puede distinguir el cambio de estados dispersivos a estados ligados en la frontera ($E_N = 0$) donde se crea una especie de banda de energía con el inconveniente que algunos estados son dispersivos mientras que otros son estados ligados a la cadena lineal, tal como se percibe para las bandas generadas con $f = 5/13$, $7/15$ a la izquierda de la *Figura 4.20*.

En particular, analicemos cuando la fracción de llenado es $f = 7/15$ a partir de que $b_N = 4.0$ es

el ancho de los átomos y $c_N = 3.5$ es la distancia de separación entre ellos. La primera y la segunda banda de energía ligada ($E_N < 0$) en color magenta tienen 32 y 24 estados ligados, respectivamente; no obstante, la primera banda de energía dispersiva ($E_N > 0$) en color magenta únicamente tiene 8 estados dispersivos y junto con la segunda banda de energía ligada aparentan ser una sola banda de energía con 32 estados. También, podemos obtener algo análogo para $f = 5/13$ que genera las bandas de energía en color negro. Véase *Figura 4.20*

Pongamos ahora que $c_N = 4.0$ es la distancia de separación entre los átomos, $b_N = 3.0, 3.4, 3.8, 4.2, 4.6, 5.0$ son los valores que toma el ancho de los átomos y, como resultado, se obtiene la *Figura 4.21* que muestra los niveles normalizados de energía ligada ($E_N < 0$) y de energía dispersiva ($E_N > 0$) ante $N = 32$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio, pero esta vez, únicamente se varía al ancho de los átomos en la cadena lineal.

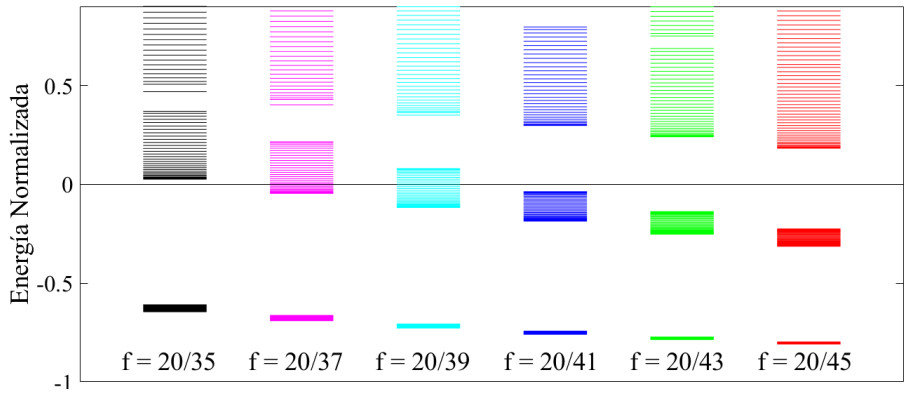

Figura 4.21: Energías normalizadas ante un clúster lineal de $N = 32$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio cuya energía potencial es $V_N = -1.0$ para cada átomo con $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$ y $c_N = 4.0$.

En la *Figura 4.21*, observe que las bandas de energía ligada ($E_N < 0$) descienden y se compactan cada vez que se disminuye la fracción de llenado (los anchos de los pozos aumenta por lo que existe más interacción entre los pozos). Para empezar, note que existe una única banda de energía ligada en color negro con 32 estados ligados generados a raíz de $f = 20/35$, fracción de llenado desde la cual, se contempla el cambio de estados dispersivos a estados ligados en la frontera ($E_N = 0$) para las siguientes fracciones de llenado $f = 20/37$ y $f = 20/39$.

En particular, si $c_N = 4.0$ y $b_N = 3.4$, se tiene $f = 20/37$ donde la primera y la segunda banda de energía ligada ($E_N < 0$) en color magenta tienen 32 y 11 estados ligados, respectivamente; pero, la primera banda de energía dispersiva ($E_N > 0$) en color magenta solo tiene 21 estados dispersivos. De tal manera que, una vez más, se confirma que se obtienen 32 estados al sumar el número de estados ubicados en la segunda banda de energía ligada y la primera banda de energía dispersiva de la *Figura 4.21*.

4.3.2. Clúster lineal de N moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio

Ya que hemos terminado con el estudio para una cadena lineal de átomos, ahora vamos a analizar un clúster lineal de N moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio, es decir, un clúster lineal de $N_2 = N$ moléculas compuestas por $N_1 = 2$ tipos de átomos cada una y, en seguida, se calculan numéricamente las energías normalizadas ante distintos números de moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio. Para esta nueva sección, definimos una *fracción de llenado* asociada a los potenciales atómicos en cada molécula, la cual

está dada por la siguiente expresión:

$$f_V = \frac{1}{1 + \frac{V_{1N}}{V_{2N}}} = \frac{1}{1 + \frac{V_{01N}}{V_{02N}}}, \tag{4.14}$$

donde $V_{1N} = -V_{01N}$ y $V_{2N} = -V_{02N}$ son las energías normalizadas de potencial asociadas al primer y al segundo átomo, respectivamente.

También definimos dos fracciones de llenado adicionales que relacionan el ancho de los átomos con las distancias de separación entre átomos y moléculas. Estas son:

$$f_1 = \frac{1}{1 + \frac{b_{1N}}{c_{1N}}} \quad \text{y} \quad f_2 = \frac{1}{1 + \frac{b_{2N}}{c_{2N}}}, \tag{4.15}$$

donde b_{1N} y b_{2N} son los anchos respectivos del primer y del segundo átomo en cada molécula diatómica, mientras que c_{1N} es la distancia de separación entre los átomos de cada molécula diatómica y c_{2N} es la distancia de separación entre dichas moléculas.

Primero, variamos el número de moléculas diatómicas idénticas en potencias de dos, en particular, considere una cadena lineal con $N = 2^n$ moléculas diatómicas idénticas para $n = 0, 1, \ldots, 5$ donde los átomos extremos de la cadena lineal están a $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$ de las barreras de potencial infinitas. Asimismo, ponemos que $V_{1N} = -1.2$ y $b_{1N} = 2b_{2N} = 4.0$ usando $f_V = 10/22$, $f_1 = 1/3$ y $f_2 = 3/5$ como las fracciones de llenado. Véase *Figura 4.22*.

Note que los parámetros mencionados en el párrafo anterior son suficientes para hallar los demás faltantes pues teniendo en cuenta las definiciones de las fracciones de llenado, se obtienen que $V_{2N} = -1.0$, $c_{1N} = 2.0$ y $c_{2N} = 3.0$. Asimismo, es claro que en cada molécula diatómica, la profundidad del potencial asociado al primer átomo es 20 % mayor respecto a la profundidad del segundo átomo y el ancho del primer átomo es el doble del ancho del segundo átomo. Por otro lado, la distancia de separación entre los átomos de cada molécula diatómica es 50 % menor respecto a la distancia de separación entre dichas moléculas.

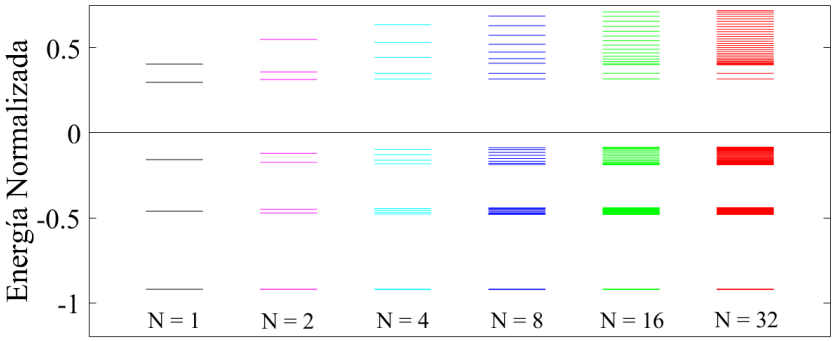

Figura 4.22: Energías normalizadas ante un clúster lineal de $N = 1, 2, 4, 8, 16, 32$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio con $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $V_{1N} = -1.2$, $b_{1N} = 2b_{2N} = 4.0$, $f_V = 10/22$, $f_1 = 1/3$ y $f_2 = 3/5$.

La *Figura 4.22* muestra cuatro bandas de energía, en particular, hay tres bandas de energía ligada ($E_N < 0$) con N estados ligados cada una y una banda de energía dispersiva ($E_N > 0$), en el intervalo de energía considerado, con $N+1$ estados dispersivos. Estas bandas han sido generadas al variar N, el número de moléculas diatómicas idénticas. Además, observe que los estados ubicados en la primera banda de energía ligada se encuentran degenerados compartiendo la energía en el estado base de una molécula diatómica. Por otro lado, los estados ligados ubicados en la primera

y en la segunda banda de energía ligada se distribuyen casi simétricamente al rededor del segundo y del tercer nivel normalizado de energía ligada ante una molécula diatómica.

Fijémos ahora a una cadena lineal de $N = 16$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio donde las distancias de los átomos extremos del clúster lineal están a $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$ de las barreras de potencial infinitas y analicemos algunos casos describiendo el comportamiento de las energías normalizadas a partir de variar las fracciones de llenado. De modo que iniciemos variando f_V y, posteriormente, variaremos f_1 y f_2.

Como se comentó en el párrafo anterior, vamos a iniciar con la variación de f_V siendo $V_{2N} = -1.0$ un valor fijo para la profundidad del potencial del segundo átomo en cada molécula diatómica, entonces solo haremos variar V_{1N} que la profundidad del potencial asociado al primer átomo mientras que usamos las mismas distancias que se manejaron en la *Figura 4.22*, esto es, fijaremos las siguientes distancias normalizadas $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $b_{1N} = 2b_{2N} = 4.0$ con $f_1 = 1/3$ y $f_2 = 3/5$ como fracciones de llenado. Véase la *Figura 4.23* para apreciar el comportamiento de las energías normalizadas al variar f_V.

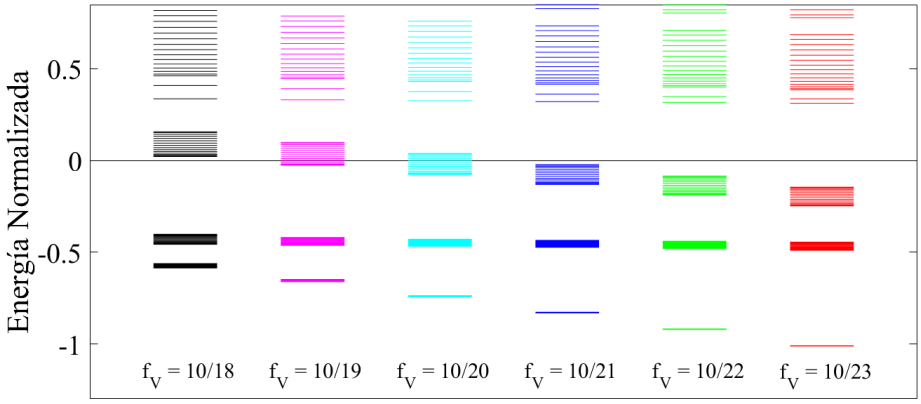

Figura 4.23: Energías normalizadas ante un clúster lineal de $N = 16$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio con $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $V_{2N} = -1.0$, $b_{1N} = 2b_{2N} = 4.0$, $f_1 = 1/3$ y $f_2 = 3/5$.

La *Figura 4.23* muestra las bandas de energía ante distintos valores de la fracción de llenado asociada a los potenciales átomicos de cada molécula. Es intersante notar que hay cuatro bandas de energía en color negro generadas ante $f_V = 10/18$, de las cuales, las dos bandas en la parte inferior de la gráfica ($E_N < 0$) tienen 16 estados ligados cada una, así como la primera banda de la parte superior de la gráfica ($E_N > 0$) tiene 16 estados dispersivos, pero la segunda banda de energía dispersiva tiene 17 estados y dos de ellos se distinguen bien uno del otro y, aunque se encuentran separados del resto, su separación se hace cada vez más estrecha al disminuir la fracción f_V. Para el caso $f_V = 10/18$, note que la profundad del potencial asociado al primer átomo es 20 % mayor respecto a la profundidad del segundo.

Observamos que la segunda banda ligada casi no mueve su posición enegética (en realidad desciende ligeramente), algo semejante sucede también con la segunda banda dispersiva que después se convierte en primera para $f \geq 10/21$.

Asimismo, la banda de energía dispersiva encontrada cerca de la frontera ($E_N = 0$) para $f_V = 10/18$, conserva 16 estados pese a que va descendiendo hasta convertirse en una banda de energía ligada para $f_V = 10/23$. Terminando tal sucesión, también se observan cuatro bandas de energía en color rojo generadas ante $f_V = 10/23$ y, esta vez, se obtienen tres bandas de energía ligada ($E_N < 0$) con 16 estados cada una y la primera banda de energía dispersiva ($E_N > 0$) con 17 estados. Véase la *Figura 4.23*.

Por otro lado, note que las bandas de energía ligada se degeneran (las bandas se compactan)

mientras que la primera banda desciende y la segunda banda desciende ligeramente hasta aproximarse a la que será la tercera banda de energía ligada. Y, como consecuencia, las primeras dos bandas de energía ligada, que en principio se encontraban muy próximas entre sí, se alejan una respecto de la otra. Véase parte inferior de la *Figura 4.23*.

Sin embargo, otra manera de variar la fracción f_V es cambiando V_{2N}, la profundidad del potencial asociado al segundo átomo y fijando la profundidad del primero a $V_{1N} = -1.2$. Así, la *Figura 4.24* también muestra las bandas de energía, ante distintos valores de la fracción de llenado asociada a los potenciales átomicos de cada molécula, pero presentando un comportamiento distinto al mostrado anteriormente en cómo se disponen sus niveles de energía. Véase la *Figura 4.24* para apreciar el comportamiento de las energías normalizadas al variar f_V.

Al fijarnos en los estados ligados ($E_N < 0$) donde se aprecian tres bandas de energía para cada f_V, la primera banda permanece fija mientras que la segunda banda se degenera y desciende rápidamente hasta aproximarse a la primera; en cambio, la tercera banda de energía ligada se degenera y desciende paulatinamente. Por otro lado, la primera banda de energía dispersiva ($E_N > 0$) se comporta de manera muy similar al caso anteriormente visto pues contiene 17 estados dispersivos y dos de estos estados se encuentran separados del resto. Véase *Figura 4.24*.

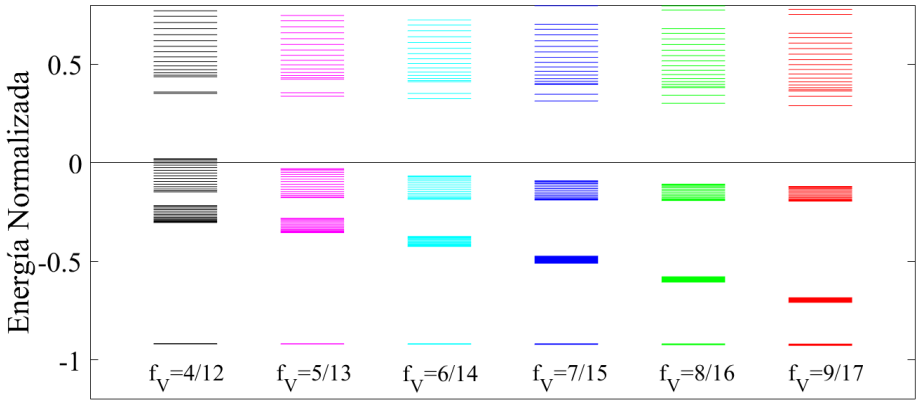

Figura 4.24: Energías normalizadas ante un clúster lineal de $N = 16$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio con $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $V_{1N} = -1.2$, $b_{1N} = 2b_{2N} = 4.0$, $f_1 = 1/3$ y $f_2 = 3/5$.

