



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS



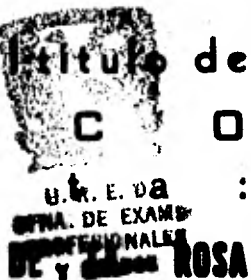
**EFFECTO DEL RELAJAMIENTO SOBRE
LOS ESTADOS DE SUPERFICIE**

TESIS PROFESIONAL

que para obtener el título de

F I S I C O
p r e s e n t a :

JORGE DANIEL MARROQUIN



México, D. F.

Julio de 1982



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

- I N D I C E -

	<u>Página</u>
- Dedicatoria	1
- Prólogo.	2
- Introducción	4
- Capítulo I	
Los estados de superficie	7
Modelos usados (tipo de aproximaciones)	10
Métodos de análisis	11
- Capítulo II	
Modelo unidimensional, semi-infinito y limpio para electrón libre con el método de onda reflejada.	14
- Capítulo III	
Modelo unidimensional, semi-infinito, limpio con el primer átomo relajado y de potencial cambiado con el método de onda reflejada	21
- Capítulo IV	
Contraste de lo nuestro y lo otro (Conclusiones).	25
- Apéndice A	37
- Apéndice B	41
- Referencias	43

PROLOGO

El presente trabajo consta esencialmente de cuatro partes.

La primera sección es un esbozo de lo que son los estados localizados de superficie y diversas clasificaciones que de ellos existen; tipos de aproximaciones, o modelos, que han sido usados en diversos momentos y situaciones para abordar los problemas. En la última parte de esta sección se presentan los distintos métodos matemáticos y de análisis, que han sido usados en la resolución -o intento de resolución- de estos problemas.

La segunda sección es una narrativa de lo que existe en la literatura científica que, creemos, ha sido lo más sobresaliente para el desarrollo de nuestro trabajo. En esta presentación de trabajos anteriores introducimos un nuevo método de cálculo para estos problemas obteniendo los resultados que fueron encontrados por los autores respectivos.

La tercera parte es lo que, esencialmente, es nuevo en el trabajo de tesis del autor. Es la presentación y desarrollo matemático del problema que habremos de tratar. Para esto, en un momento determinado, tal vez, será necesario volver a las secciones anteriores para recuperar algún elemento que pudiese quedar un poco, como, "flotando".

Por último, se presenta una discusión de lo que son nuestros resultados y se comparan al resto de los trabajos mencionados. También se hace un análisis del resultado, ya, sin tomar en

cuenta a los demás, de suerte que pueda ser valorado desde un punto de vista más particular.

Es claro que, salvo en casos que se considere absolutamente indispensable, no se harán demostraciones de teoremas, físicos o matemáticos, que se puedan encontrar corrientemente en la literatura. Lo que sí haremos será señalar algunas referencias bibliográficas que permitan al interesado tener una visión más de conjunto del tema en cuestión.

INTRODUCCION

Desde que Tamm demostró la existencia de niveles de energía localizados en la superficie libre de un cristal unidimensional semiinfinito, muchos autores han calculado estos niveles por distintos métodos.

La mayoría de estos trabajos se han hecho postulando que el potencial de la superficie es de la misma intensidad que los del bulto. No obstante algunos otros han sido más elaborados y han considerado la posibilidad de una superficie contaminada. Para esto se ha considerado al átomo de la superficie diferente de los del bulto.

Aerts ¹⁾ ha de considerar estos dos casos, en 1960, partiendo del trabajo de Saxon y Hutner, y, usando el método de la matriz de dispersión.

Por medio de la función de Green, en 1960 también, Phariseau ³⁾ discute el espectro de energías de un electrón en una red unidimensional semiinfinita que, nuevamente, contiene un solo tipo de átomo. Estos átomos están representados por una función δ de Dirac. Limitando un lado del cristal con un potencial -escalón, además ha de suponer que los primeros átomos se encuentran desplazados (o relajados).

María Steslička ²⁾, en 1966, revisa la influencia de la deformación de la constante de la red, en la superficie, sobre los niveles de energía asociado al cristal unidimensional semiinfinito. También encuentra que la existencia de los estados de

superficie es afectada, además, por la deformación de la primera celda.

En 1975, Meijer⁴⁾ retoma la discusión, ahora con el modelo de Kroning-Penney finito, con y sin átomo en la superficie.

En 1976, Andrade y Uribe⁸⁾ resuelven el problema de la interfase entre dos cristales semiinfinitos en contacto cercano, usando el método de la matriz S , y muestran que el número de estados y su energía dependen de la separación de los cristales. Cuando esta separación es muy grande los estados de la interfase se convierten en estados de superficie.

El problema de una impureza en un cristal infinito, también fue resuelto por Orozco, Terrazas y Andrade⁹⁾ usando el método de la función de Green. En este caso son corroborados los resultados de Saxon y Hutner.

En 1957, Koutečky, usando las funciones de Wannier resuelve el problema considerando un cambio del potencial en la superficie hasta el primer vecino. De esta manera, encuentra uno o dos estados localizados y la existencia de un estado de superficie. Básicamente, este tratamiento utiliza la aproximación de amarre fuerte y es equivalente al método de orbitales moleculares.

El problema que nosotros abordamos consiste en un cristal unidimensional-semiinfinito con el primer átomo diferente y relajado. Los potenciales atómicos son simulados por la función δ de Dirac y la superficie por un potencial escalón.

Para la resolución de este problema se hará uso del método conocido como "onda reflejada" y usando soluciones regionales.

En esta última parte, al igual que Aerts, recurriremos al resultado de Saxon y Hutner.

Salvo el caso de Phariseau (en donde se estará considerando únicamente para $n=1$) se pretende que nuestro modelo contiene como caso particular a los ya mencionados, además de presentar un tratamiento matemático mucho más simple.

CAPITULO I

A continuación presentamos una breve explicación de lo que -- son los estados localizados de superficie. También señalamos algunas de las clasificaciones que, de estos estados, se han hecho. En seguida mostraremos algunos de los modelos que se -- han trabajado en el contexto de los estados de superficie. -- Por último se hace un resumen de los métodos matemáticos que se han usado para atacar los problemas.

Con esto se trata de mostrar la razón que nos lleva a atacar un modelo determinado con el método de onda reflejada.

Los estados de superficie.

Las propiedades electrónicas de un cristal, en el interior, -- son determinados fundamentalmente por la composición química y el arreglo cristalográfico de los átomos. Sin embargo, aun cuando queremos explicar estas propiedades por modelos estrictamente periódicos y no obstante el considerar los cristales suficientemente grandes, hasta para fenómenos aparentemente -- muy simples habrá casos en que la contribución de la superficie será bastante notable; es más, se encontrarán casos en -- que los efectos de superficie excederán a los del bulto, como por ejemplo en los semiconductores.

Las propiedades electrónicas de los cristales "infinitos" son determinados esencialmente por los estados electrónicos del bulto. Ahora bien, la peculiaridad de la superficie está en -- producir estado de superficie, es decir, estados electrónicos

Únicamente cercanos a la superficie y no al bulto.

Dado que muchas propiedades de los cristales son determinados por los estados de superficie es necesario saber y entender - las características de este tipo de estados electrónicos.

El concepto de estado de superficie fué introducido por Tamm, quien mostró que tales estados podían aparecer. Más tarde - - Schockley demostró que los estados de superficie encontrados por Tamm debían su existencia a una pérdida de simetría del - potencial en la superficie y generalizó los resultados anteriores al establecer que aún en el caso de tener un potencial simétrico los estados de superficie ocurren.

