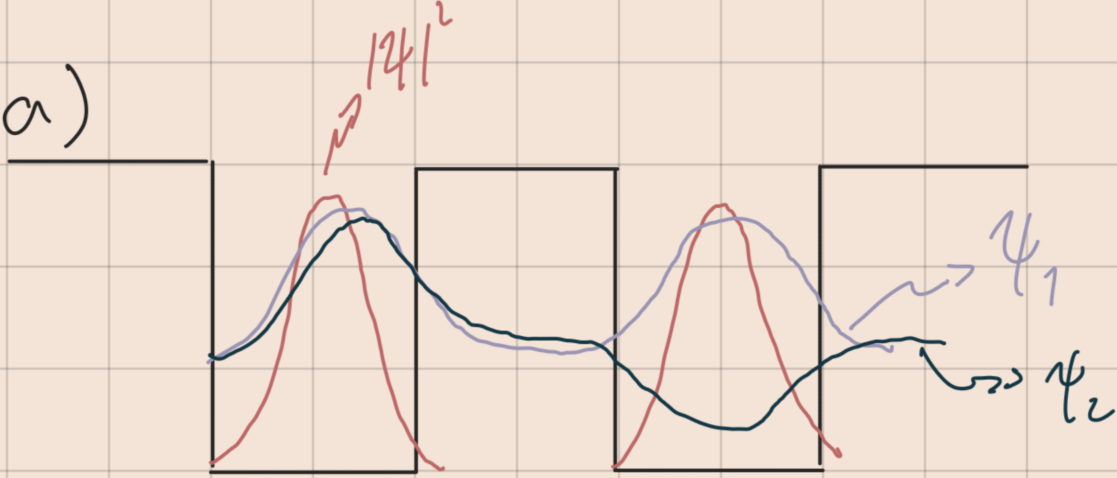
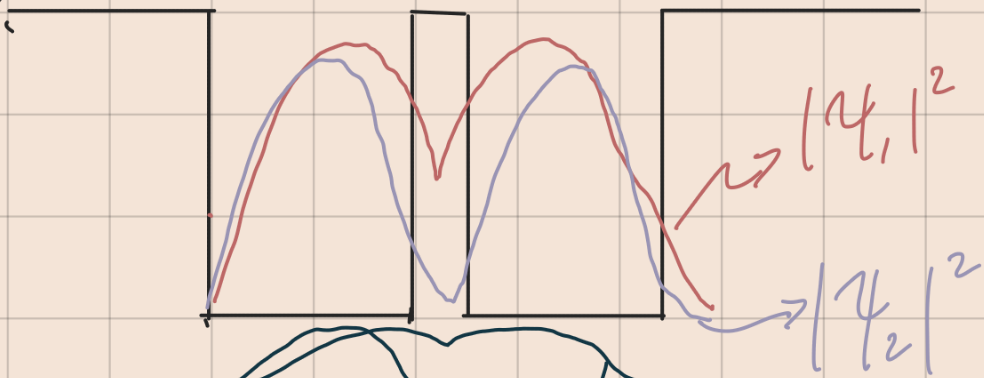
Lucas González M.   Aux #3   5/9/22

P1 a)

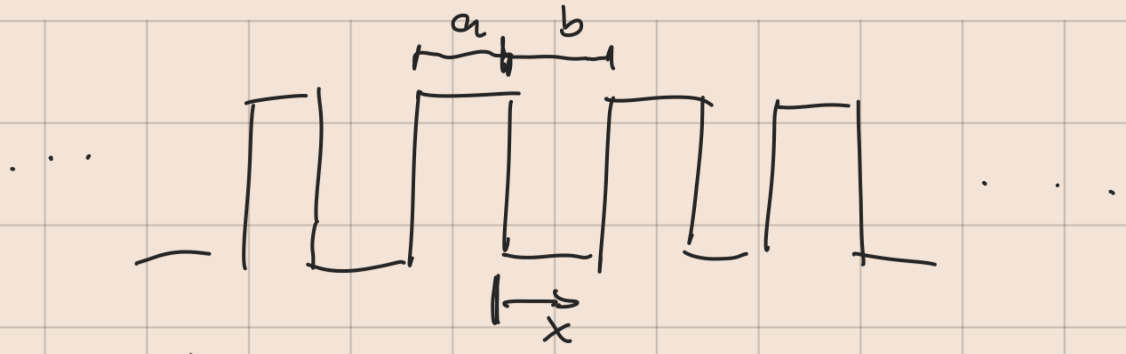


b)



c)