Veamos ahora qué pasa si variamos f_1 y f_2, las cuales relacionan el ancho de los átomos con las distancias de separación entre átomos y molélculas. Entre otras cosas, se obtendrán comportamientos similares al variar una u otra fracción de llenado.

Primeramente, modificamos el valor de f_1 siendo $b_{1N} = 4.0$ un valor fijo para el ancho del primer átomo de cada molécula diatómica y, para ello, variamos el valor de c_{1N} que es la distancia de separación entre los átomos de dichas moléculas. Véase la *Figura 4.25* para apreciar el comportamiento de las energías normalizadas si se varía f_1.

Como hemos estado observando, tenemos que la *Figura 4.25* también degenera las bandas de energía a la medida de que aumentamos la fracción de llenado. Cuando $f_1 = 0$, se tiene que $c_{1N} = 0$, es decir, la separación entre los átomos de cada molécula diatómica es nula; generando así, tres bandas de energía ligada ($E_N < 0$), la primera y la segunda banda contienen 16 estados ligados y la tercera banda de energía ligada tan solo tiene 3 estados ligados pues, como sabemos, esto se debe a que la primer banda de energía dispersiva ($E_N > 0$) tiene 13 estados dispersivos. En estos casos, existe un traslape entre estados ligados y dispersivos (como cuando $f_1 = 0$).

Al fijarnos en los estados ligados ($E_N < 0$), la primera y la segunda banda ascienden, pero la tercera banda de energía ligada desciende y, como se aprecia, son procesos *lentos*. En cambio, si observamos los estados dispersivos ($E_N > 0$), entonces notamos la formación de *gaps* entre las

bandas de energía dispersiva solo en las bandas de los colores magenta, cyan, azul y rojo pues en la segunda banda en color negro y en la primera banda de color verde no son *claras* las separaciones entre dichas bandas.

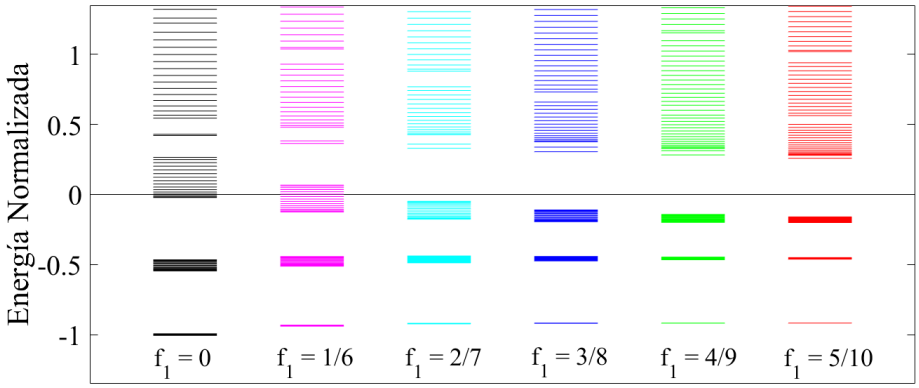

Figura 4.25: Energías normalizadas ante un clúster lineal de $N = 16$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio con $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $V_{1N} = -1.2$, $b_{1N} = 2b_{2N} = 4.0$, $f_V = 10/22$ y $f_2 = 3/5$.

Considere ahora una variación de f_1 mientras fijamos $c_{1N} = 2.0$ como la distancia de separación entre los átomos de cada molécula diatómica, en otras palabras, solo vamos a variar el ancho del primer átomo de dichas moléculas dado por el parámetro b_{1N}. Como veremos a continuación, aparentemente las bandas de energía se disponen de una manera complicada si observamos por separado a los estados ligados de los estados dispersivos. Sin embargo, su comportamiento cobra sentido observándose a las bandas de energía ligadas junto con las bandas de energía dispersiva. Véase *Figura 4.26*.

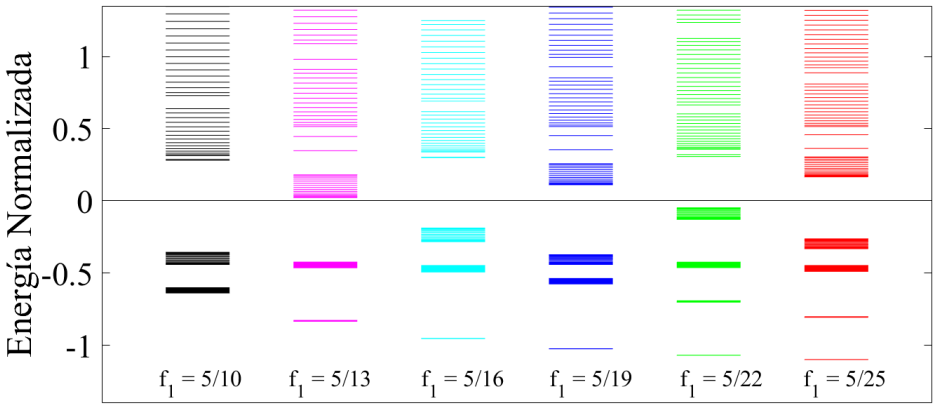

Figura 4.26: Energías normalizadas ante un clúster lineal de $N = 16$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio con $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $V_{1N} = -1.2$, $b_{2N} = c_{1N} = 2.0$, $f_V = 10/22$ y $f_2 = 3/5$.

La parte inferior de la *Figura 4.26* muestra diferentes números de bandas de energía ligada ($E_N < 0$) conforme se disminuye la fracción de llenado, en particular, es claro que hay un par de bandas en color negro y un par en color magenta, tres bandas en color cyan y tres en color azul y, cuatro bandas en color verde y cuatro en color rojo. Estas bandas de energía contienen 16 estados ligados cada una.

Note ahora que las bandas de energía ligada descienden al mismo tiempo que se degeneran ya que las bandas se compactan. Más aún, las primeras dos bandas de energía ligada están cercanas entre sí en $f_1 = 5/10$, pero de $f_1 = 5/15$ hasta $f_1 = 5/19$ se van alejando una de la otra y vuelven a acercarse entre sí cuando $f_1 = 5/22$.

En las bandas de energía dispersiva ($E_N > 0$) de la parte superior de la *Figura 4.26* podemos observar uno o dos *gaps* entre dichas bandas. Note que en el primer *gap* encontramos dos estados dispersivos entre las primeras dos bandas de energía dispersiva en colores magenta, azul y rojo; pero están distanciados del resto. Además, las primeras bandas de energía dispersiva tienen 16 o 17 estados dispersivos, en particular, la de color negro tiene 17, la de color magenta tiene 16, la de color cyan tiene 17 y así sucesivamente hasta llegar a la primera banda en color rojo con 16 estados dispersivos. Esto es debido al intercambio de un estado entre las primeras dos bandas de energía dispersiva.

Por otro lado, fijándonos en los estados de la primera banda de energía dispersiva. En $f_1 = 5/10$ tenemos 17 estados, pero en $f_1 = 5/13$ solo tenemos 16 estados. Puesto que en la transición de $f_1 = 5/10$ hasta $f_1 = 5/13$ se está *cediendo* un estado dispersivo a la segunda banda de energía dispersiva. Este proceso se lleva a cabo como indica la siguiente lista, el cual se repite cada cierto valor de la fracción de llenado.

1. En $f_1 = 5/10$, la primera banda tiene 17 estados dispersivos.
2. La formación de un segundo *gap* y distinción de una segunda banda con 17 estados dispersivos
3. El estado dispersivo con menor energia de la segunda banda desciende más rápido y se desprende de ella.
4. El estado dispersivo de la primera banda con mayor energía desciende muy lentamente y se desprende de la misma.
5. El estado dispersivo con mayor energía de la segunda banda se desprende de ella de manera parecida al paso anterior.
6. En $f_1 = 5/13$, los estados dispersivos en el primer *gap* entre las primeras bandas se trasladan hacia la parte inferior de la segunda banda y el estado dispersivo ubicado en el segundo *gap* emigra a la parte inferior de la tercera banda.
7. La primera banda ahora tiene un número de estados menor a sus 16 estados iniciales.
8. El estado dispersivo del quinto paso ahora ya se sitúa en la parte inferior de la tercera banda.
9. No queda rastro de la primera banda inicial, la segunda banda ahora es la primera banda de energía con 17 estados dispersivos y dos de ellos están distanciados del resto.
10. Los estados dispersivos de los pasos tres y cuatro se sitúan en la parte inferior de la recientemente nombrada primera banda de energía dispersiva.
11. En $f_1 = 5/16$, regresamos al paso uno con distinta fracción de llenado.

Nota: En cada uno de los pasos enlistados anteriormente, los niveles normalizados de energía dispersiva descienden.

Así, se repite el proceso de tal manera que las bandas de energía dispersiva ($E_N > 0$) encontradas cerca de la frontera ($E_N = 0$) conservan 16 estados aunque van descendiendo hasta convertirse en bandas de energía ligada ($E_N < 0$) y, por esta razón, el número de bandas de energía ligada aumenta al disminuir la fracción de llenado.

De manera análoga a lo realizado anteriormente, al modificar el valor de f_2 considerando a $b_{2N} = 2.0$ como un valor fijo para el ancho del segundo átomo de cada molécula diatómica y el comportamiento de las energías normalizadas se muestra en la *Figura 4.27* aunque, por otra

parte, también se puede modificar el valor de f_2 ahora considerando que $c_{2N} = 3.0$ es un valor fijo para la distancia de separación entre las moléculas diatómicas y el comportamiento de las energías normalizadas obtenidas se muestran en la *Figura 4.28*.

En la *Figura 4.27* cabe destacar la existencia de un par de estados ligados ($E_N < 0$) separados de las bandas de energía cuando $f_2 = 0$ pues el primer estado parece marcar pauta para saber en dónde se ubicará la primera banda degenerada de energía ligada si aumentamos la fracción de llenado, mientras que el segundo estado marca la pauta de la tendencia de la ubicación del primer nivel con menor energía de la tercera banda de energía ligada. Véase *Figura 4.27*.

En el caso de los estados ligados de la *Figura 4.28*, note que hay tres bandas de energía ligada ($E_N < 0$) con 16 estados cada una cuando $f_2 = 15/25$ y, al terminar la disminución de la fracción de llenado, hay cinco bandas de energía ligada ($E_N < 0$) con 16 estados cada una cuando $f_2 = 15/55$. Véase *Figura 4.28*.

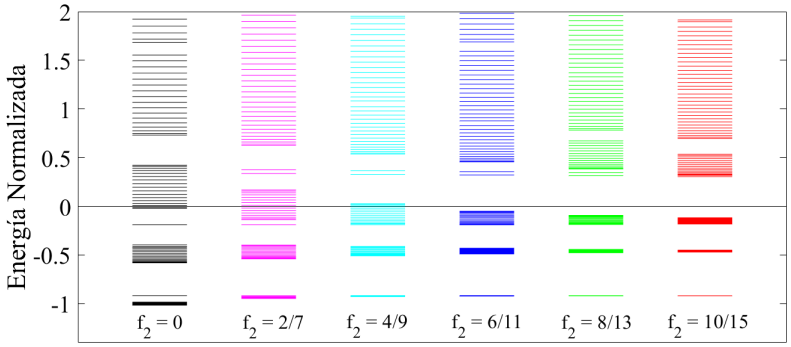

Figura 4.27: Energías normalizadas ante un clúster lineal de $N = 16$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio con $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $V_{1N} = -1.2$, $b_{1N} = 2b_{2N} = 4.0$, $f_V = 10/22$ y $f_1 = 1/3$.

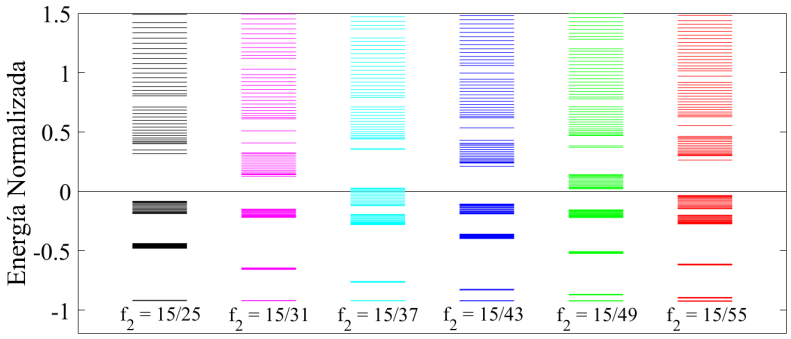

Figura 4.28: Energías normalizadas ante un clúster lineal de $N = 16$ moléculas diatómicas idénticas distribuidas uniformemente en el espacio con $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, $V_{1N} = -1.2$, $b_{1N} = 4.0$, $c_{2N} = 3.0$ $f_V = 10/22$ y $f_1 = 1/3$.

4.4. Comparación de un átomo con una serie infinita de pozos

Para finalizar el capítulo, vamos a comparar los niveles de energía ante un átomo con una serie infinita de pozos (cristal unidimensional) sin barreras infinitas de potencial en los extremos donde utilizaremos cada uno de los modelos vistos anteriormente.

En el primer modelo obtuvimos las fórmulas analíticas (1.6) para $E_N < 0$ y (1.10) para $E_N > 0$ ante un átomo modelado por un pozo de potencial tipo delta de Dirac con barreras infinitas de potencial en los extremos del átomo como se ilustra en la *Figura 1.1*, mientras que para el vector de Bloch K del primer modelo, se obtuvieron las fórmulas analíticas (3.14) para $E_N < 0$ y (3.16) para $E_N > 0$.

A la izquierda de la *Figura 4.29* se muestra el nivel de energía ligado y los primeros dos niveles de energía dispersivos para un átomo del primer modelo (pozo tipo delta de Dirac) y, por otro lado, las regiones en color azul a la derecha de la *Figura 4.29* son las bandas de energía de una serie infinita de pozos de potencial tipo delta de Dirac sin barreras infinitas de potencial en los extremos. La curva en color gris a la derecha de la *Figura 4.29* es K_N/π contra E_N.

Desde la *Figura 4.29* podemos ver el salto desde los niveles discretos de un simple pozo de potencial tipo delta de Dirac hasta el caso de un potencial cristalio periódico fomado por pozos tipo delta de Dirac.