Una definición de estado de superficie que podemos manejar es la siguiente: Un estado electrónico es un estado de superfi- - cie si un electrón en tal estado está localizado cercano de - la superficie, esto es, si la amplitud de probabilidad de un electrón en tal estado decrece exponencialmente con el incremento de la distancia desde la superficie. La energía electrónica se encuentra localizada en las bandas prohibidas del - - cristal.

El estado electrónico es no localizado, si la probabilidad - por unidad de superficie de la red es constante, esto es, si el electrón puede ser encontrado en cualquier punto de la red con igual probabilidad.

Un estado electrónico es llamado un estado localizado de su- - perficie (o simplemente, estado localizado) si un electrón en

este estado se encuentra cercano al eje o centro del estado, esto es, si la amplitud de probabilidad decrece exponencialmente con el incremento de la distancia desde el centro o eje del estado.

En la literatura se dan algunas clasificaciones para los estados de superficie. Una que parece obvia es la distinción de estados intrínsecos y extrínsecos. Los estados intrínsecos de superficie son definidos como los estados de una superficie limpia, sin átomo extraño alguno.

En la anterior clasificación los estados de una superficie ideal forman un mismo conjunto con los que después de una deformación tienen una reconstrucción periódica. El resto de estados de superficie como los producidos por defectos intrínsecos o, a átomos adsorbidos, ordenados o no, son conjuntados como estados extrínsecos. Esto aunque una superficie con una posición absorbida puede ser, en principio, muy similar a una superficie limpia reconstruida y totalmente diferente de alguna superficie con defectos.

Dado que el grado y tipo de perturbación puede ser prácticamente arbitrario, algunas otras distinciones se han ido introduciendo por otros autores.

.Modelos Usados (tipos de aproximaciones).

En cristales reales, la función de potencial que se utiliza - debe estar relacionado, de algún modo, con el potencial real experimentado por un electrón debido a los núcleos iónicos y a todos los demás electrones del cristal. Una solución exacta de este problema, incluso en la aproximación de un solo electrón, hasta el momento se antoja imposible de lograr; por esto se acostumbra plantear el problema desde el punto de vista de: aproximación del electrón libre ó aproximación de enlace firme conocido también como amarre fuerte. Se usa cualquiera de los mencionados en función de que sea el más apropiado para la situación particular que se trate.

En la aproximación de electrón libre, se supone que la energía total del electrón es siempre grande en comparación con la - energía potencial periódica. En estas condiciones, las bandas permisibles serán anchas y las regiones de energía prohibidas, muy angostas. Estas circunstancias nunca se realizan a la perfección en cristales reales dado que el potencial va siempre a $-\infty$ en los núcleos iónicos. Para los electrones mas externos de muchos metales simples, incluyendo los alcalinos, los requisitos se satisfacen aceptablemente en casi todo el volumen del cristal.

La aproximación de enlace firme parte de un punto de vista - contrario, esto es, que la energía potencial del electrón representa casi toda la energía; en este caso, las bandas de --

energía permitidas son muy angostas en comparación con las - bandas prohibidas. En el modelo del electrón libre se supone que los átomos del cristal están tan cerca unos de otros que las funciones de onda de los electrones de átomos circunvecinos se superponen en gran parte. Por esto, existe una fuerte interacción entre los átomos cercanos. Los estados de energía permisibles del cristal resultante tienen muy poco parecido - con las funciones de onda atómicas de los átomos individuales de los que se compone el cristal.

La aproximación de enlace firme se basa en la suposición de - que los átomos del cristal están tan separados que la función de onda de los electrones asociados con átomos vecinos se superponen solo en menor grado. La interacción entre átomos cercanos será relativamente débil en este caso. Las funciones de onda y los niveles de energía permisibles de todo el cristal estarán íntimamente relacionados con las funciones de onda y los niveles de energía de los átomos aislados.

Responder a la pregunta de cuál de las dos aproximaciones es correcta para una situación dada, depende del material particular de que se trate. En algunas sustancias, la aproximación de enlace firme es mucho más correcta. Existen también, cristales para los que ninguna de ellas es adecuada ya que se tratan de una situación intermedia entre estos dos extremos.

Método de Análisis.

Para el caso del potencial periódico infinito de un pozo cuadrado unidimensional se puede llegar a una solución exacta de

la ecuación de Shrödinger. Kroning y Penney fueron los primeros en investigar esta solución y, aunque se relaciona con un potencial periódico algo idealizado que constituye solo una aproximación burda del que se encuentra en un cristal real es de gran utilidad porque sirve para ilustrar de un modo más explícito muchas de las características físicas importantes del comportamiento cuántico de los electrones en las redes periódicas.

Las funciones de onda asociadas a este modelo se pueden calcular con la aproximación de un electrón. Para esto debemos resolver la ecuación de Shrödinger usando el teorema de Bloch (o Floquet), proposición matemática relacionada con la forma de las funciones de onda de un electrón para un potencial perfectamente periódico.

De hecho, las propiedades generales que la función de onda electrónica satisface en un cristal infinito y limpio son: el satisfacer el teorema de Bloch y por tanto ser periódica con la periodicidad de la red y poseer un esquema de bandas para su energía.

Si la periodicidad de la red se rompe, matemáticamente no es posible usar el teorema de Bloch.

Para estos casos más generales en que el sistema no es periódico, pero este rompimiento de la periodicidad es local, puede usarse teoría de perturbaciones para analizar los estados que cambian poco su energía y casi no modifican su forma - - excepto por una fase. Para los estados que sí modifican, tan-

-to su energía como la forma de la función de ondas se conocen otros métodos como lo son el de la función de Green (esto es, resolver la ecuación integral que resulta de la ecuación de Shrodinger) o, el de la matriz de dispersión (S) que consiste en expresar el estado perturbado en términos del resto del sistema no perturbado.

Para poder usar la matriz S esta se singulariza. Para que el sistema tenga solución finita resulta matemáticamente que la amplitud de las ondas entrantes a la perturbación es cero, de donde en el análisis, son consideradas únicamente las ondas salientes o reflejadas.

El método de las soluciones locales es considerar a la solución general como una superposición de las soluciones regionales estableciendo únicamente un conjunto de condiciones a la solución general.

Nosotros hemos elaborado un método para la solución a estos problemas y que llamamos "de la onda reflejada". Este método consiste en una combinación de los dos últimos, es decir, tomar las soluciones regionales, pero de ellas en el caso de nuestra perturbación únicamente las reflejadas.

Este método, en los casos conocidos, nos da los mismos resultados con la conveniencia de un cálculo mucho más simple y -- por consecuencia más factible de analizar, lo que se mostrará en la siguiente sección para el caso particular del trabajo de Aerts.

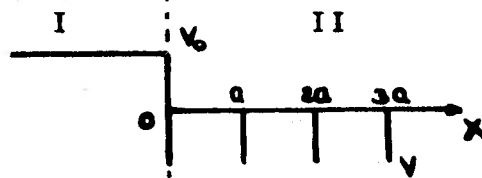
CAPITULO II

En esta sección hacemos una presentación más detallada de lo que hasta ahora existe en la literatura respecto a los estados localizados de superficie. También para el caso particular de Aerts, se reproduce el cálculo usando el método de onda reflejada. Esto lo hacemos con la intención de mostrar, con un caso conocido, la veracidad de nuestro método, es decir, la capacidad de al menos reproducir los casos conocidos, con una mayor simplicidad.

Partiendo del trabajo de Kronig-Penney, el caso del modelo unidimensional de un cristal semi-infinito, limpio y para el electrón libre, es abordado por Aerts en donde el vacío es simulado por un potencial escalón.