P2



para $0<x<b$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0$$

$b<x<a$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\psi=0$$

asumiremos que $E<V_0$ o que los electrones están atrapados en el potencial. Sean:

$$\alpha^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \quad ; \quad \beta^2=\frac{2m}{\hbar}(V_0-E)$$

dejándonos con:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\alpha^2\psi=0 \quad ; \quad \frac{d^2\psi}{dx^2}+\beta^2\psi=0$$

si bien tenemos 2 ecuaciones en realidad tenemos un par de estas por todas las veces que se repite el sistema ... lo cual es demasiado, es por esto que tenemos la herramienta del teorema de Bloch.

Esto nos dice que las soluciones de la eq. de Schrödinger para un potencial periodico toman la forma de una onda plana modulada por una función del mismo periodo que el potencial.

$$\Rightarrow \psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, u_k(\vec{r})$$

para nuestro caso en 1-D:

$$\psi(x) = e^{ikx}\, u_k(x)$$

donde $u_k(x)$ tiene periodo $(b+a)$. Calculamos algunas cosas:

$$\frac{d\psi}{dx} = ik\, e^{ikx} u_k(x) + e^{ikx}\frac{du_k}{dx}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 e^{ikx} u_k(x) + ik\, e^{ikx}\frac{du_k}{dx} + ik\, e^{ikx}\frac{du_k}{dx} + e^{ikx}\frac{d^2u}{dx}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 e^{ikx} u_k(x) + 2ik\, e^{ikx}\frac{du_k}{dx} + e^{ikx}\frac{d^2u_k}{dx^2}$$

reemplazando en las ecuaciones obtenemos:

$$\frac{d^2u_1}{dx^2} + 2ik\frac{du_1}{dx} - (\alpha^2 - k)u_1 = 0 \; ; \quad u_1(x) = u_k(x) \text{ a } \; 0<x<b$$

$$\frac{d^2u_2}{dx^2} + 2ik\frac{du_2}{dx} - (\beta^2 - k^2)u_2 = 0 \; ; \quad u_2(x) = u_k(x) \text{ en } \; b<x<a$$

las soluciones serán:

$$u_1 = Ae^{i(\alpha-k)x} + Be^{-i(\alpha+k)x} \qquad 0<x<b$$

$$u_2 = Ce^{i(\beta-k)x} + De^{-i(\beta+k)x} \qquad b<x<a$$

donde por supuesto debemos imponer las condiciones de borde correspondientes

$$u_1\Big|_{x=0} = u_2\Big|_{x=0} \; ; \; \frac{du_1}{dx}\Big|_{x=0} = \frac{du_2}{dx}\Big|_{x=0} \; ; \; u_1\Big|_{x=b} = u_2\Big|_{x=-a}$$

$$\frac{du_1}{dx}\Big|_{x=b} = \frac{du_2}{dx}\Big|_{x=-a} \quad \ldots$$

matraca, totalmente innecesario...

se llega a la siguiente ecuación:

$$\frac{\beta^2+\alpha^2}{2\alpha\beta}\sin(\beta b)\sin(\alpha a) + \cosh(\beta b)\cosh(\alpha a) = \cos(k(a+b))$$

para tener algún resoltado... asumamos que $V \to \infty$ y que $a \to 0$ tal que $V_0 b$ es finito:

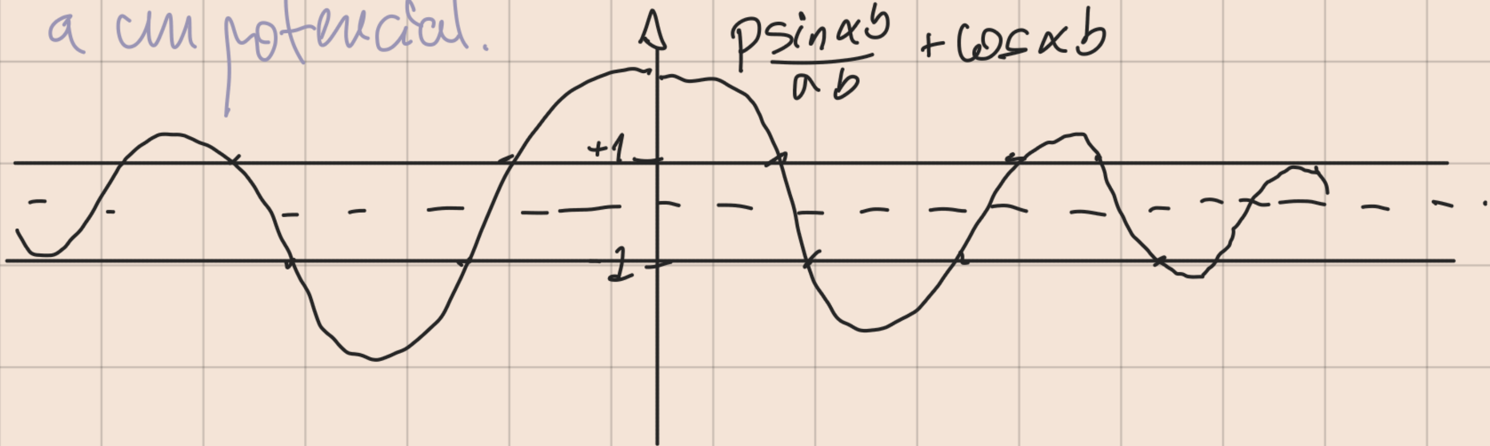
$$\lim_{\beta b \to 0} \frac{\sin(\beta b)}{\beta b} = 1$$

Así, la ecuación queda

$$\frac{mV_0 b}{\hbar^2 \alpha} \sin(\alpha b) + \cos(\alpha b) = \cos(kb)$$

$$\Rightarrow P \frac{\sin(\alpha b)}{\alpha b} + \cos(\alpha b) = \cos(kb)$$

mide que tan fuertemente ligado está un electrón a un potencial.



como α^2 es proporcional a la energía, entonces la abscissa mide energía

$\Rightarrow$ 1.- el espectro de energía consiste en bandas permitidas y prohibidas

2.- $P \to \infty$ la región permitida es infinitamente delgada $\Rightarrow \sin \alpha a = 0 \Rightarrow b\alpha = \pm n\pi$

$\Rightarrow E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} n^2$ con $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$

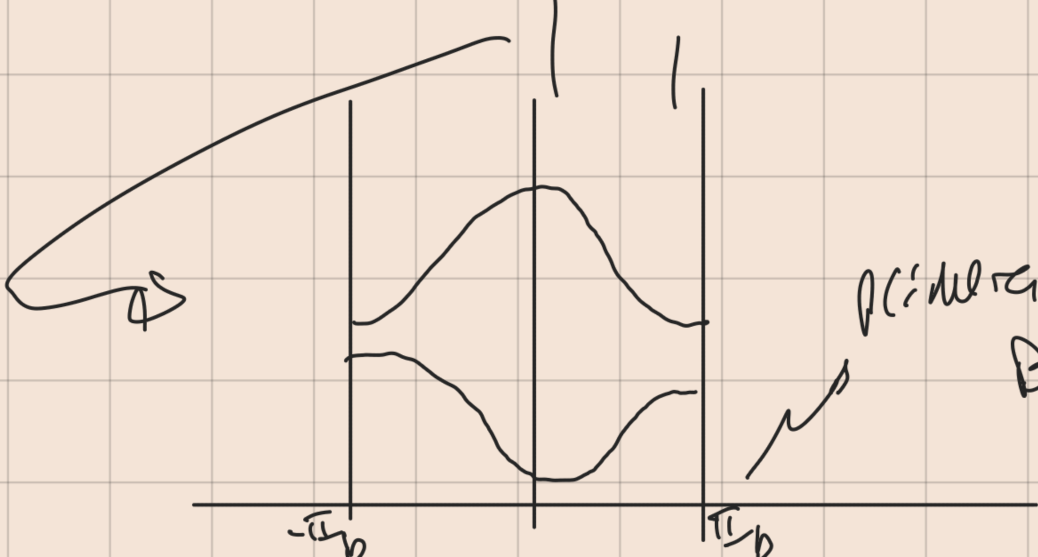
para $P \to \infty$

potencial de un pozo ...

· $P \to 0$ $\cos \alpha a = \cos ka \Rightarrow \alpha = k$

$\to E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ partícula libre.

$E(k) = ¿?$ el lado derecho de la ec. trascendente $\cos(ka)$ es una función par y su valor no cambia si ka es + o −. Por tanto la energía E del electrón también lo será y será periódica con periodo $\frac{2\pi}{b}$, esta repetición periódica de energías se ve:



primera zona de Brillouin.