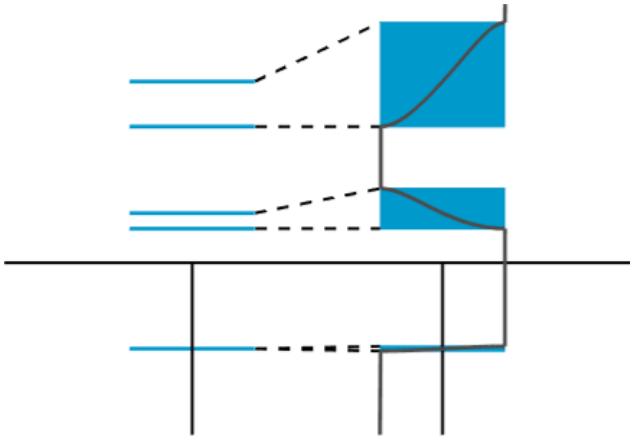

Figura 4.29: Gráfica de los niveles de energía de un átomo y las bandas de energía de una serie infinita de pozos de potencial tipo delta de Dirac cuyos parámetros son $b_N = a_{1N} = a_{2N} = 5.0$ y $a_{0N} = 2.0$.

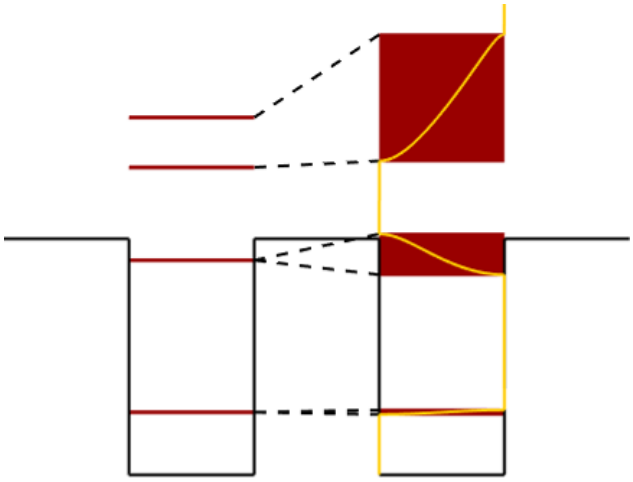

Figura 4.30: Gráfica de los niveles de energía de un átomo y las bandas de energía de una serie infinita de pozos de potencial finito cuyos parámetros son $V_N = -1.0$, $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$ y $f = 1/2$.

En el segundo modelo obtuvimos las fórmulas analíticas (2.8) para $E_N < 0$ y (2.13) para $E_N > 0$ de un átomo modelado por un pozo de potencial finito con barreras infinitas de potencial en los extremos del átomo como se ilustra en la *Figura 2.1*, mientras que para el vector de Bloch K del segundo modelo, se obtuvieron las fórmulas analíticas (3.23) para $E_N < 0$ y (3.25) para $E_N > 0$.

A la izquierda de la *Figura 4.30* se muestran los dos niveles de energía ligados y los primeros dos niveles de energía dispersivos de un átomo del segundo modelo y, por otro lado, las regiones en color rojo a la derecha de la *Figura 4.30* son las bandas de energía de una serie infinita de pozos de potencial finito sin barreras infinitas de potencial en los extremos. La curva en color amarillo a la derecha de la *Figura 4.30* es K_N contra E_N.

De la *Figura 4.30* se observa que para el modelo de pozos rectangulares, la primer banda ligada queda bien confinada alrededor del primer nivel de un pozo, pero no sucede lo mismo con el segundo nivel ligado, el cual queda un poco más extendido, de manera semejante a las bandas dispersivas.

Notemos que el comportamiento de las bandas de energía obtenidas en las *Figuras 4.29 y 4.30* ya se anunciaban desde las *Figuras 4.1 y 4.2* en la *subsección 4.2.1* del primer modelo y desde las *Figuras 4.17 y 4.18* en la *subsección 4.3.1* del segundo modelo.

Como parte de los resultados, también podemos obtener la *Figura 3.1*, una gráfica similar encontrada en la referencia [8] para las bandas de energía de una serie infinita de pozos de potencial finito donde el ancho de los pozos y la separación entre ellos son tales que $c_N = 0.1b_N = 0.5$.

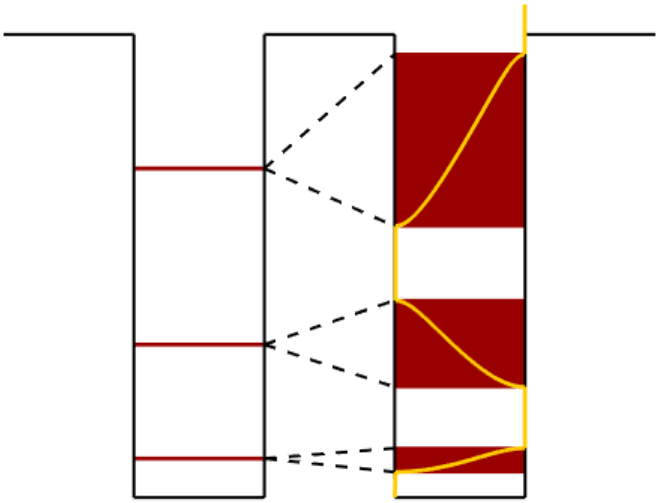

Figura 4.31: Gráfica de los niveles de energía de un átomo y las bandas de energía de una serie infinita de pozos de potencial finito cuyos parámetros son $V_N = -3.1$, $a_{1N} = a_{2N} = 5.0$ y $f = 1/11$. La curva en color amarillo a la derecha es K_N contra E_N.

Capítulo 5

Densidades de probabilidad para una cadena lineal

En este último capítulo, consideramos los estados ligados ($E < 0$) y responderemos las siguientes preguntas: *¿dónde es más probable encontrar al electrón?* y *¿dónde no existe probabilidad de encontrarlo?*, cuando éste se mueve a través de una cadena lineal de átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio. Para ello, vamos a analizar las densidades de probabilidad, $|\psi(x)|^2$, obtenidas a partir del primer modelo visto en los capítulos anteriores usando potenciales tipo delta de Dirac.

Dada la forma de la función de onda $\psi(x)$ de los estados ligados, como se observa en la *Figura 4.3* o en el *Apéndice C*, se tiene que la máxima probabilidad de hallar al electrón debe encontrarse en las posiciones de los átomos en la cadena lineal y estudiaremos cómo es este comportamiento. A continuación notaremos que este patrón depende del número de átomos y del nivel de energía que queramos analizar.

5.1. Cadena lineal de N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio

Supongamos que cada uno de los átomos tiene la misma profundidad $a_{0N} = 2.0$ con las siguientes distancias $b_N = a_{1N} = a_{2N} = 5.0$. Note que estos parámetros fueron propuestos para calcular las energías mecánicas normalizadas de un electrón ante N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio y generar las *Figuras 4.1* y *4.2* de la *Subsección 4.2.1* en el *Capítulo 4*.

Consideramos el $n-$ésimo nivel de energia y dado un número N de átomos idénticos de la cadena lineal, sean $P_n, Q_n \subset \mathbb{N}^2$ el conjunto de los átomos con la mayor probabilidad de hallar al electrón y el conjunto de los átomos en los que no existe probabilidad de encontrarlo en el $n-$ésimo nivel de energia, respectivamente. Estos conjuntos pueden visualizarse en un *grafo simple* con algún número de vértices unidos por cierta cantidad de aristas, donde los vértices del grafo son de la siguiente forma:

$$A^n_{k,m} \equiv (\, N \,,\, N_{max} \,) \quad \text{y} \quad a^n_{r,m} \equiv (\, N \,,\, N_{null} \,) \tag{5.1}$$

siendo $m, k, r \in \mathbb{N}$ donde en principio m es arbitrario, k representa al número de elemento en el conjunto P_n, mientras que r representa al número de elemento en el conjunto Q_n y son tales que $N = N(m)$ es el número de átomos idénticos numerados de izquierda a derecha en la cadena lineal, $N_{max} = N_{max}(m)$ es el número del átomo con la mayor probabilidad y $N_{null} = N_{null}(m)$ es el número del átomo en el que no existe probabilidad de hallar al electrón en el $n-$ésimo nivel de

energia ligada. Asimismo, note que $A^n_{k,m} \in P_n$ y $a^n_{r,m} \in Q_n$, pero cabe aclarar que sus superíndices hacen referencia a uno u otro nivel de energía ligada de cada conjunto.

Vamos a describir este comportamiento para los primeros tres niveles de energía ($n = 1, 2, 3$) dibujando su *grafo simple* y la grafica generada a partir de los conjuntos P_n y Q_n específicos de cada nivel de energía.

5.1.1. Estado base

Demos inicio con el estado base, es decir, considere $n = 1$. En este caso, se tiene que:

$$P_1 = \{ A^1_{1,m} , A^1_{2,m} , A^1_{3,m} \}_{m\in\mathbb{N}} \tag{5.2}$$

donde

$$A^1_{1,m} = (2m - 1,\, m), \tag{5.3}$$

$$A^1_{2,m} = (2m,\, m) \tag{5.4}$$

y

$$A^1_{3,m} = (2m,\, m + 1), \tag{5.5}$$

esto es, el conjunto P_1 le asigna tres puntos a cada número natural, entonces lo representaremos por un grafo de tres vértices unidos por dos aristas. Véase *Figura 5.1.*

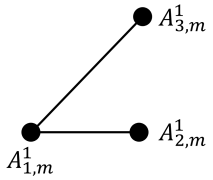

Figura 5.1: Grafo simple representando a los átomos con las máximas probabilidades de hallar al electrón en el estado base o primer nivel de energía ligada.

Sin embargo, Q_1 no tiene representación porque éste es el conjunto vacío, ya que, siempre hay probabilidad de encontrar al electrón en el estado base de la cadena lineal.

La *Figura 5.2* muestra explícitamente a los átomos con las máximas probabilidades de hallar al electrón en el estado base o primer nivel de energía ligada y dicha gráfica es contruida a partir del grafo simple mostrado en la *Figura 5.1.* Además, observe que para cada $m \in \mathbb{N}$, los tres puntos de la forma $A^1_{1,m}$, $A^1_{2,m}$ y $A^1_{3,m}$ siempre se encuentran a la misma distancia entre ellos.

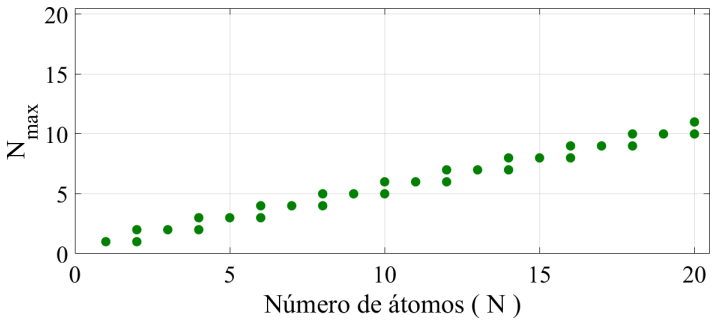

Figura 5.2: Gráfica de los átomos con las máximas probabilidades de hallar al electrón en el estado base o primer nivel de energía ligada.

5.1.2. Densidades de probabilidad del estado base para algunas cadenas lineales

En la *Figura 5.2*, note que si N es impar, entonces la mayor probabilidad de hallar al electrón en el primer nivel de energía ligada siempre se encuentra en un único átomo de la cadena lineal. Sin embargo, cuando N es par, esto implica que la mayor probabilidad de encontrarlo en el estado base es compartida simultáneamente por dos de los átomos de la cadena lineal.

Pongamos ahora algunos ejemplos para observar qué representan los grafos de la subsección anterior mostrando las densidades de probabilidad del estado base para las cadenas lineales de $N = 4, 5, \ldots, 9$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio.

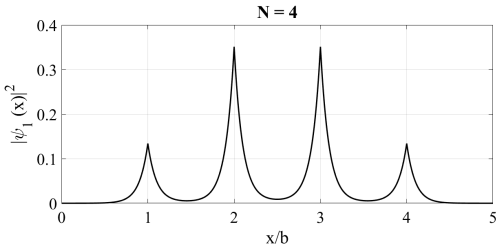

Figura 5.3: Densidad de probabilidad de una cadena lineal de $N = 4$ átomos idénticos.

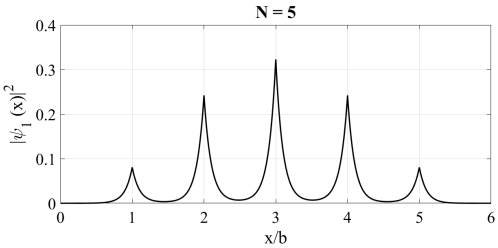

Figura 5.4: Densidad de probabilidad de una cadena lineal de $N = 5$ átomos idénticos.

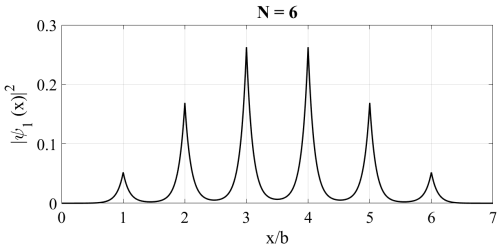

Figura 5.5: Densidad de probabilidad de una cadena lineal de $N = 6$ átomos idénticos.

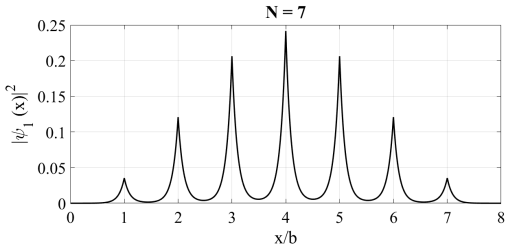

Figura 5.6: Densidad de probabilidad de una cadena lineal de $N = 7$ átomos idénticos.

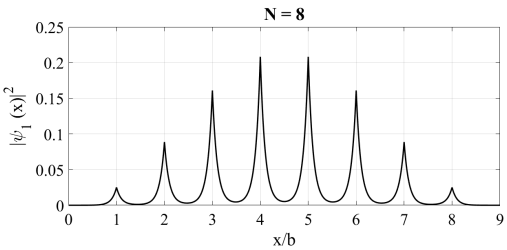

Figura 5.7: Densidad de probabilidad de una cadena lineal de $N = 8$ átomos idénticos.

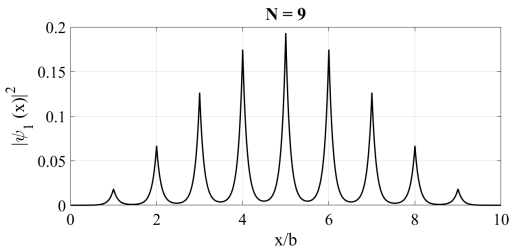

Figura 5.8: Densidad de probabilidad de una cadena lineal de $N = 9$ átomos idénticos.