Aerts divide su espacio en dos regiones construyendo para cada una de ellas la solución particular. El problema de la perturbación es atacado usando la matriz S .

Asumiendo el modelo de Aerts en donde el potencial está dado por



$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } x < 0, V_0 > 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} V \sum_{r=1}^{\infty} \delta(x - b_r) & \text{si } x \geq 0, V > 0 \end{cases}$$

$$\text{con } b_1 = 0 \quad \text{y} \quad b_{j+1} - b_j = a \quad j = 1, 2, \dots$$

se obtienen las soluciones regionales

$$I) \Psi_1 = A_1 \exp(k_1 x) + B_1 \exp(-k_1 x)$$

$$II) \Psi_2 = A_2 U(x) + B_2 U(-x)$$

$$\text{con } k_1^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E).$$

Saxon y Hutner nos señalan que $U(x)$ es una onda de Bloch con la forma

$$U(\pm x) = \left\{ e^{i\mu a} \sin(\pm x - a \frac{x}{a}) - \sin \delta (\pm x - a(1 - [\frac{x}{a}])) \right\} e^{i\mu a [\frac{x}{a}]} \dots (*)$$

donde μ es el vector de onda, $\delta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$,

$$[\frac{x}{a}] \equiv \text{parte entera de } \frac{x}{a}.$$

Considerando el método de onda reflejada

$$A_2 = B_1 = 0$$

$$I) \Psi_1 = A_1 \exp(k_1 x)$$

$$II) \Psi_2 = B_2 U(x).$$

Por conservación del flujo de probabilidad

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0)$$

$$\Rightarrow A_1 = A_2 U(0) \dots (1)$$

Calculando la discontinuidad de Ψ' en $x = 0$, por integración directa de la ecuación de Shrödinger.

$$A_2 U'(0) - k_1 A_1 = -VA_2 U(0) \dots (2)$$

con lo que hemos construido un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas.

$$1) \quad A_1 = A_2 U(0)$$

$$2) \quad A_2 U'(0) - k_1 A_1 = -VA_2 U(0)$$

Substituyendo (1) en (2)

$$A_2 \left\{ U'(0) + VU(0) - k_1 U(0) \right\} = 0 \dots (3)$$

$A_2 \neq 0$ ó no habría sistema. De aquí

$$U'(0) = U(0) (k_1 - V) \dots (4)$$

en donde por (*)

$$U(0) = \text{sen } \gamma a$$

$$U'(0) = \gamma \left\{ e^{i\mu a} - \cos \gamma a \right\}$$

$$\gamma \left\{ e^{i\mu a} - \cos \gamma a \right\} = (k_1 - V) \text{sen } \gamma a$$

$$\therefore e^{i\mu a} = \frac{k_1 - V}{\gamma} \text{sen } \gamma a + \cos \gamma a \quad \dots (5)$$

que es la ecuación de Aerts.

Combinando (5) con la ecuación de Kroning-Penney se encuentra que

$$(2k_1 - 3V)^2 + 4\gamma^2 - V^2 = (V \cot \gamma a) 4\gamma \quad \dots (6)$$

en donde para el caso particular

$$\gamma a = \frac{\pi}{2} \quad P_t = \frac{V}{k_1^2 + \gamma^2} q^2$$

$$q^2 = 4(2V - 3k_1)^2 + (\gamma a)^2$$

se reduce a la relación de Tamm.

$$\frac{\pi}{a} \cot \frac{\pi}{2} = \frac{q^2}{2P_t} - (q^2 - \frac{\pi^2}{a^2})^{1/2} \quad \dots (7)$$

Esto es, existen los estados electrónicos de superficie.

Al crecer V_0 crece E; al decrecer V crece E.

El número y lugar de los estados de superficie depende del parámetro "a" de la red. Depende también de la profundidad individual del potencial atómico y de la altura de la barrera de potencial V_0 .

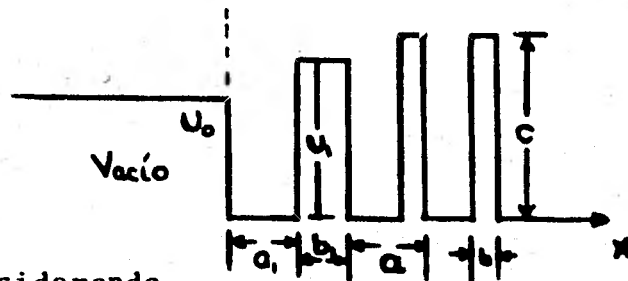
También se encuentra que todas las curvas son localizadas en las bandas prohibidas, además de que el número máximo de estados localizados es dos aunque generalmente hay solo uno.

Más adelante (1966), Marfa Steslička trata un problema más -- elaborado usando el método de soluciones regionales y considerando que el primer pozo es diferente y está relajado.

$$a_1 = \alpha a$$

$$b_1 = \beta b$$

$$U_1 = \eta U$$



Resuelve su sistema considerando

$$\lim_{\substack{U_1 \rightarrow \infty \\ b_1 \rightarrow 0}} \frac{mU_1}{h^2} = \beta \eta \quad \lim_{\substack{U_1 \rightarrow \infty \\ b_1 \rightarrow 0}} \frac{mU}{h^2} b = \beta \eta \frac{P}{a}$$

con $P = \text{cte.}$

finalmente obtiene

$$e^{i\mu a} = \cos \gamma a \frac{(2A \gamma + k_1) \cos \gamma a + (2AK_1 - 2) \text{sen} \gamma a}{\cos \gamma a + k_1 \gamma \text{sen} \gamma a} \text{sen} \gamma a$$

... (8)

$$\text{donde } A = \frac{P \alpha}{a} .$$

Del análisis cualitativo de su resultado concluye:

El cambio de la constante de la red en la superficie del cristal tiene influencia, tanto en la existencia como en los valores de los estados de superficie. Al decrecer la constante de la red en la superficie del cristal influye principalmente en la existencia de los estados de superficie. El incremento de la constante de la red influencia únicamente los valores de la energía de los estados de superficie. Cuando la constante de la red aumenta, los valores de la energía de los estados de superficie disminuye. La magnitud de la barrera primera, influencia también los valores de los estados de superficie.

Para valores muy pequeños de U_1 los estados de superficie ocurren independientemente de la magnitud de la deformación de la constante de la red. Para una constante de red invariante, en la superficie del cristal, la existencia de los estados de superficie está conectado también con la deformación de la 1a. celda o con la periodicidad desde la primera celda.

Ya antes (1960) Phariseau había atacado el problema para potenciales iguales, pero relajados los primeros n átomos, de los que realmente puede abordar solo los casos $n=0$ y $n=1$ debido a la complicación matemática de su método (función de Green), obteniendo para este último caso:

$$e^{i\mu a} = \cos \gamma a + \frac{\sin \gamma b - (U - k_1) \cos \gamma b}{\cos \gamma b + (U - k_1) \sin \gamma b} \sin \gamma a \quad \dots (9)$$

en donde b es el parámetro de relajamiento.

Phariseau encuentra que la localización de los estados de superficie depende no únicamente de la profundidad del potencial, la constante de la red y la altura del potencial barrera de la superficie sino también de los desplazamientos de los primeros n átomos, es decir, de la penetración del potencial superficial hacia el cristal.

CAPITULO III

Esta sección es lo que, esencialmente, es nuevo en nuestro trabajo de tesis. Primeramente presentamos las características del modelo (forma del potencial). En seguida, usando las funciones de onda que regionalmente son solución del sistema, y, usando la hipótesis de la onda reflejada pasamos a construir la ecuación que nos da los valores propios de la energía electrónica del sistema.

El problema que nosotros hemos de abordar consiste de un cristal unidimensional, monoatómico y semi-infinito con el primer átomo relajado y su potencial cambiado, de suerte que el potencial del sistema es

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } x < 0 & V_0 > 0 \\ \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ V_1 \delta(x) + V \sum_{r=1}^{\infty} \delta(x-b_r) \right\} & \text{si } x \geq 0 & V_1, V > 0 \end{cases}$$

con $b_1 = b$ y cumpliéndose que $b_{j-1} - b_j = a$, $j = 1, 2, \dots$

Dividimos nuestro espacio en tres regiones y proponemos soluciones del tipo

$$I) \Psi_1 = A_1 e^{k_1 x} + B_1 e^{-k_1 x} \quad ; \quad k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

$$II) \Psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}$$

$$III) \Psi_3 = A_3 U(x) + B_3 U(-x)$$

Considerando únicamente la onda reflejada tenemos que

$B_1 = B_3 = 0$, quedando:

$$I) \Psi_1 = A_1 e^{k_1 x}$$

$$II) \Psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}$$

$$III) \Psi_3 = A_3 U(x)$$

Para $U(x)$ con la forma:

$$U(x) = \left\{ e^{i\mu a} \sin\left(x-b-a \frac{x-b}{a}\right) - \sin\left(x-b-a \left(1 + \frac{x-b}{a}\right)\right) \right\} e^{i\mu a \left[\frac{x-b}{a}\right]} \dots (*)$$

Por conservación del flujo de probabilidad:

$$a) \Psi_1(0) = \Psi_2(0)$$

$$A_1 = A_2 + B_2 \dots (1)$$

$$b) \Psi_2(b) = \Psi_3(b)$$

$$A_2 e^{ik_2 b} + B_2 e^{-ik_2 b} = A_3 U(b) \dots (2)$$

Calculando la respectiva discontinuidad de $\Psi'(x)$ para $x=0$ y $x=b$ por integración directa de la ecuación de Schrödinger de nuestro sistema

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \Psi(x) = 0$$

Tenemos

$$c) ik_2 (A_2 - B_2) - k_1 A_1 = -V_1 (A_2 + B_2) \dots (3)$$

$$d) A_3 U'(b) - ik_2(A_2 e^{ik_2 b} - B_2 e^{-ik_2 b}) = -A_3 VU(b) \dots (4)$$

Con esto, hemos construido un sistema de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas.

$$1.- A_1 = A_2 + B_2$$

$$2.- A_2 e^{ik_2 b} + B_2 e^{-ik_2 b} = A_3 U(b)$$

$$3.- ik_2(A_2 - B_2) - k_1 A_1 - V_1(A_2 + B_2)$$

$$4.- A_3 U'(b) - ik_2(A_2 e^{ik_2 b} + B_2 e^{-ik_2 b}) = -A_3 VU(b).$$

Resolviendo el sistema obtenemos (A):*

$$\left\{ U' \left[(V_1 - k_1) S_{bk_2} - k_2 C_{bk_2} \right] + U \left[(V_1 - k_1) S_{bk_2} + k_2 (k_1 - V_1 - V) C_{bk_2} \right] \right\} \\ \cdot (S_{bk_2} + i C_{bk_2}) = 0 \dots (5)$$

$$S_\lambda \equiv \text{sen } \lambda, \quad C_\lambda \equiv \text{cos } \lambda$$

i)

$$U' \left[(V_1 - k_1) S_{bk_2} - k_2 C_{bk_2} \right] + U \left[(V_1 - k_1) S_{bk_2} + k_2 (k_1 - V_1 - V) C_{bk_2} \right] = 0 \\ \dots (6)$$

$$ii) S_{bk_2} + i C_{bk_2} = 0$$

de (*)

$$U(b) = \text{sen } a \dots (8)$$

$$U'(b) = \gamma \left\{ e^{i\mu a} - \text{cos } a \right\} \dots (9)$$

$$e^{i\mu a} = \text{cos } a + \frac{(V_1 - V k_1 - k_2^2) S_{bk_2} + k_2 (k_1 - V_1 - V) C_{bk_2}}{\gamma [k_2 C_{bk_2} + (k_1 - V_1) S_{bk_2}]} \text{sen } a \dots (10)$$

(A)* Ver apéndice A.

por construcción $\gamma^2 = k_2^2 \quad \therefore$

$$e^{i\mu a} = \cos \gamma a + \frac{(V_1 - V k_1 - \gamma^2) S_{b\gamma} + \gamma(k_1 - V_1 - V) C_{b\gamma}}{\gamma^2 C_{b\gamma} + \gamma(k_1 - V_1) S_{b\gamma}} \sin \gamma a \quad \dots (11)$$

que es de la forma

$$e^{i\mu a} = \cos \gamma a + \rho \sin \gamma a.$$

Asumiendo que $\mu = \alpha + i\beta$, dado que ρ es real debe cumplirse que

$$\alpha = \frac{n\pi}{a} \quad \dots (12)$$

$$(-1)^n e^{-\beta a} = \cos \gamma a + \rho \sin \gamma a$$

de donde

$$(-1)^n e^{\beta a} = \frac{1}{\cos \gamma a + \rho \sin \gamma a}$$

Introduciendo la relación de Kronig-penney

$$\cos \gamma a = \cos \gamma a + \frac{V}{2\gamma} \sin \gamma a$$

Tenemos que (B):

$$\gamma^2 - \rho V + \gamma - V \cot \gamma a = 0 \quad \dots (13)$$

es nuestra ecuación de valores propios de la energía.

Ver apéndice B.

CAPITULO IV

A partir de las ecuaciones construidas en la sección anterior, aquí, desarrollamos la discusión de lo que representan frente a las ya existentes. También presentamos algunas gráficas con las que queremos hacer más patente lo que en sí es nuestro resultado.

Para poder avanzar en el análisis de nuestro resultado notemos que, (III.13) tiene la misma forma de la ecuación de valores propios de Aerts y Phariseau en particular. Por esto, es evidente que (III.13) cumple con la relación de Tamm, es decir define la existencia de estados localizados de superficie.

Véase también, que (III.13) es una expresión general de suerte que las características particulares de esos estados electrónicos están dados por las condiciones de frontera, esto es, la forma particular que adquiera ζ .

En nuestro caso

$$\zeta = \frac{(V_1 - vk_1 - \delta^2) S_{b\delta} (k_1 - V_1 - V) C_{b\delta}}{\delta^2 C_{b\delta} + \delta(k_1 - V) S_{b\delta}}$$

Antes de abordar el análisis de los resultados para esta ζ en particular, notemos que si en nuestro modelo $b = V_1 = 0$, estamos reconstruyendo las condiciones analizadas por Aerts. De aquí

$$\zeta = \frac{k_1 - V}{\delta} \quad \text{de donde (III.11) se reduce}$$

$$e^{i\mu a} = \cos \gamma a + \frac{(k_1 - V)}{\gamma} \sin \gamma a$$

que es la ecuación (II.5) que Aerts ha de combinar con la de Kroning-Penney para construir su ecuación de valores propios.