5.1.3. Segundo nivel de energía ligada

Seguimos para $n = 2$, el segundo nivel de energía ligada. Aquí tenemos que:

$$P_2 = \{ A^2_{1,m}, A^2_{3,m}, A^2_{5,m}, A^2_{7,m}, A^2_{8,m} \}_{m\in\mathbb{N}} \cup \{ A^2_{2,m}, A^2_{4,m}, A^2_{6,m}, A^2_{9,m}, A^2_{10,m} \}_{m\in\mathbb{N}} \tag{5.6}$$

donde

$$A^2_{1,m} = (4m - 2,\, m), \tag{5.7}$$

$$A^2_{2,m} = (4m - 2,\, 3m - 1), \tag{5.8}$$

$$A^2_{3,m} = (4m - 1,\, m), \tag{5.9}$$

$$A^2_{4,m} = (4m - 1,\, 3m), \tag{5.10}$$

$$A^2_{5,m} = (4m,\, m), \tag{5.11}$$

$$A^2_{6,m} = (4m,\, 3m + 1), \tag{5.12}$$

$$A^2_{7,m} = (4m + 1,\, m), \tag{5.13}$$

$$A^2_{8,m} = (4m + 1,\, m + 1), \tag{5.14}$$

$$A^2_{9,m} = (4m + 1,\, 3m + 1) \tag{5.15}$$

y

$$A^2_{10,m} = (4m + 1,\, 3m + 2). \tag{5.16}$$

Por otro lado, también se tiene que:

$$Q_2 = \{\, a^2_{1,m}\ a^2_{2,m}\}_{m\in\mathbb{N}} \tag{5.17}$$

donde

$$a^2_{1,m} = (4m - 1,\, 2m) \tag{5.18}$$

y

$$a^2_{2,m} = (4m + 1,\, 2m + 1) \tag{5.19}$$

El conjunto P_2 le asigna diez puntos a cada número natural y el conjunto Q_2 le asigna dos puntos a cada número natural. Esto implica que podemos representarlos por un grafo de doce vértices unidos por doce aristas. Véase *Figura 5.9*.

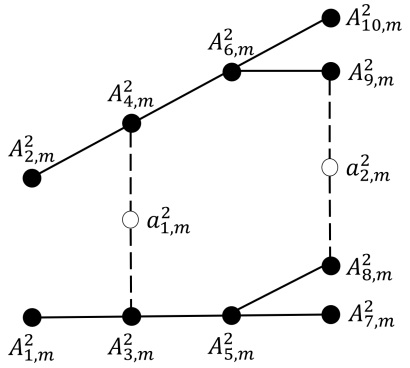

Figura 5.9: Grafo simple representando a los átomos con las máximas probabilidades y las nulas probabilidades de hallar al electrón en el segundo nivel de energía ligada.

No obstante, se han elegido dos tipos de aristas, una continua y otra punteada, porque los puntos unidos por la línea continua siempre permanecen a la misma distancia uno del otro y los puntos unidos por la línea punteada significa que estos se separan unos de otros.

La *Figura 5.10* es construida a partir del grafo simple la *Figura 5.9* y muestra de manera explícita a los átomos con las máximas probabilidades y las nulas probabilidades de hallar al electrón en el segundo nivel de energía ligada; donde se aprecia cómo los puntos unidos por la línea punteada se separan unos de otros conforme aumentamos el número de átomos a la cadena lineal, pero los puntos unidos por la línea continua siempre permanecen a las mismas distancias unos de otros al añadir átomos a la cadena lineal.

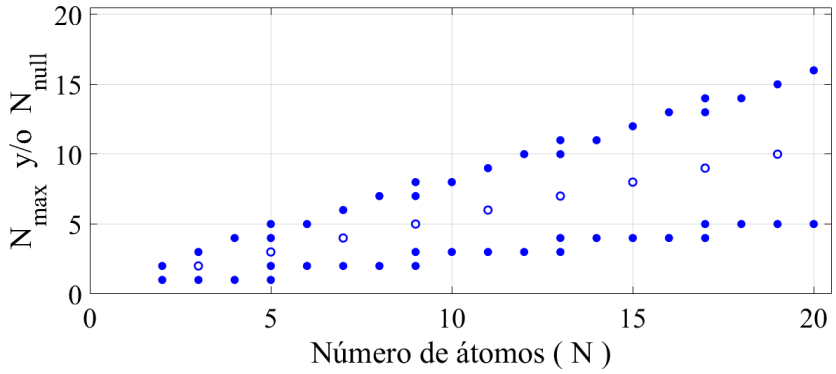

Figura 5.10: Gráfica de los átomos con las máximas probabilidades y las nulas probabilidades de hallar al electrón en el segundo nivel de energía ligada.

5.1.4. Densidades de probabilidad para algunas cadenas lineales en el segundo nivel de energía

Pongamos ahora algunos ejemplos para observar qué representan los grafos de la sección anterior mostrando las densidades de probabilidad del segundo nivel de energía para las cadenas lineales de $N = 4, 5, \ldots, 9$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio.

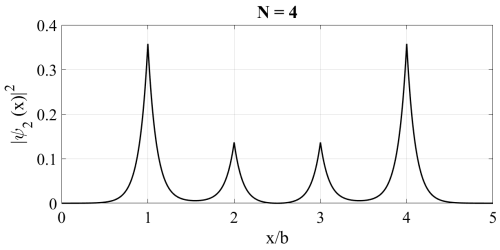

Figura 5.11: Densidad de probabilidad de una cadena lineal de $N = 4$ átomos idénticos.

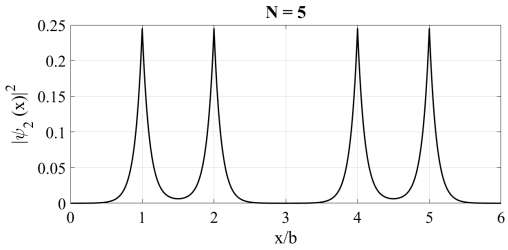

Figura 5.12: Densidad de probabilidad de una cadena lineal de $N = 5$ átomos idénticos.

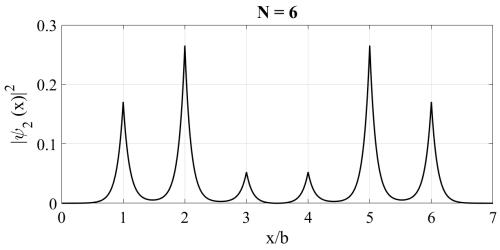

Figura 5.13: Densidad de probabilidad de una cadena lineal de $N = 6$ átomos idénticos.

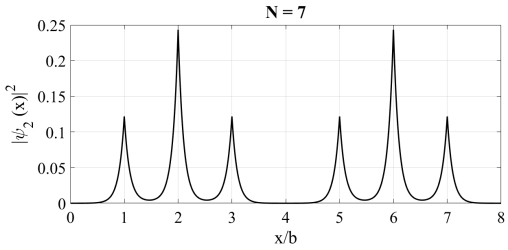

Figura 5.14: Densidad de probabilidad de una cadena lineal de $N = 7$ átomos idénticos.

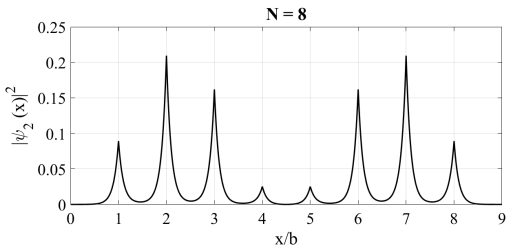

Figura 5.15: Densidad de probabilidad de una cadena lineal de $N = 8$ átomos idénticos.

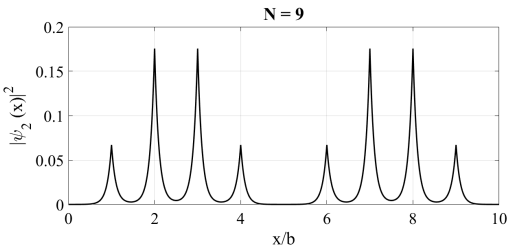

Figura 5.16: Densidad de probabilidad de una cadena lineal de $N = 9$ átomos idénticos.

5.1.5. Tercer nivel de energía ligada

Finalmente para $n = 3$, el tercer nivel de energía ligada, se tiene que:

$$\begin{aligned} P_2 =& \{ A^2_{2,m}, A^2_{4,m}, A^2_{7,m}, A^2_{10,m}, A^2_{11,m} \}_{m\in\mathbb{N}} \cup \{ A^2_{1,m}, A^2_{5,m}, A^2_{9,m}, A^2_{12,m}, A^2_{13,m} \}_{m\in\mathbb{N}} \\ &\cup \{ A^2_{3,m}, A^2_{6,m}, A^2_{8,m}, A^2_{14,m}, A^2_{15,m} \}_{m\in\mathbb{N}} \end{aligned} \tag{5.20}$$

donde

$$A^3_{1,m} = (6m-3,\ 3m-1), \tag{5.21}$$

$$A^3_{2,m} = (6m-2,\ m), \tag{5.22}$$

$$A^3_{3,m} = (6m-2,\ 5m-1), \tag{5.23}$$

$$A^3_{4,m} = (6m-1,\ m), \tag{5.24}$$

$$A^3_{5,m} = (6m-1,\ 3m), \tag{5.25}$$

$$A^3_{6,m} = (6m-1,\ 5m), \tag{5.26}$$

$$A^3_{7,m} = (6m,\ m), \tag{5.27}$$

$$A^3_{8,m} = (6m,\ 5m+1), \tag{5.28}$$

$$A^3_{9,m} = (6m+1,\ 3m+1), \tag{5.29}$$

$$A^3_{10,m} = (6m+2,\ m), \tag{5.30}$$

$$A^3_{11,m} = (6m+2,\ m+1), \tag{5.31}$$

$$A^3_{12,m} = (6m+2,\ 3m+1), \tag{5.32}$$

$$A^3_{13,m} = (6m+2,\ 3m+2), \tag{5.33}$$

$$A^3_{14,m} = (6m+2,\ 5m+2) \tag{5.34}$$

y

$$A^3_{15,m} = (6m+2,\ 5m+3) \tag{5.35}$$

Por otro lado, además tenemos que:

$$Q_2 = \{ a^3_{1,m}, a^3_{2,m}, a^3_{3,m}, a^3_{4,m} \}_{m\in\mathbb{N}} \tag{5.36}$$

donde

$$a^3_{1,m} = (6m-1,\ 2m), \tag{5.37}$$

$$a^3_{2,m} = (6m-1,\ 4m), \tag{5.38}$$

$$a^3_{3,m} = (6m+2,\, 2m+1) \tag{5.39}$$

y

$$a^3_{4,m} = (6m+2,\, 4m+2) \tag{5.40}$$

La *Figura 5.18* se contruye con el grafo simple de la *Figura 5.17*, este último muestra de manera explícita a los átomos con las máximas probabilidades y las nulas probabilidades de hallar al electrón en el tercer nivel de energía ligada. Observe que presenta un comportamiento más complicado que para los dos primeros niveles de energía ligada.

E inferimos que los átomos en los que no existe probabilidad de hallar al electrón se debe a la simetría que existe en la cadena lineal de N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio.

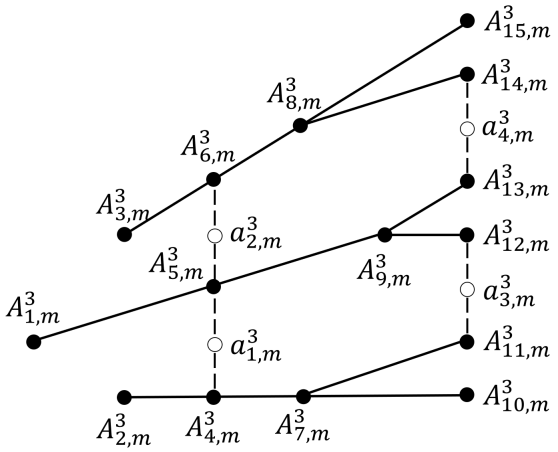

Figura 5.17: Grafo simple representando a los átomos con las máximas probabilidades y las nulas probabilidades de hallar al electrón en el tercer nivel de energía ligada.

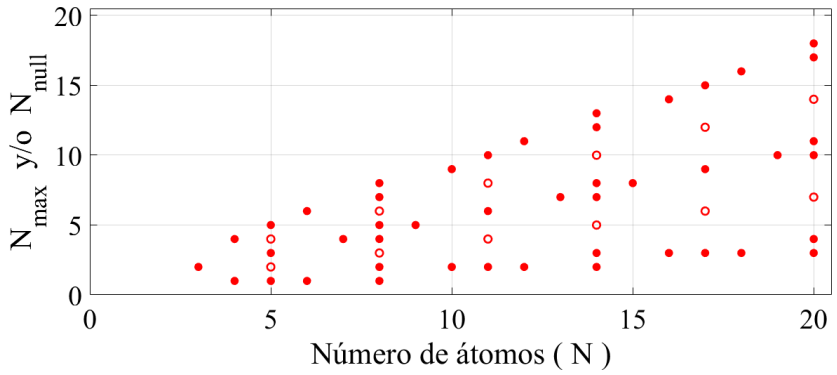

Figura 5.18: Gráfica de los átomos con las máximas probabilidades y las nulas probabilidades de hallar al electrón en el tercer nivel de energía ligada.

5.1.6. Otros niveles de energía ligada

Un estudio semejante puede realizarse para los siguientes niveles de energía ligada y cada uno de ellos presenta un patrón particular generalizable a cualquier número de átomos idénticos, pero con

el inconveniente de que a mayor nivel de energía ligada es quizá mayor el grado de dificultad de sus comportamientos. Por ejemplo, enseguida se encuentran a las *Figuras 5.19* y *5.20* que muestran de manera explícita a los puntos de la forma (5.1) para el cuarto y el quinto nivel de energía ligada, respectivamente.

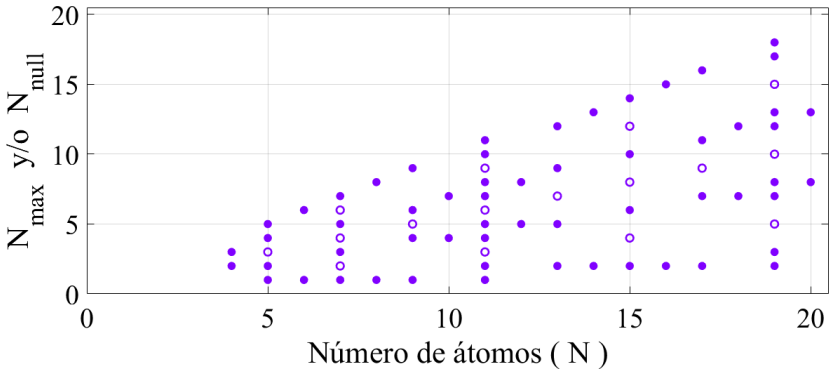

Figura 5.19: Gráfica de los átomos con las máximas probabilidades y las nulas probabilidades de hallar al electrón en el cuarto nivel de energía ligada.

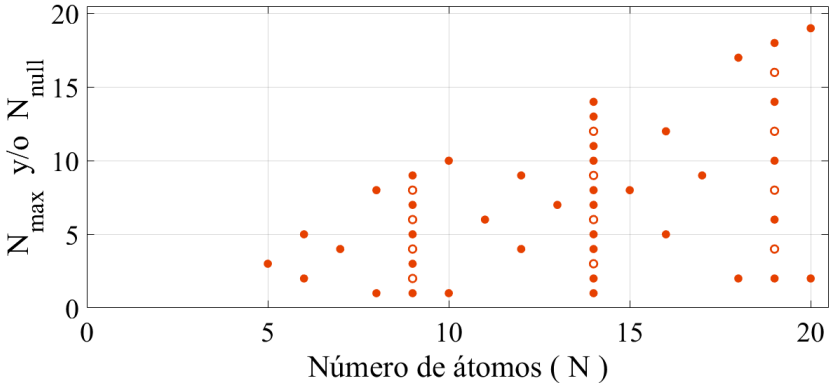

Figura 5.20: Gráfica de los átomos con las máximas probabilidades y las nulas probabilidades de hallar al electrón en el quinto nivel de energía ligada.

5.2. Breve análisis para una cadena lineal de $N = 5$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio

En el caso particular de la cadena lineal de cuatro átomos idénticos obtenemos cuatro niveles de energías ligadas. En las *Figuras C.2* y *C.8* del *Apéndice C*, se observa que los átomos intermedios comparten la mayor probabilidad de hallar al electrón cuando consideramos el estado base y el cuarto nivel de energía ligada; pero en las *Figuras C.4* y *C.6* también del *Apéndice C*, notamos ahora que los átomos extremos comparten la mayor probabilidad de hallar al electrón cuando se considera el segundo y el tercer niveles de energía ligada.

Note que la información del párrafo anterior está contenida en la *Figura 5.2* para el estado base y en las *Figuras 5.10*, *5.18* y *5.19* para los respectivos segundo, tercer y cuarto nivel de energía ligada.

Por otro lado, estudiaremos brevemente a una cadena lineal de $N = 5$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio pues este es uno de los sistemas que presentan un comporminto muy interesante y a continuación se han graficado las densidades de probabilidad para cada estado ligado ante esta cadena lineal.

Aquí tenemos que la mayor probabilidad de hallar al electrón está en el tercer átomo para $n = 1$ o el estado base (*Figura 5.21*); en los átomos uno, dos, cuatro y cinco para $n = 2$ (*Figura 5.22*); en los átomos uno, tres y cinco para $n = 3$ (*Figura 5.23*); en los átomos uno, dos, cuatro y cinco para $n = 4$ (*Figura 5.24*); y en el tercer átomo para $n = 5$ (*Figura 5.25*). Aunque, tenemos que no existe probabilidad de hallar al electrón en el tercer átomo para $n = 2$ (*Figura 5.22*), en los átomos dos y cuatro para $n = 3$ (*Figura 5.23*) y en el tercer átomo para $n = 4$ (*Figura 5.24*).

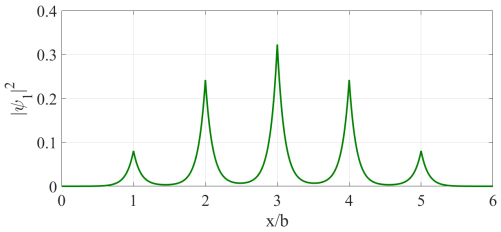

Figura 5.21: Estado base de energía ligada.

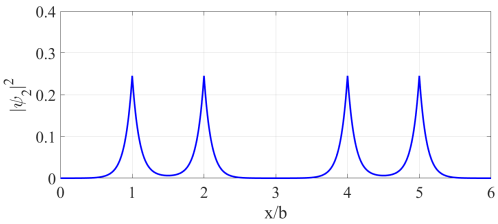

Figura 5.22: Segundo nivel de energía ligada.

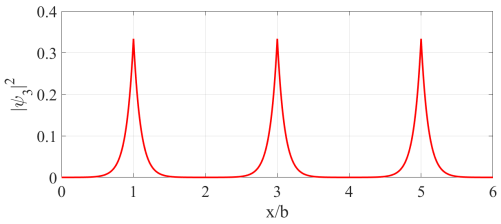

Figura 5.23: Tercer nivel de energía ligada.

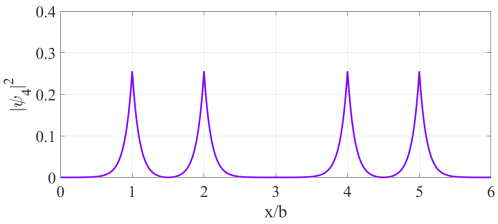

Figura 5.24: Cuarto nivel de energía ligada.

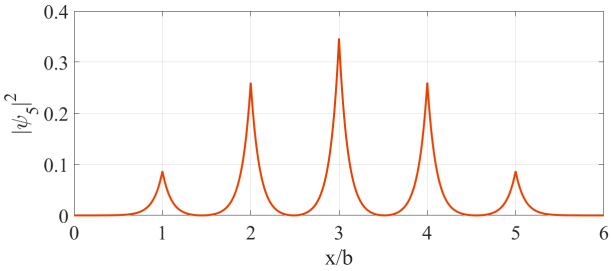

Figura 5.25: Quinto nivel de energía ligada.

Observe también la simetría presente en las densidades de probabilidad para esta cadena lineal donde sus *nodos* son en realidad los puntos de la forma $a^n_{r,m} = (N, N_{null}) \in Q_n$. Asimismo, es claro que si solo nos interesa saber en qué átomos vamos a tener la mayor probabilidad de hallar al electrón o bien en qué átomos no tendríamos probabilidad de encontrar al electrón, entonces solo debemos usar las ecuaciones de la *Sección 5.1* sin necesidad de graficar sus densidades de probabilidad o graficar explícitamente a los átomos con las máximas probabilidades y las nulas probabilidades de hallar al electrón.

En el caso de la cadena lineal de cinco átomos idénticos, solo debemos encontrar el número natural m en sus respectivos puntos de la forma (5.1) tales que $N(m) = 5$ para cada uno de los estados ligados. Por ejemplo, en el estado base hay tres posibles puntos, pero solamente la ecuación (5.3) cumple que si $m = 3$, entonces $N(3) = 5$ y $A^1_{1,3} = (5, 3)$, este punto nos dice que la mayor probabilidad de hallar al electrón en el estado base está en el tercer átomo de la cadena lineal de cinco átomos idénticos; en el segundo nivel de energía ligada hay doce posibles puntos, pero solo las ecuaciones (5.13) a la (5.16) y la (5.19) cumplen que si $m = 1$, entonces $N(1) = 5$ y $A^2_{7,1} = (5, 1)$, $A^2_{8,1} = (5, 2)$, $A^2_{9,1} = (5, 4)$, $A^2_{10,1} = (5, 5)$ junto con $a^2_{2,1} = (5, 3)$ donde la coordenada vertical de los puntos A corresponden a los átomos con la mayor probabilidad de hallar al electrón y la coordenada vertical del punto a significa que en el tercer átomo de la cadena lineal no existe probabilidad de hallar al electrón en el segundo nivel de energía ligada. Así sucesivamente para los demás estados ligados.

5.3. Cadena lineal de N átomos diferentes distribuidos aleatoriamente en el espacio

En esta sección, supongamos que las intensidades de los potenciales atómicos son distintos, varían en un intervalo determinado por $a_{0N} \in [2 - \alpha_{1N}\,,\, 2 + \alpha_{2N}]$ con $\alpha_{1N}, \alpha_{2N} \in \mathbb{R}_+$ y están distribuidos aleatoriamente en el espacio, pero uniformemente en energía. Las cantidades α_{1N} y α_{2N} representan un porcentaje mínimo de 2 y aquí también pondremos a las distancias $b_N = a_{1N} = a_{2N} = 5.0$, las cuales fueron propuestas para calcular las energías normalizadas ante $N = 32$ átomos diferentes distribuidos aleatoriamente en el espacio para generar a la *Figura 4.4* de la *Subsección 4.2.2* del *Capítulo 4*.

Para este análisis, ya se sabe de ante mano que la probabilidad de hallar al electrón en el primer nivel de energía ligada o estado base se encontrará al rededor del átomo con la mayor profundidad, en el segundo estado ligado se encontrará en el átomo con la segunda mayor profundidad y, así sucesivamente, hasta el último nivel de energía ligada donde la probabilidad de encontrar al electrón estará alrededor del átomo menos profundo de la cadena lineal. Este comportamiento puede verse en las *Figuras 5.26* y *5.27*.

Considere ahora una cadena lineal de $N = 5$ átomos diferentes distribuidos aleatoriamente en el espacio donde sus potenciales atómicos varían en el intervalo dado por $a_{0N} \in [1\,,\,3]$. Veamos el caso particular de la *Figura 5.26* cuando la repartición de los valores de las profundidades atómicas de a_{0N} son 2.5, 3, 2, 1 y 1.5 para los átomos de la cadena lineal numerados de izquierda a derecha, respectivamente. Note que los átomos con estos potenciales están distribuidos uniformemente en energía, pero aleatoriamente en el espacio.

En este ejemplo, el segundo átomo tiene la mayor profundidad atómica, entonces la probabilidad de hallar al electrón en el estado base estará alrededor del segundo átomo de la cadena lineal; el primer átomo tiene la segunda mayor profundidad atómica, esto implica que la probabilidad de hallar al electrón en el segundo estado ligado se encuentra alrededor del primer átomo y hasta llegar al último nivel de energía ligada donde alrededor del cuarto átomo de la cadena lineal, el cual tiene la menor profundidad atómica, se observa la probabilidad de encontrar al electrón.

Las densidades de probabilidad de los estados ligados para este ejemplo de una cadena lineal de $N = 5$ átomos diferentes distribuidos aleatoriamente en el espacio cuyos potenciales atómicos varían de 1 a 3 se muestran en la *Figura 5.26* de la siguiente sección.

5.4. Transición de una cadena lineal de N átomos diferentes a una cadena lineal de N átomos idénticos

Hemos visto que las máximas probabilidades o las nulas probabilidades de hallar al electrón en una cadena lineal de átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio siguen com-

portamientos complicados conforme nos situamos en un nivel de energía ligada cada vez mayor. Por otro lado, la probabilidad de encontrar al electrón en una cadena lineal de átomos diferentes distribuidos aleatoriamente en el espacio se sitúan alrededor de un átomo y siguen un orden para cada estado ligado, empieza con el átomo más profundo para el estado base y termina con el átomo menos profundo para el último estado ligado.

Surge la siguiente pregunta: *¿Existe un relación entre ambos tipos de cadenas lineales?* y la respuesta es *sí existe* al definir un número de transición $\alpha_N \in \mathbb{R}$ para cada número N de átomos tal que:

- si $\alpha_{1N}+\alpha_{2N} \geq \alpha_N$, entonces la probabilidad de encontrar al electrón tenderá a estar alrededor del átomo más profundo de su nivel de energía correspondiente;
- pero, si $\alpha_{1N} + \alpha_{2N} < \alpha_N$, esto implica que la mayor probabilidad de encontrar al electrón tenderá a comportarse como en alguno los grafos descritos anteriormente.

Sin embargo, tomamos los casos límites donde obtenemos que:

- Si $\alpha_{1N} + \alpha_{2N} \gg \alpha_N$, entonces la probabilidad de hallar al electrón está alrededor del átomo más profundo de su nivel de energía correspondiente como en la *Figura 5.26* descrita en la sección anterior.
- Si $\alpha_{1N} + \alpha_{2N} \ll \alpha_N$, esto implica que tenemos una cadena lineal de átomos idénticos y las probabilidades se comportan como en los grafos que estudiamos en la *Sección 5.1* para los primeros estados ligados.

En la siguiente tabla, se muestran algunos valores para el número de transición de una cadena lineal de pocos átomos, los cuales fueron calculados numérticamente.

Número de átomos (N)	Número de transición (α_N)
3	0.028
4	0.055
5	0.080
6	0.109

Tabla 5.1: Relación del número de transición para los primeros números de átomos.

A continuación se han graficado las densidades de probabilidad de los estados ligados ante una cadena lineal de $N = 5$ átomos. Las *Figuras 5.26*, *5.27* y *5.28* corresponden a cadenas lineales de cinco átomos diferentes distribuidos aleatoriamente en el espacio, mientras que la *Figura 5.29* corresponde a una cadena lineal de cinco átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio.

Note que la longitud del intervalo de variación de los potenciales atómicos en la *Figura 5.26* es igual a 2 y este valor es mucho mayor que el número de transición para una cadena lineal de $N = 5$ átomos. Además, la longitud del intervalo de variación en la *Figura 5.28* es precisamente el número de transición $\alpha_N = 0.080$ y a partir de este número se llega casi inmediatamente a la *Figura 5.29* que muestra el comportamiento de una cadena lineal de átomos idénticos, el cual fue analizado en la *Sección 5.2*.

Últimas observaciones en los casos límites para los primeros valores del número de transición:

- Poniendo $\alpha_{1N} + \alpha_{2N} = 1$, ya es un número muy, muy grande a comparación de α_N.
- Considerando $\alpha_{1N} + \alpha_{2N} = 0.01$, ya es un número muy pequeño a comparación de α_N.

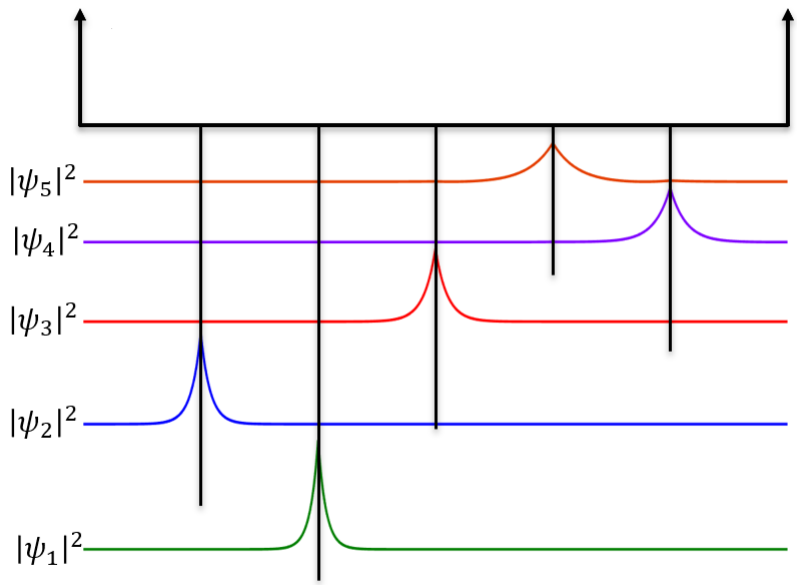

Figura 5.26: Las profundidades de los potenciales atómicos varían en $a_{0N} \in [1, 3]$ y son 2.5,3,2,1 y 1.5, respectivamente. Donde $|\psi_j|^2$ representa la la probabilidad del sistema del estado base ($j = 1$) y demás niveles excitados ($j = 2, 3, 4, 5$).