De igual manera; si $V_1 = 0$ y $b = a$

$$f = \frac{\gamma(k_1 - V)C_{\gamma a} - (Vk_1 + \gamma^2)S_{\gamma a}}{\gamma^2 C_{\gamma a} + \gamma k_1 S_{\gamma a}}$$

con lo que (III.II) nos queda

$$e^{i\mu a} = \cos \gamma a + \frac{\gamma(k_1 - V)C_{\gamma a} - (Vk_1 + \gamma^2)S_{\gamma a}}{\gamma^2 C_{\gamma a} + \gamma k_1 S_{\gamma a}} \sin \gamma a$$

Si definimos $-V = 2A$ que por construcción contiene la información del potencial en el bulto...

$$e^{i\mu a} = \cos \gamma a + \frac{\gamma(k_1 - 2A)C_{\gamma a} + (2Ak_1 - \gamma^2)S_{\gamma a}}{\gamma^2 C_{\gamma a} + \gamma k_1 S_{\gamma a}} \sin \gamma a$$

que es la ecuación (II.8) de Marfa Steslicka.

Si bien la ecuación final es la misma, en principio las restricciones que hemos introducido no reproducen su modelo inicial. Esto nos habla de al menos un error en al menos uno de los dos cálculos. Para poder ubicar en donde se encuentra este error baste poner atención en la ecuación (II.8) y ver que ésta no depende del parámetro de relajamiento b . Esta información se ha perdido en el cálculo desde el momento de tomar -- sus límites. Es ahí en donde, también, hace $V_1 = 0$.

Si tomamos $V = 0$

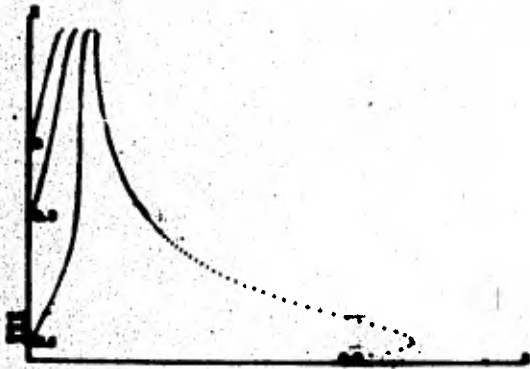
$$Z_{jua} = \cos \theta a + \frac{\gamma \sin \theta b - (V_I - k_I) \cos \theta b}{\gamma \cos \theta b + (V_I - k_I) \sin \theta b} \sin \theta a$$

Indudablemente es la ecuación (II.9) de Phariseau.

Nuevamente, la complejidad del cálculo matemático lo mete en lfos, esta vez lo lleva a "tragarse" un término. Phariseau - no puede notarlo ya que en su modelo $V_I = V$.

En resumen: (III.13) es la ecuación general de valores propios de la energía para un estado localizado de superficie. Esto en el modelo unidimensional con el potencial simulado - por deltas. Es ψ quien ha de contener la información de las - condiciones de frontera del sistema. La ecuación (III.11) con tiene como casos particulares a la mayoría (si es que no a la totalidad) de los casos existentes en la literatura y de manera inmediata confirma su veracidad, o no.

Pasamos ahora al análisis un poco más concreto de nuestro resultado. Para esto presentamos un conjunto de gráficas en el que podemos ver qué sucede con la energía de los electrones - ante la variación de los distintos parámetros.

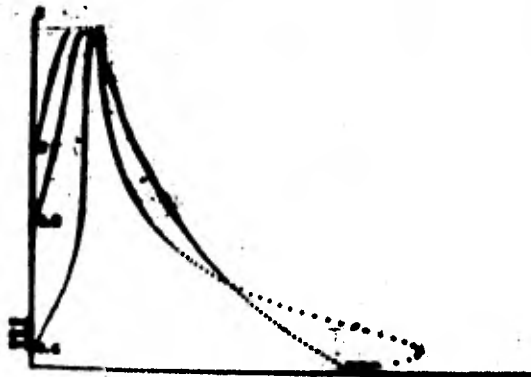


Si $U < V$ cuando E crece B crece. Hay una B máxima.

$$V = A = H = 1$$

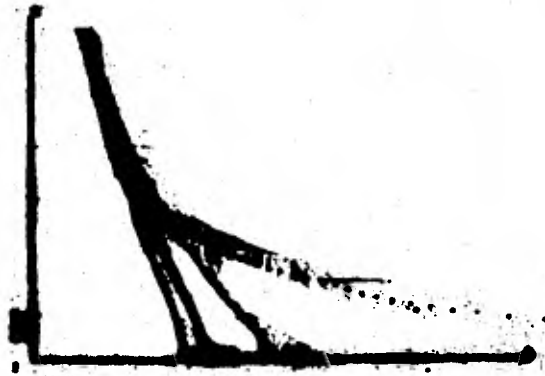
Establecido el sistema hay una $U = V$ tal que contiene la B más grande que resuelve el sistema. Esto es, independientemente de los demás parámetros B no puede crecer indefinidamente.

$$B = H = A = 1$$



Para $U > V$, si B decrece
 E crece.

$$V=A=H=1$$



$$V = 1$$

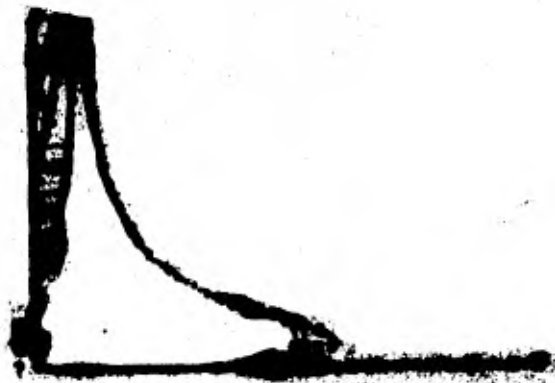
$$H = 1$$

$$A = .3$$

$$V = 1$$

$$A = .7$$

$$H = 1$$



Si el parámetro de la red a
 es de orden menor a los del
 resto de la red, los valores
 propios de la energía electro-
 nica son mayores, para una B dada.

$$\begin{aligned} V &= 1 \\ A &= 3 \\ H &= 1 \end{aligned}$$

Cuando el parámetro de la red es mayor que el conjunto de los parámetros del sistema, para una B dada los valores propios de la energía disminuyen.

$$\begin{aligned} V &= 1 \\ A &= 3 \\ H &= 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V &= 1 \\ A &= 6 \\ H &= 1 \end{aligned}$$

Conforme crece el parámetro de la red, las bandas de energía de los estados localizados se estrechan además de que decrecen en valor.

Podemos ver que en la franja que hubo solo una banda para un parámetro suficientemente grande, vemos aparecer 2, 4, etc.

$$\begin{aligned} V &= 1 \\ A &= 12 \\ H &= 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V &= .3 \\ A &= 1 \\ H &= 1 \end{aligned}$$

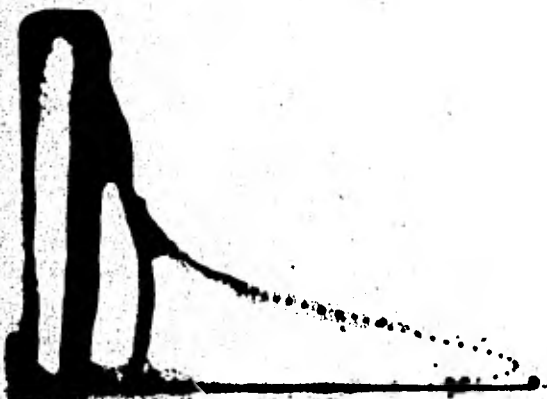
$$\begin{aligned} V &= .7 \\ A &= 1 \\ H &= 1 \end{aligned}$$

Si el potencial del bulto es muy pequeño comparado al resto de parámetros del sistema, el parámetro de relajamiento que aceptaría dicho sistema, para la existencia de estados localizados, deberá ser menor.

$$\begin{aligned} V &= 3 \\ A &= 1 \\ H &= 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V &= 3 \\ A &= 1 \\ H &= 1 \end{aligned}$$

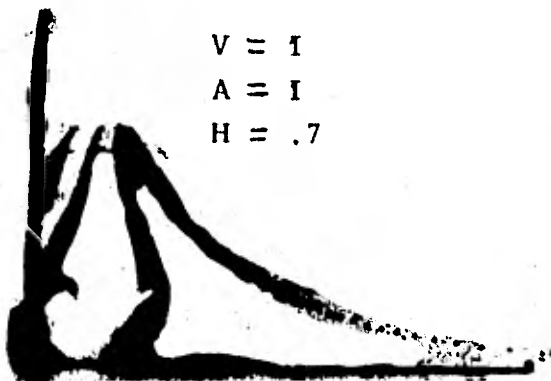
Para cuando V crece, para U dada pero pequeña, el intervalo de energías permitidas en la localización se amplía. Igualmente cambiará el intervalo de b tendiéndose a que b sea mayor en cada caso que $U \leq V$. Si $V < U$ el comportamiento será exactamente al revés.



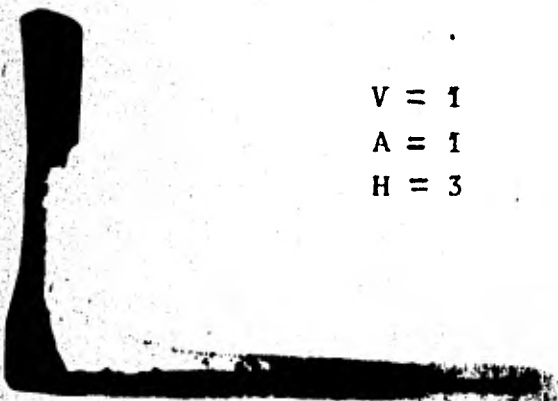
$$\begin{aligned} V &= 6 \\ A &= 1 \\ H &= 1 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} V &= 1 \\ A &= 1 \\ H &= .3 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} V &= 1 \\ A &= 1 \\ H &= .7 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} V &= 1 \\ A &= 1 \\ H &= 3 \end{aligned}$$

La altura del escalón se traduce en que, -- mientras más pequeño es H , menor es la energía del electrón al igual que la b que soluciona al sistema. Al revés, conforme H - crece aumenta la energía aunque el intervalo de valores propios sea valor el intervalo de localización del parámetro de relajamiento.

Evidentemente la constitución del sistema determina las características de los estados localizados.

Observamos a lo largo de las gráficas cual es la dependencia energética en función de los diversos parámetros.

El simplemente establecer un parámetro de relajamiento no nos determina estados localizados de superficie o subsuperficie, sino que esto está en función de la conjunción que haga con el resto del sistema.

Lo primero que hemos comentado en las gráficas es que dado un sistema, b no puede crecer arbitrariamente. Esto es comprensible ya que si el primer átomo está demasiado alejado del bulto, el efecto sobre el sistema será prácticamente nulo. Esto es comprensible ya que si el primer átomo está demasiado alejado del bulto, el efecto sobre el sistema será el de un espacio libre. Por esto veremos que al aumentar b , los estados localizados tenderán a desaparecer.

Cuando el potencial superficial es pequeño, relativo al resto de los parámetros, la energía electrónica del estado localizado será creciente como función del parámetro de relajamiento. Al contrario, si el potencial es grande la energía decrecerá.

Ambos casos se explican fácilmente. Al aumentar el potencial debe aumentar la energía del electrón para que el sistema no se colapse.

El parámetro de la red tiene una notoria influencia en el ancho de las bandas de energía. Puede observarse fácilmente,

como el crecimiento del parámetro de la red se traduce en -
bandas más estrechas y de valor energético máximo menor. Es-
to es un resultado evidente ya que al crecer el parámetro de
la red, el potencial disminuye, de suerte que las regiones -
prohibidas se angostan.

La disminución en el potencial del bulto manteniendo el pará-
metro de la red, se traduce también en un angostamiento de -
las franjas prohibidas. Esto, dado que el electrón "siente"
un potencial más débil. No obstante, la proporcionalidad en-
tre la profundidad de los pozos del bulto con el de la super-
ficie y la magnitud del escalón.

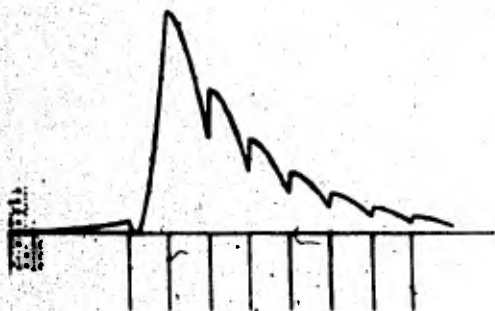
A partir de esa relación se establece la posibilidad de que,
si bien el ancho de la banda prohibida es menor, cabe la po-
sibilidad de un valor propio de la energía electrónica mayor.

Una forma adicional de angostar la banda prohibida es dismi-
nuyendo el escalón. Al disminuir el escalón, disminuye el va-
lor de la energía del estado localizado. El crecimiento del
escalón, relativamente se traduce en un sentimiento menor po-
tencial con la salvedad de que se admiten energías mayores.

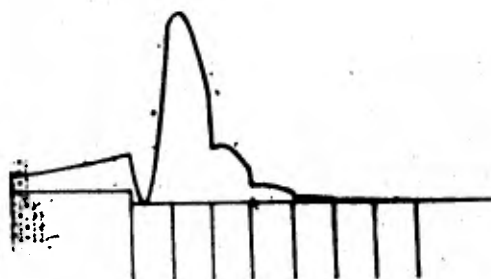
Si bien gráficamente hemos determinado las raíces de la ener-
gía que satisface nuestra ecuación de valores propios, por -
último nos falta corroborar el que estas raíces cumplan con
nuestras condiciones en la frontera, particularmente nos fal-
ta corroborar la continuidad de Ψ en el espacio.

Además de constatar el cumplimiento de las condiciones en la frontera, al graficar la densidad de la probabilidad (Ψ^2) podemos apreciar el comportamiento de la localización como función de los distintos parámetros del sistema.

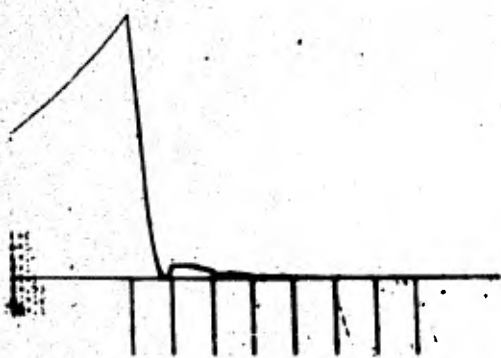
A continuación presentamos algunas de estas gráficas.