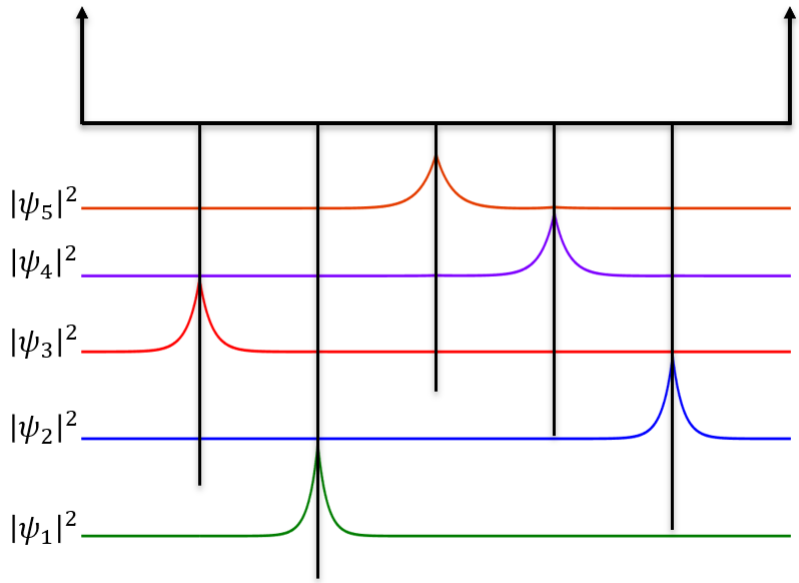

Figura 5.27: Las profundidades de los potenciales atómicos varían en $a_{0N} \in [1.48, 2.52]$ y son 2,2.52,1.48,1.74 y 2.26, respectivamente. Donde $|\psi_j|^2$ representa la la probabilidad del sistema del estado base ($j = 1$) y demás niveles excitados ($j = 2, 3, 4, 5$).

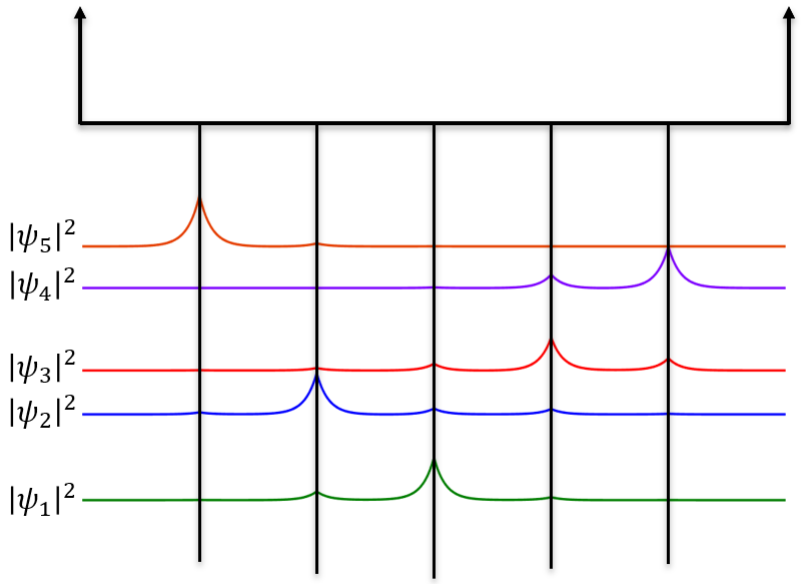

Figura 5.28: Las profundidades de los potenciales atómicos varían en $a_{0N} \in [1.96, 2.04]$ y son 1.96,2.02,2.04,2 y 1.98, respectivamente. Donde $|\psi_j|^2$ representa la la probabilidad del sistema del estado base ($j = 1$) y demás niveles excitados ($j = 2, 3, 4, 5$).

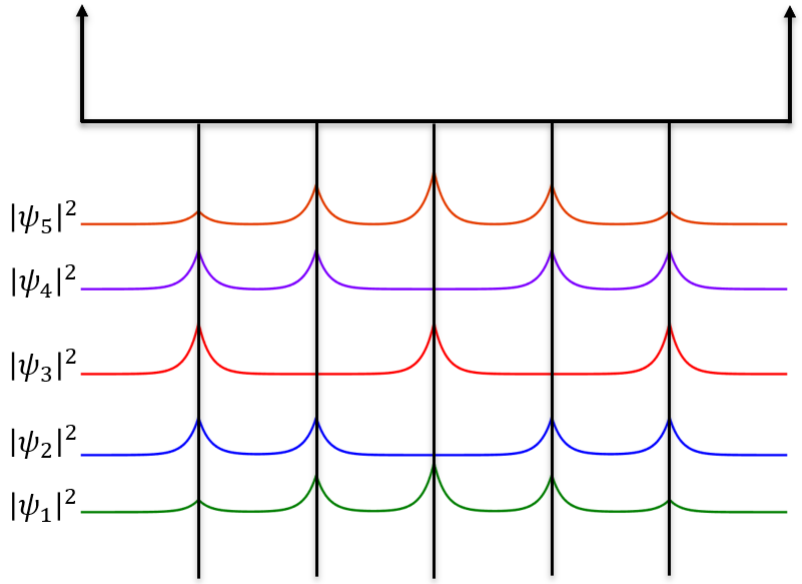

Figura 5.29: Todas las profundidades de los potenciales atómicos son iguales a $a_{0N} = 2$. Donde $|\psi_j|^2$ representa la la probabilidad del sistema del estado base ($j = 1$) y demás niveles excitados ($j = 2, 3, 4, 5$).

Conclusión

En este trabajo se estudió la dinámica de un electrón en un clúster lineal en dos aproximaciones del potencial de interacción electrón-clúster: pozos tipo delta de Dirac y pozos de potencial rectangulares, para ambos modelos se hallaron expresiones analíticas desde las cuales pueden determinarse los niveles de energía electrónicos para el clúster lineal de N átomos. Se verificó la consistencia de las expresiones, reproduciendo los casos límites de un pozo de potencial de paredes infinitas, uno y dos pozos de potencial rectangulares de altura finita, los cuales se consideran generalmente en los libros de Mecánica Cuántica. Respecto a un clúster lineal de N moléculas diatómicas se estableció también un método matricial general para determinar sus niveles de energía.

Con base en nuestros resultados analíticos se aplicó al caso específico de pozos con $N = 1, 2, 4, 8, 16$ y 32 desde ambos modelos de potencial. Se estudió el comportamiento de los niveles de energía con los parámetros de potencial, como profundidad, separación, ancho de los pozos y límites del clúster. Se halló que variaciones pequeñas, de menos de un 5 % respecto a los valores centrales de los parámetros tienen efectos muy visibles en los niveles de energía, se encontraron detalles específicos respecto a los niveles ligados, dispersivos y en su transición de uno a otro tipo. Se determinaron y compararon también los niveles de energía del electrón en una red (con potencial periódico) y su transición desde un clúster hacia la red correspondiente.

Finalmente se consideró una cadena lineal en la cual se introdujo un pequeño desorden en la profundidad de los pozos (tipo delta de Dirac), dicho desorden se distribuyó aleatoriamente entre las posiciones de los pozos, para dicho sistema se estudiaron las variaciones de los niveles de energía y las funciones de onda asociadas. Encontramos en este caso de profundidades aleatoriamente distribuidas que desde la función de probabilidad nos permite localizar al electrón en la estructura, lo que no siempre sucede en el caso no aleatorio.

Para los primeros estados ligados de una cadena lineal de N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio (con potencial de interacción de tipo delta de Dirac), se concluyó la existencia de comportamientos particulares en las máximas probabilidades o las nulas probabilidades de localizar al electrón en la cadena lineal, los cuales fueron representados utilizando grafos. Asimismo, vimos en qué punto ocurre la transición entre los comportamientos de una cadena lineal desordenada y una cadena lineal ordenada.

Apéndice A

Deducción de fórmulas analíticas particulares para dos átomos idénticos

En este apéndice se deducen explícitamente las fórmulas analíticas particulares para hallar las energías ligadas ($E < 0$) ante $N = 2$ átomos idénticos a partir de las fórmulas analíticas generales para una cadena lineal de N átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio. Para ello, sea $N = 2$ y por la ecuación (3.5), se tiene que:

$$\frac{\sin(2K\Lambda)}{\sin(K\Lambda)} = \sum_{s=1}^{1}(-1)^{k+1}\binom{2-k}{k-1}\left[2\cos(K\Lambda)\right]^{2-2k+1} = \binom{1}{0}\cdot 2\cos(K\Lambda) = 2\cos(K\Lambda) \tag{A.1}$$

A.1. Primer modelo

Ahora, sustituyendo la identidad trigonométrica ($A.1$) con $\Lambda = Kb$ en la ecuación analítica general (3.13) para hallar las energías ligadas ante $N = 2$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio. Entonces,

$$\begin{aligned} 0 &= \sinh[k(a_1+a_2-b)]\frac{\sin(Kb)}{\sin(Kb)} + \left\{\frac{a_0}{k}\sinh(ka_1)\sinh(ka_2) - \sinh[k(a_1+a_2)]\right\}\frac{\sin(2Kb)}{\sin(Kb)} \\ &= \sinh[k(a_1+a_2-b)] + \left\{\frac{a_0}{k}\sinh(ka_1)\sinh(ka_2) - \sinh[k(a_1+a_2)]\right\}\cdot 2\cos(Kb), \end{aligned}$$

y por la expresión (3.14), se sigue que:

$$0 = \sinh[k(a_1+a_2-b)] + 2\left\{\frac{a_0}{k}\sinh(ka_1)\sinh(ka_2) - \sinh[k(a_1+a_2)]\right\}\cdot\left[\cosh(kb) - \frac{a_0}{2k}\sinh(kb)\right]$$

Simplificando y agrupando términos semejantes, se obtiene que:

$$\begin{aligned} 0 =& \sinh[k(a_1+a_2-b)] - 2\sinh[k(a_1+a_2)]\cosh(kb) - \left(\frac{a_0}{k}\right)^2\sinh(ka_1)\sinh(ka_2)\sinh(kb) \\ &+ \frac{a_0}{k}\left\{2\sinh(ka_1)\sinh(ka_2)\cosh(kb) + \sinh[k(a_1+a_2)]\sinh(kb)\right\} \end{aligned} \tag{A.2}$$

Ahora, note que:

$$\begin{aligned} &\sinh[k(a_1+a_2-b)] - 2\sinh[k(a_1+a_2)]\cosh(kb) = -\sinh[k(a_1+a_2+b)] \quad \text{y,} \\ &2\sinh(ka_1)\sinh(ka_2)\cosh(kb) + \sinh[k(a_1+a_2)]\sinh(kb) = \sinh(ka_2)\sinh[k(a_1+b)] \\ &+ \sinh(ka_1)\sinh[(k(a_2+b))] \end{aligned} \tag{A.3}$$

Sustituyendo las expresiones $(A.3)$ en $(A.2)$, se obtiene precisamente:

$$\begin{aligned} 0 = &- \sinh[k(a_1+a_2+b)] - \left(\frac{a_0}{k}\right)^2 \sinh(ka_1)\sinh(ka_2)\sinh(kb) \\ &+ \frac{a_0}{k}\left\{\sinh(ka_2)\sinh[k(a_1+b)] + \sinh(ka_1)\sinh[(k(a_2+b))]\right\} \end{aligned} \tag{A.4}$$

La expresión $(A.4)$ es la fórmula analítica (1.16) para hallar las energías ligadas ($E < 0$) ante $N = 2$ átomos idénticos de la *Figura 1.3*.

A.2. Segundo modelo

En el segundo modelo, el cálculo para obtener la ecuación analítica (2.20) a partir de la ecuación analítica general (3.22) es análogo a la primera sección de este apéndice. Sin embargo, aquí solo se muestra que poniendo $a_1 = a_2 = 0$, entonces las ecuaciones (2.20) y (3.22) conducen a la misma ecuación.

Inicialmente, considere la ecuación analítica general (3.22), pongamos $a_1 = a_2 = 0$ y al sustituir la identidad trigonométrica $(A.1)$ con $\Lambda = K(b+c)$ en la ecuación (3.22) para hallar las energías ligadas ante $N = 2$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio, se tiene que:

$$0 = \sinh(-kc)\frac{\sin[K(b+c)]}{\sin[K(b+c)]} - \frac{k}{q}\sin(qb)\frac{\sin[2K(b+c)]}{\sin[K(b+c)]} = \sinh(-kc) - \frac{k}{q}\sin(qb)\cdot 2\cos[K(b+c)]$$

$$\therefore 0 = \sinh(-kc) - \frac{2k}{q}\sin(qb)\cos[K(b+c)] \tag{A.5}$$

Sustituyendo la expresión (3.23) en $(A.5)$, se sigue que:

$$\begin{aligned} 0 &= \sinh(-kc) - \frac{2k}{q}\sin(qb)\cdot\left[\cosh(kc)\cos(qb) - \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sinh(kc)\sin(qb)\right] \\ &= -\sinh(kc) - \frac{k}{q}\sin(2qb)\cosh(kc) + \left(1 - \frac{k^2}{q^2}\right)\sin^2(qb)\sinh(kc) \end{aligned}$$

Multiplicando ahora por q^2 y simplificando, se obtiene que:

$$0 = \left[q^2\cos^2(qb) + k^2\sin^2(qb)\right]\sinh(kc) + kq\sin(2qb)\cosh(kc) \tag{A.6}$$

Por otro lado, considere la ecuación analítica (2.20) y poniendo $a_1 = a_2 = 0$, se sigue que:

$$\begin{aligned} 0 =&(k^2+q^2)^2\sinh(kc)\sin^2(qb) + 2kq(k^2+q^2)\cosh(kc)\sin(2qb) + 2(k^4-q^4)\sinh(kc)\sin^2(qb) \\ &+2kq(k^2-q^2)\cosh(kc)\sin(2qb) + [4k^2q^2\cos^2(qb) + (k^2-q^2)^2\sin^2(qb)]\sinh(kc) \end{aligned}$$

Agrupando términos semejantes y simplificando:

$$\begin{aligned} 0 = &\left[(k^2+q^2)^2 + 2(k^4-q^4) + (k^2-q^2)^2\right]\sinh(kc)\sin^2(qb) \\ &+ 2kq\left[(k^2+q^2) + (k^2-q^2)\right]\cosh(kc)\sin(2qb) + 4k^2q^2\cos^2(qb)\sinh(kc) \end{aligned}$$

$$\therefore 0 = 4k^4\sinh(kc)\sin^2(qb) + 4k^3q\cosh(kc)\sin(2qb) + 4k^2q^2\cos^2(qb)\sinh(kc) \tag{A.7}$$

Note que dividiendo por $4k^2$ a la expresión anterior $(A.7)$, entonces se obtiene la expresión $(A.6)$. Por lo tanto, se verifica que las ecuaciones (2.20) y (3.22) en el caso de $N = 2$ son equivalentes entre sí cuando $a_1 = a_2 = 0$ y en general, la ecuación analítica general (3.22) con $N = 2$, se reduce a la ecuación analítica (2.20).

Apéndice B

Deducción de fórmulas analíticas particulares para un doble pozo de potencial

En este apéndice se obtienen las fórmulas analíticas para un doble pozo de potencial, ya sea, para el caso del primer modelo de pozos delta de Dirac como se observa en la *Figura 1.4* o para el caso del segundo modelo de pozos de potencial rectangulares como se ve en la *Figura 2.4*.