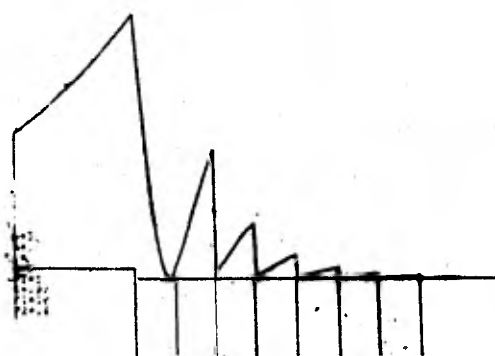
$$\begin{array}{ll} V = 1 & B = 1 \\ A = 1 & H = 1 \\ U = 6 & E = .86 \end{array}$$



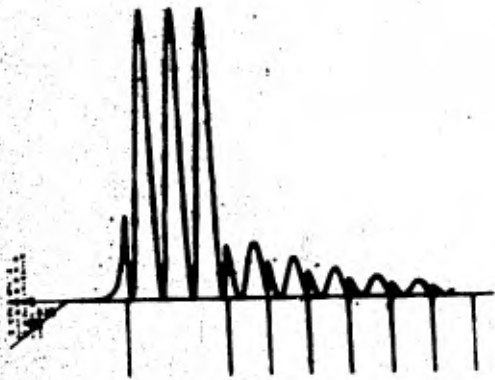
$$\begin{array}{ll} V = 1 & B = 1 \\ A = 1 & H = 1 \\ U = 3 & E = .99 \end{array}$$



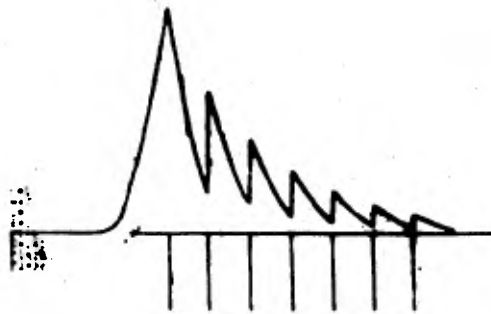
$$\begin{array}{ll} V = 6 & B = 1 \\ A = 1 & H = 1 \\ U = 1 & E = .99 \end{array}$$



$$\begin{array}{ll} V = 3 & B = 1 \\ A = 1 & H = 1 \\ U & E = .99 \end{array}$$



$$\begin{array}{ll} V = 5 & B = 5 \\ A = 2 & H = 5 \\ U = 5 & E = 2.085 \end{array}$$



$$\begin{array}{ll} V = 1 & B = 1 \\ A = 1 & H = 6 \\ U = 1 & E = .41 \end{array}$$

Con esto concluimos este trabajo en el que hemos mostrado la enorme simplicidad del método de la onda reflejada. Como consecuencia de esta simplicidad se ha presentado un cúmulo de gráficas que puede ser fácilmente incrementado desde muchos puntos de vista dependiendo de qué es lo que se quiere extraer de los resultados.

Igualmente, se ha mostrado la fundamental dependencia del número y energía de los estados localizados como función del parámetro de relajamiento. Hemos mostrado, además, el que todos nuestros resultados cumplen con las condiciones de frontera que les hemos impuesto, particularmente la de continuidad.

APENDICE A.

Tenemos el sistema:

1.- $A_I = A_2 + B_2$

2.- $A_2 e^{ik_2 b} + B_2 e^{-ik_2 b} = A_3 U(b)$

3.- $ik_2(A_2 - B_2) - k_I A_I = -V_I(A_2 + B_2)$

4.- $A_3 U'(b) - ik_2(A_2 e^{ik_2 b} - B_2 e^{-ik_2 b}) = -A_3 VU(b)$

de (2) $A_3 = \frac{A_2}{U} e^{ik_2 b} + \frac{B_2}{U} e^{-ik_2 b} \dots (5)$

de (4) $A_3(U' + VU) = ik_2(A_2 e^{ik_2 b} - B_2 e^{-ik_2 b})$

$$\Rightarrow A_3 = \frac{ik_2}{U' + VU} \{A_2 e^{ik_2 b} - B_2 e^{-ik_2 b}\}$$

Igualando a (5)

$$\frac{A_2}{U} e^{ik_2 b} + \frac{B_2}{U} e^{-ik_2 b} = \frac{ik_2}{U' + VU} \{A_2 e^{ik_2 b} - B_2 e^{-ik_2 b}\}$$

$$\Rightarrow A_2 e^{ik_2 b} \left\{ \frac{1}{U} - \frac{ik_2}{U' + VU} \right\} = -B_2 e^{-ik_2 b} \left\{ \frac{1}{U} + \frac{ik_2}{U' + VU} \right\}$$

$$A_2 e^{ik_2 b} (U' + VU - ik_2 U) = -B_2 e^{-ik_2 b} (U' + VU + ik_2 U)$$

$$\therefore A_2 = -B_2 e^{-2ik_2 b} \left\{ \frac{U' + UV + ik_2 U}{U' + UV - ik_2 U} \right\} \dots (6)$$

Por simplicidad tomaremos

$$\lambda = \frac{U' + UV + ik_2}{U' + UV - ik_2}$$

Introduciendo (6) en (1) obtenemos

$$A_1 = B_2 \left\{ 1 - \lambda e^{-2ik_2 b} \right\} \dots (7)$$

de (3)

$$A_2(V_1 + ik_2) + B_2(V_1 - ik_2) - k_1 A_1 = 0$$

introduciendo (6) y (7)

$$B_2 \left\{ (V_1 - ik_2) - (V_1 + ik_2) \lambda e^{-2ibk_2} - k_1 + k_1 \lambda e^{-2ibk_2} \right\} = 0$$

$$B_2 \left\{ V_1 - k_1 - ik_2 + \lambda [k_1 - (V_1 + ik_2)] e^{-2ibk_2} \right\} = 0$$

Asumiendo que $B_2 \neq 0$

$$\Rightarrow V_1 - k_1 - ik_2 + \lambda [k_1 - (V_1 + ik_2)] e^{-2ibk_2} = 0 \dots (9)$$

$$(V_1 - k_1 - ik_2) [U' + UV - ik_2 U] + [U' + UV + ik_2 U] (k_1 - V_1 - ik_2) e^{-2ibk_2} = 0$$

de donde:

$$(U'+UV) [v_1 - k_1] - Uk_2^2 + i \left\{ Uk_2(k_1 - v_1) - k_2(U' + vU) \right\} + \\ + e^{-2ibk_2} \left((U'+UV) [k_1 - v_1] + Uk_2^2 + i \left\{ Uk_2 [k_1 - v_1] - k_2 (U'+UV) \right\} \right) = 0$$

tomando

$$e^{-2ibk_2} = (C_{bk_2} - iS_{bk_2})^2 = 2C_{bk_2}^2 - 1 - 2iC_{bk_2}S_{bk_2}$$

donde $C_\lambda \equiv \cos \lambda$; $S_\lambda \equiv \sin \lambda$

(9) nos queda como

$$(U'+UV) [v_1 - k_1] - Uk_2^2 + ik_2 \left\{ U [k_1 - v_1] - (U'+vU) \right\} - \\ - \left\{ (U'+UV) [k_1 - v_1] + Uk_2^2 + ik_2 [U(k_1 - v_1) - (U'+UV)] \right\} + \\ + \left\{ (U'+UV) [k_1 - v_1] + Uk_2^2 + ik_2 [U(k_1 - v_1) - (U'+vU)] \right\} \cdot \\ \cdot 2 (C_{bk_2}^2 - iC_{bk_2}S_{bk_2}) = 0$$

$$\Rightarrow \left\{ (U'+UV) [k_1 - v_1] + Uk_2^2 + ik_2 [U(k_1 - v_1) - (U'+UV)] \right\} \cdot$$