B.1. Doble pozo de potencial tipo delta de Dirac

Para hallar las energías ligadas ($E < 0$) ante un potencial periódico formado por $N \geq 2$ pozos de potencial tipo delta de Dirac como se muestra en la *Figura 3.1*, se debe usar la ecuación explícita (3.28). Considere el caso particular de un doble pozo de potencial tipo delta de Dirac como se ve en la *Figura 1.4*. Note que $N = 2$ y es un número par, entonces debemos usar al número $\frac{1}{2}N = 1$ como límite superior en ambas sumas de la ecuación (3.28) y en consecuencia, se tiene que:

$$\begin{aligned}
0 =& e^{kb}\left(1-\frac{a_0}{2k}\right)\sum_{s=1}^{1}(-1)^{s+1}\binom{2-s}{s-1}\left[2\cosh(kb)-\frac{a_0}{k}\sinh(kb)\right]^{3-2s} \\
&-\sum_{s=1}^{1}(-1)^{s+1}\binom{1-s}{s-1}\left[2\cosh(kb)-\frac{a_0}{k}\sinh(kb)\right]^{2-2s} \\
=& e^{kb}\left(1-\frac{a_0}{2k}\right)(-1)^2\binom{1}{0}\left[2\cosh(kb)-\frac{a_0}{k}\sinh(kb)\right] \\
&-(-1)^2\binom{0}{0}\left[2\cosh(kb)-\frac{a_0}{k}\sinh(kb)\right]^0 \\
=& e^{kb}\left(1-\frac{a_0}{2k}\right)\left[2\cosh(kb)-\frac{a_0}{k}\sinh(kb)\right]-1 \\
=& e^{kb}\left(1-\frac{a_0}{2k}\right)\left[e^{kb}\left(1-\frac{a_0}{2k}\right)+e^{-kb}\left(1+\frac{a_0}{2k}\right)\right]-1
\end{aligned}$$

$$\therefore 0 = e^{2kb}\left(1-\frac{a_0}{2k}\right)^2-\left(\frac{a_0}{2k}\right)^2 \tag{B.1}$$

Multiplicando ahora por e^{-kb} a la expresión $(B.1)$, se obtiene que:

$$0 = e^{kb}\left(1-\frac{a_0}{2k}\right)^2-e^{-kb}\left(\frac{a_0}{2k}\right)^2 \tag{B.2}$$

Así, la ecuación ($B.2$) es la misma que la ecuación (1.18) para hallar las energías ligadas ($E < 0$) ante un par de pozos de potencial delta de Dirac.

B.2. Doble pozo de potencial finito

Similarmente a la sección anterior de este apéndice, para hallar las energías ligadas ($E < 0$) ante un potencial periódico formado por $N \geq 2$ pozos de potencial finito como se observa en la *Figura 3.2*, se utiliza la ecuación explícita (3.30). Considere ahora el caso particular de un doble pozo de potencial finito como se ve en la *Figura 2.4*. Es claro que $N = 2$ y es un número par, esto implica que se debe usar al número $\frac{1}{2}N = 1$ como el límite superior en ambas sumas de la ecuación (3.30), de modo que:

$$\begin{aligned}
0 =& e^{kc}\left[\cos(qb) - \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin(qb)\right] \times \\
& \sum_{s=1}^{1}(-1)^{s+1}\binom{2-s}{s-1}\left[2\cosh(kc)\cos(qb) - \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sinh(kc)\sin(qb)\right]^{3-2s} \\
& - \sum_{s=1}^{1}(-1)^{s+1}\binom{1-s}{s-1}\left[2\cosh(kc)\cos(qb) - \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sinh(kc)\sin(qb)\right]^{2-2s} \\
=& e^{kc}\left[\cos(qb) - \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin(qb)\right] \times \\
& (-1)^2\binom{1}{0}\left[2\cosh(kc)\cos(qb) - \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sinh(kc)\sin(qb)\right] \\
& - (-1)^2\binom{0}{0}\left[2\cosh(kc)\cos(qb) - \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sinh(kc)\sin(qb)\right]^0
\end{aligned}$$

$$\therefore 0 = e^{kc}\left[\cos(qb) - \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin(qb)\right]\left[2\cosh(kc)\cos(qb) - \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sinh(kc)\sin(qb)\right] - 1 \tag{B.3}$$

Simplificando la expresión ($B.3$), se sigue que:

$$\begin{aligned}
0 =& e^{kc}\left[\cos(qb) - \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin(qb)\right] \times \\
& \left\{e^{kc}\left[\cos(qb) - \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin(qb)\right] + e^{-kc}\left[\cos(qb) + \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin(qb)\right]\right\} - 1 \\
=& e^{2kc}\left[\cos(qb) - \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin(qb)\right]^2 + \left[\cos^2(qb) - \frac{1}{4}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)^2\sin^2(qb)\right] - 1
\end{aligned}$$

$$\therefore 0 = e^{2kc}\left[\cos(qb) - \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\sin(qb)\right]^2 - \frac{(k^2+q^2)^2}{4k^2q^2}\sin^2(qb) \tag{B.4}$$

Multiplicando ahora por $4k^2q^2e^{-kc}$ a la expresión ($B.4$), se concluye que:

$$0 = e^{kc}\left[2kq\cos(qb) + \left(k^2 - q^2\right)\sin(qb)\right]^2 - e^{-kc}(k^2+q^2)^2\sin^2(qb) \tag{B.5}$$

Por lo tanto, la ecuación ($B.5$) es la misma que la ecuación (2.22) para hallar las energías ligadas ($E < 0$) ante un par de pozos de potencial finito.

Apéndice C

Primer modelo: funciones de onda normalizadas y densidades de probabilidad

En el presente apéndice se muestran las funciones de onda normalizadas y las densidades de probabilidad ambas como funciones de x. En seguida, las gráficas de $\psi(x)$ y $|\psi(x)|^2$ se localizan a la izquierda y a la derecha de las páginas, respectivamente, para una cadena lineal de $N = 4$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio usando el primer modelo.

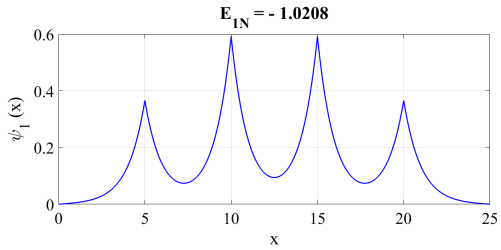

Figura C.1: Función de onda del primer nivel normalizado de energía ligada correspondiente al estado base.

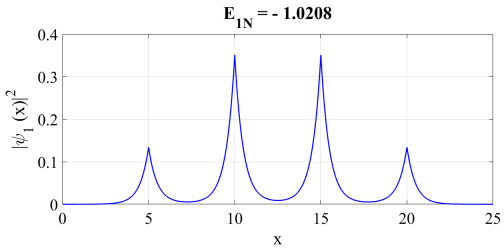

Figura C.2: Densidad de probabilidad del primer nivel normalizado de energía ligada correspondiente al estado base.

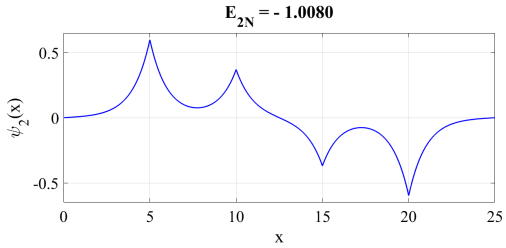

Figura C.3: Función de onda del segundo nivel normalizado de energía ligada.

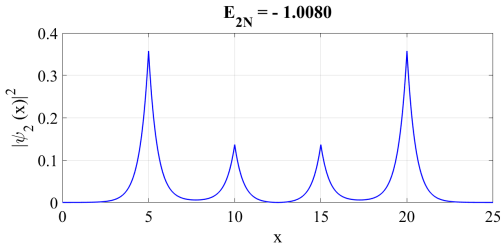

Figura C.4: Densidad de probabilidad del segundo nivel normalizado de energía ligada.

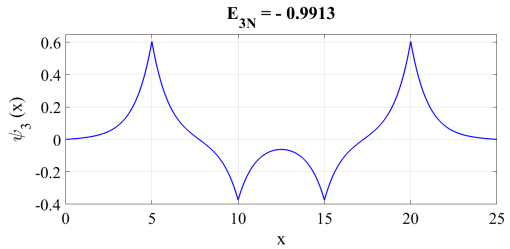

Figura C.5: Función de onda del tercer nivel normalizado de energía ligada.

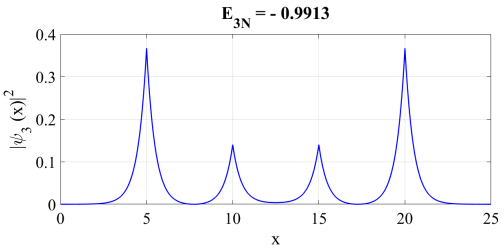

Figura C.6: Densidad de probabilidad del tercer nivel normalizado de energía ligada.

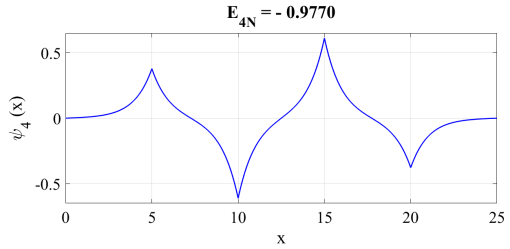

Figura C.7: Función de onda del cuarto nivel normalizado de energía ligada.

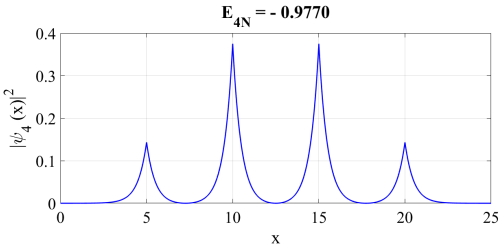

Figura C.8: Densidad de probabilidad del cuarto nivel normalizado de energía ligada.

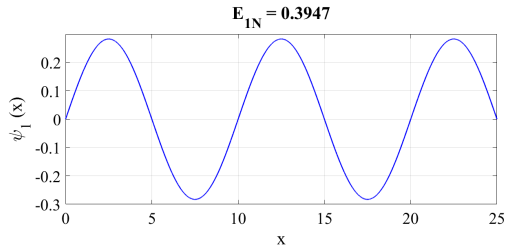

Figura C.9: Función de onda del primer nivel normalizado de energía dispersiva correspondiente al estado base.

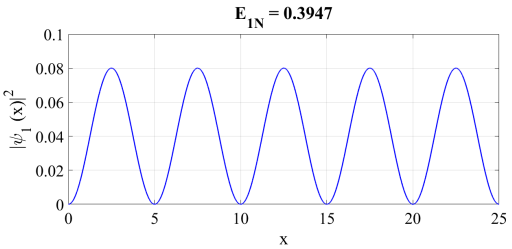

Figura C.10: Densidad de probabilidad del primer nivel normalizado de energía dispersiva correspondiente al estado base.

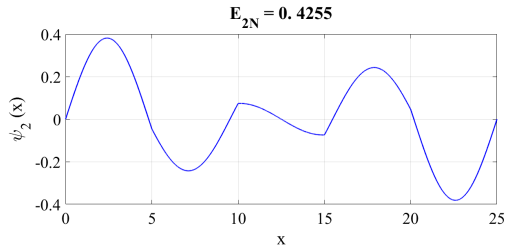

Figura C.11: Función de onda del segundo nivel normalizado de energía dispersiva.

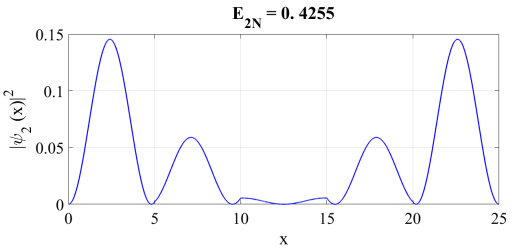

Figura C.12: Densidad de probabilidad del segundo nivel normalizado de energía dispersiva.

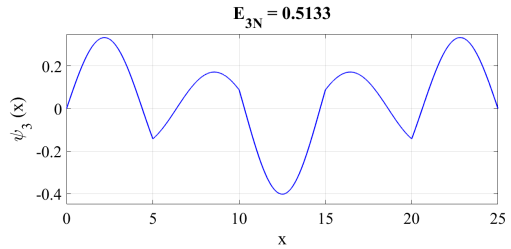

Figura C.13: Función de onda del tercer nivel normalizado de energía dispersiva.

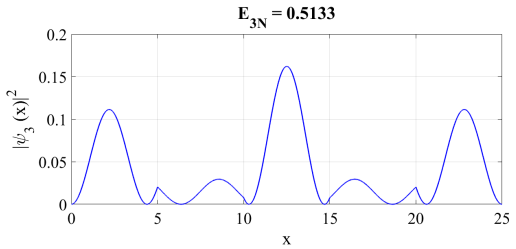

Figura C.14: Densidad de probabilidad del tercer nivel normalizado de energía dispersiva.

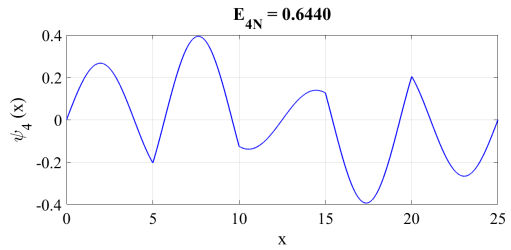

Figura C.15: Función de onda del cuarto nivel normalizado de energía dispersiva.

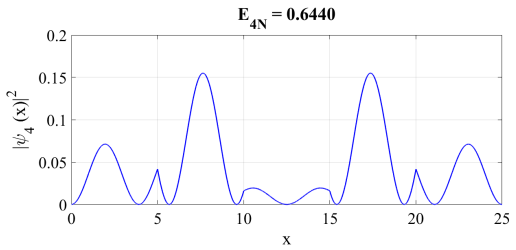

Figura C.16: Densidad de probabilidad del cuarto nivel normalizado de energía dispersiva.

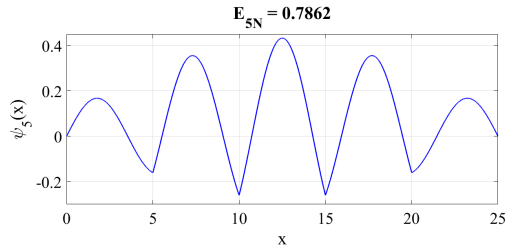

Figura C.17: Función de onda del quinto nivel normalizado de energía dispersiva.

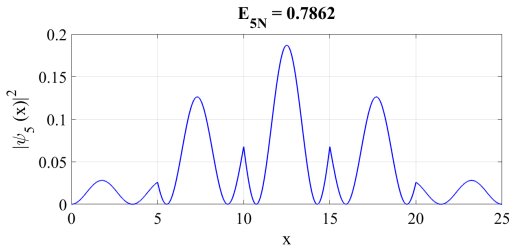

Figura C.18: Densidad de probabilidad del quinto nivel normalizado de energía dispersiva.