$$\cdot (C_{bk_2}^2 - iC_{bk_2}S_{bk_2}) + (U'+UV) [v_1 - k_1] - Uk_2^2 = 0$$

$$\begin{aligned} & (U'+UV) [v_1 - k_1] - Uk_2^2 + \left\{ (U'+UV) [k_1 - v_1] + Uk_2^2 \right\} C_{bk}^2 + \\ & + k_2 \left[U(k_1 - v_1) - (U'+UV) \right] C_{bk_2} S_{bk_2} + i \left\{ \left[(k_2 U(k_1 - v_1) - k_2 (U'+UV)) \right] C_{bk_2}^2 - \right. \\ & \left. \left[(U'+UV)(k_1 - v_1) + Uk_2^2 \right] C_{bk_2} S_{bk_2} \right\} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow & U' \left\{ v_1 - k_1 + (k_1 - v_1) C_{bk_2}^2 - k_2 C_{bk_2} S_{bk_2} \right\} + U \left\{ v(v_1 - k_1) - k_2^2 + \right. \\ & \left. + v(k_1 - v_1) C_{bk_2}^2 + \frac{k_2^2 C_{bk_2}^2}{2} + k_2 (k_1 - v_1) C_{bk_2} S_{bk_2} - k_2 v C_{bk_2} S_{bk_2} \right\} + \\ & + i \left\{ U' \left[(v_1 - k_1) C_{bk_2} S_{bk_2} - k_2 C_{bk_2}^2 \right] + U \left(\left[k_2 (k_1 - v_1) - k_2 v \right] C_{bk_2}^2 - \right. \right. \\ & \left. \left. - \left[v(k_1 - v_1) + k_2^2 \right] C_{bk_2} S_{bk_2} \right) \right\} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow & U' \left\{ (v_1 - k_1) S_{bk_2}^2 - k_2 C_{bk_2} \right\} + U \left\{ \left[v(v_1 - k_1) - k_2^2 \right] S_{bk_2}^2 + \right. \\ & \left. + k_2 (k_1 - v_1 - v) C_{bk_2} S_{bk_2} \right\} + i \left\{ U' \left[(v_1 - k_1) C_{bk_2} S_{bk_2} - k_2 C_{bk_2}^2 \right] + \right. \\ & \left. + U \left[k_2 (k_1 - v_1 - v) C_{bk_2}^2 + (v [v_1 - k_1] - k_2^2) C_{bk_2} S_{bk_2} \right] \right\} = 0 \end{aligned}$$

$$\therefore \left\{ U' \left[(v_1 - k_1) S_{bk_2} - k_2 C_{bk_2} \right] + U \left[(v [v_1 - k_1] - k_2^2) S_{bk_2} + \right. \right. \\ \left. \left. + k_2 (k_1 - v_1 - v) C_{bk_2} \right] \right\} (S_{bk_2} + i C_{bk_2}) = 0$$

APENDICE B.

Tomando la relación de Kroning-Penney.

$$\cos \mu a = \cos \gamma a + \frac{V}{2\delta} \operatorname{sen} \gamma a$$

$$\Rightarrow \operatorname{sen} \mu a = \left[1 - \left(C_{\gamma a} + \frac{V}{2\delta} S_{\gamma a} \right)^2 \right]^{1/2}$$

en donde

$$e^{i\mu a} = \cos \mu a + i \operatorname{sen} \mu a$$

$$= C_{\gamma a} + \frac{V}{2\delta} S_{\gamma a} + i \left(1 - \left[C_{\gamma a} + \frac{V}{2\delta} S_{\gamma a} \right]^2 \right)^{1/2}$$

Retomando (III.II) con la forma

$$e^{i\mu a} = C_{\gamma a} + \mathcal{P} S_{\gamma a}$$

se cumple

$$C_{\gamma a} + \frac{V}{2\delta} S_{\gamma a} + i \left(1 - \left[C_{\gamma a} + \frac{V}{2\delta} S_{\gamma a} \right]^2 \right)^{1/2} = C_{\gamma a} + \mathcal{P} S_{\gamma a}$$

$$\Rightarrow \mathcal{P} S_{\gamma a} = \frac{V}{2\delta} S_{\gamma a} + i \left[1 - \left(C_{\gamma a}^2 + \frac{V^2}{4\delta^2} S_{\gamma a}^2 + \frac{V}{\delta} C_{\gamma a} S_{\gamma a} \right) \right]^{1/2}$$

$$= \frac{V}{2\delta} S_{\gamma a} + i \left[S_{\gamma a}^2 - \frac{V^2}{4\delta^2} S_{\gamma a}^2 - \frac{V}{\delta} C_{\gamma a} S_{\gamma a} \right]^{1/2}$$

$$\left(\mathcal{E} - \frac{V}{2\mathcal{E}}\right) S_{\theta a} = i \left[\left(1 - \frac{V^2}{4\mathcal{E}^2}\right) S_{\theta a}^2 - \frac{V}{\mathcal{E}} C_{\theta a} S_{\theta a} \right]^{1/2}$$

de donde

$$\left(\mathcal{E} - \frac{V}{2\mathcal{E}}\right)^2 S_{\theta a}^2 = \left(\frac{V^2}{4\mathcal{E}^2} - 1\right) S_{\theta a}^2 + \frac{V}{\mathcal{E}} C_{\theta a} S_{\theta a}$$

$$\left(\mathcal{E} - \frac{V}{2\mathcal{E}}\right)^2 + \left(1 - \frac{V^2}{4\mathcal{E}^2}\right) = \frac{V}{\mathcal{E}} \cot \theta a$$

$$\frac{(2\mathcal{E}\mathcal{E} - V)^2}{4\mathcal{E}} + \frac{4\mathcal{E}^2 - V^2}{4\mathcal{E}^2} = \frac{V}{\mathcal{E}} \cot \theta a$$

$$(2\mathcal{E}\mathcal{E} - V)^2 + 4\mathcal{E}^2 - V^2 = 4\mathcal{E}V \cot \theta a$$

$$\Rightarrow 4\mathcal{E}^2 \mathcal{E}^2 + V^2 - 4\mathcal{E}\mathcal{E}V + 4\mathcal{E}^2 - V^2 = 4\mathcal{E}V \cot \theta a$$

$$\Rightarrow 4\mathcal{E}^2 \mathcal{E}^2 - 4\mathcal{E}\mathcal{E}V + 4\mathcal{E}^2 = 4\mathcal{E}V \cot \theta a$$

$$\therefore \mathcal{E} \mathcal{E}^2 - \mathcal{E}V + \mathcal{E} - V \cot \theta a = 0$$

Es nuestra ecuación de valores propios de la energía.

REFERENCIAS.

- 1.- Aerts, E., *Physica* 26 (1960), 1047-1056.
- 2.- Steslička, M. & Wojciechowski, F.,
Physica 32 (1966), 1274-1282.
- 3.- Phariseau, P., *Physica* 26 (1960), 1192-1200.
- 4.- Meijer, P., *Physica* 79B (1975), 215-229.

REFERENCIAS ADICIONALES.

- 5.- Saxon, D. & Hutner, R.,
Philips es. Rep. 4 (1949), 81-122.
- 6.- Henzler, M., *Surf. Sci.* 25 (1975), 650-680.
- 7.- Velázquez, J. M., Tesis Profesional, Fac. de Ciencias
UNAM.
- 8.- Andrade, L. & Uribe, E.,
Bull. Am. Phys. Soc. 21 (1976), 809.
- 9.- Orozco, S., Terrazas, J. M. & Andrade, L.,
Bol. Soc. Mex. Fis., 3 (1978), 94.
- 10.- Koutečky, J., *Phys. Rev.* 108 (1957), I.
- 11.- Aldana, A. & Andrade, L. Fac. de Ciencias, UNAM.
Reporte interno (1981), todavía no publicado.
- 12.- Mckelvey, J., Física del estado sólido, Ed. Limusa.
México, 1976.