Apéndice D

Segundo modelo: funciones de onda normalizadas y densidades de probabilidad

En este apéndice, también se muestran las funciones de onda normalizadas y las densidades de probabilidad ambas como funciones de x. En seguida, las gráficas de $\psi(x)$ y $|\psi(x)|^2$ se localizan a la izquierda y a la derecha de las páginas, respectivamente, para una cadena lineal de $N = 4$ átomos idénticos distribuidos uniformemente en el espacio usando el segundo modelo.

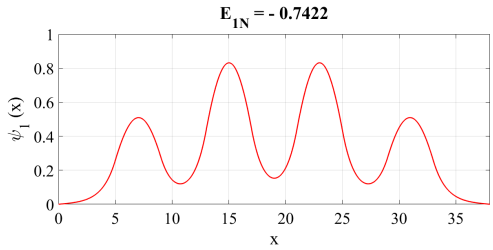

Figura D.1: Función de onda del primer nivel normalizado de energía ligada correspondiente al estado base.

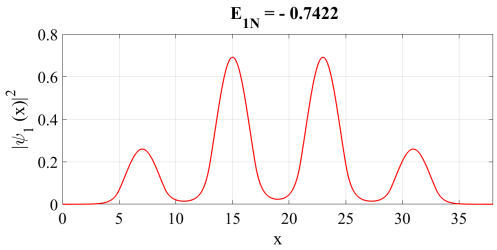

Figura D.2: Densidad de probabilidad del primer nivel normalizado de energía ligada correspondiente al estado base.

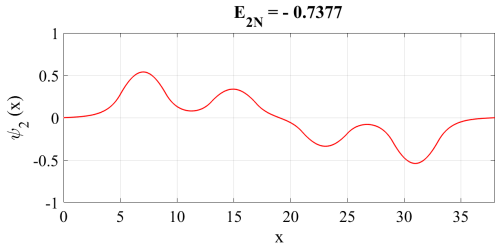

Figura D.3: Función de onda del segundo nivel normalizado de energía ligada.

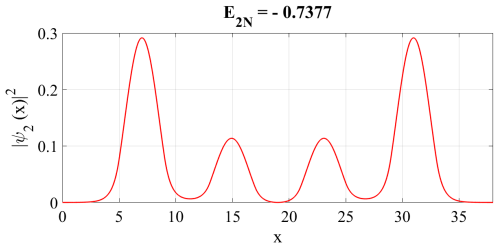

Figura D.4: Densidad de probabilidad del segundo nivel normalizado de energía ligada.

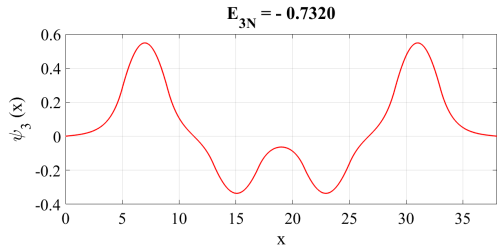

Figura D.5: Función de onda del tercer nivel normalizado de energía ligada.

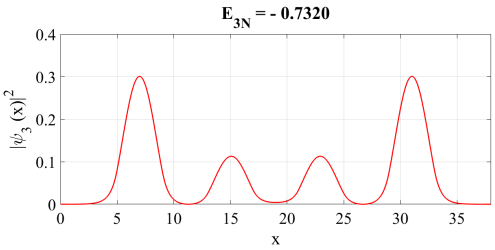

Figura D.6: Densidad de probabilidad del tercer nivel normalizado de energía ligada.

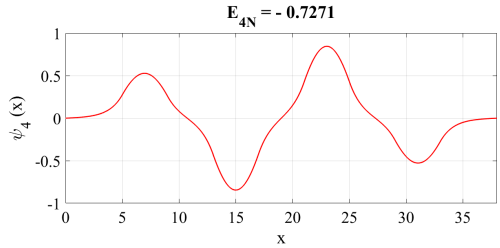

Figura D.7: Función de onda del cuarto nivel normalizado de energía ligada.

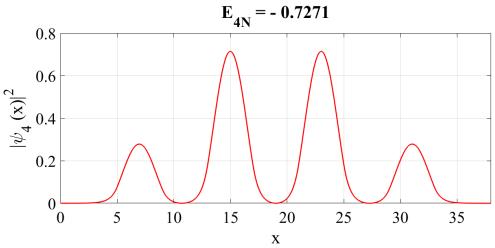

Figura D.8: Densidad de probabilidad del cuarto nivel normalizado de energía ligada.

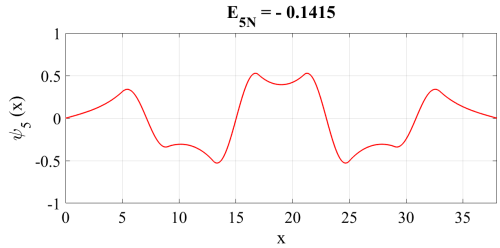

Figura D.9: Función de onda del quinto nivel normalizado de energía ligada.

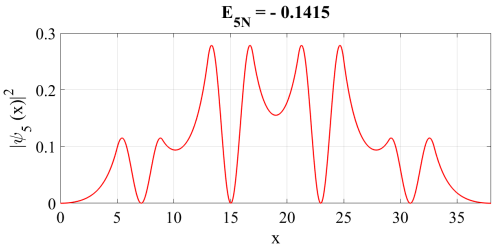

Figura D.10: Densidad de probabilidad del quinto nivel normalizado de energía ligada.

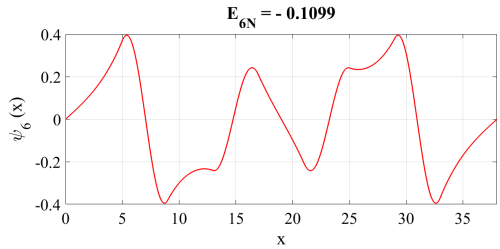

Figura D.11: Función de onda del sexto nivel normalizado de energía ligada.

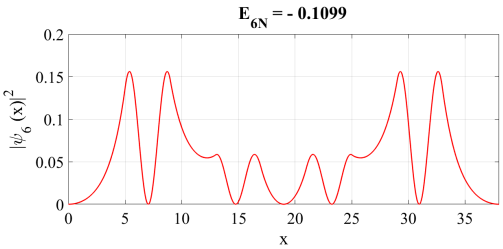

Figura D.12: Densidad de probabilidad del sexto nivel normalizado de energía ligada.

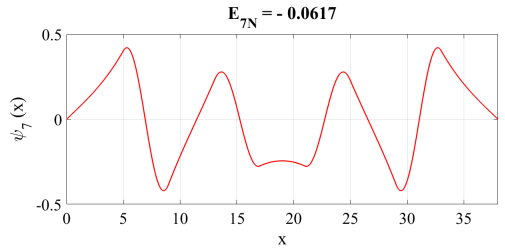

Figura D.13: Función de onda del séptimo nivel normalizado de energía ligada.

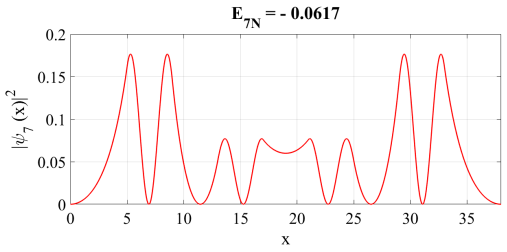

Figura D.14: Densidad de probabilidad del séptimo nivel normalizado de energía ligada.

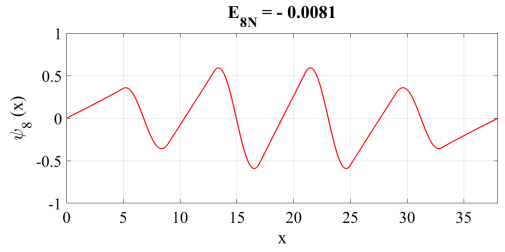

Figura D.15: Función de onda del octavo nivel normalizado de energía ligada.

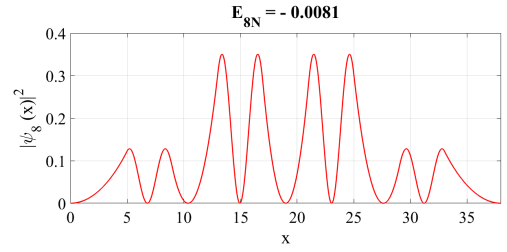

Figura D.16: Densidad de probabilidad del octavo nivel normalizado de energía ligada.

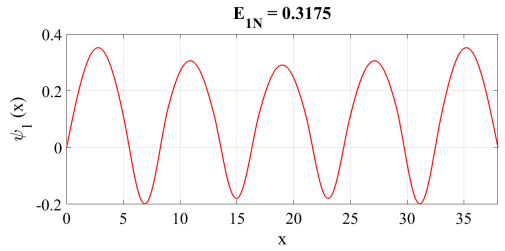

Figura D.17: Función de onda del primer nivel normalizado de energía dispersiva correspondiente al estado base.

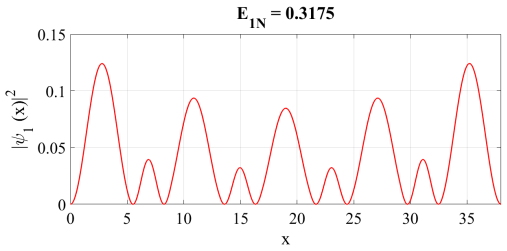

Figura D.18: Densidad de probabilidad del primer nivel normalizado de energía dispersiva correspondiente al estado base.

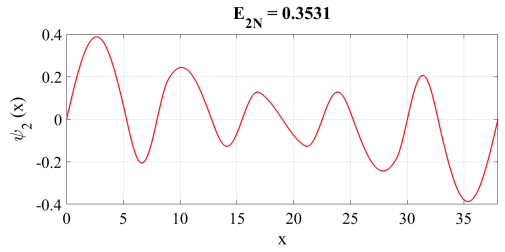

Figura D.19: Función de onda del segundo nivel normalizado de energía dispersiva.

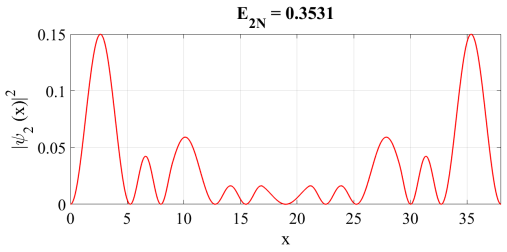

Figura D.20: Densidad de probabilidad del segundo nivel normalizado de energía dispersiva.

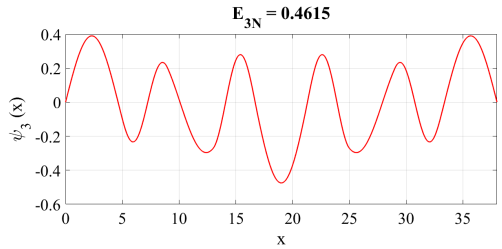

Figura D.21: Función de onda del tercer nivel normalizado de energía dispersiva.

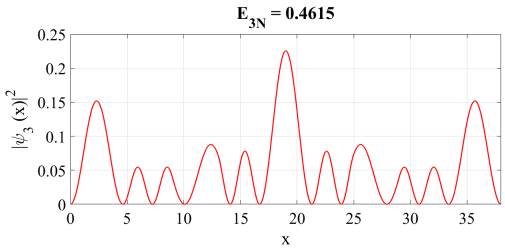

Figura D.22: Densidad de probabilidad del tercer nivel normalizado de energía dispersiva.

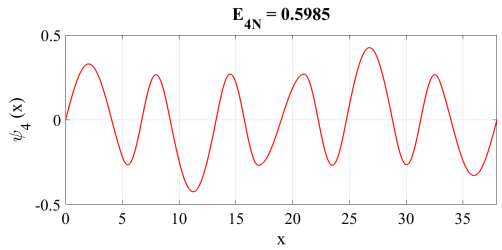

Figura D.23: Función de onda del cuarto nivel normalizado de energía dispersiva.

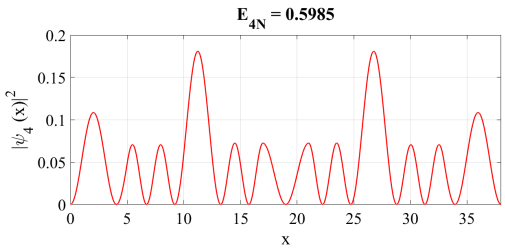

Figura D.24: Densidad de probabilidad del cuarto nivel normalizado de energía dispersiva.

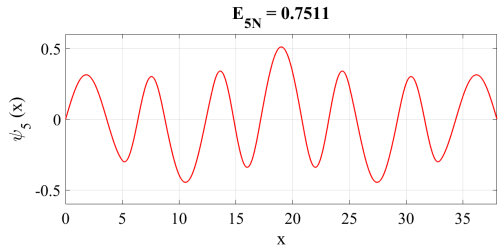

Figura D.25: Función de onda del quinto nivel normalizado de energía dispersiva.

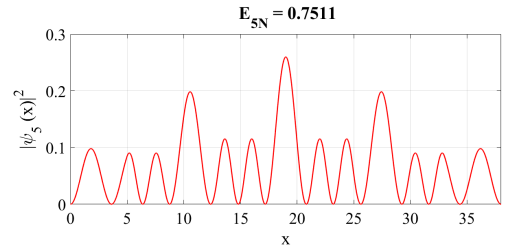

Figura D.26: Densidad de probabilidad del quinto nivel normalizado de energía dispersiva.

Bibliografía

[1] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Mecánica Cuántica no-relativista, Volume 3 del Curso de Física Teórica*. Segunda Edición. Reverté S. A. Barcelona (1972).

[2] Luis de la Peña, *Introducción a la Mecánica Cuántica*. Segunda Edición. Reverté S. A Barcelona (1980).

[3] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics*, Vol. I, John Wiley and Sons (1977).

[4] Marappan Dharani, Basudeb Sahu, Chakrakodi S. Shastry, *Threshold conditions and bound states for locally periodic delta potentials*, Cent. Eur. J. Phys. 12 (10) 755-766 (2014).

[5] Marappan Dharani, Basudeb Sahu, Chakrakodi S. Shastry, *Conditions governing the generalization of threshold bound states for N attractive delta potentials in one and three dimensions*, Cent. Eur. J. Phys. 11 (8) 995-1005 (2013).

[6] S. N. Behera, S, Gayen, G. V. RaviPrassad and S. M. Bose, *Electronic properties of ordered and disordered linear clusters of atoms and molecules*, Phys. B 390, 124-133 (2007).

[7] D. J. Griffiths and N. F. Taussing, *Scattering from a locally periodic potenctial*, Am. J. Phys. 60 (10) (1992).

[8] Amnon Yariv, Pochi Yeh; *Optical Waves in Crystals*, John Wiley and Sons New York (1988).

[9] Pochi Yeh; Amnon Yariv and Chi-Shain Hong, *Electromagnetic propagation in periodic stratified media. I. General theory*, J. Opt. Soc. Am. 67 (4) 423-438 (1977).

[10] P. Markos and C M, Soukoulis, *Wave propagation from electrons to photonic crystals and left-handed materials*, Princeton Press University, New Jersey (2008).

[11] Murray R. Spiegel, *Manual de fórmulas y tablas matemáticas*, McGraw-Hill, México (1998).