



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS



Problema de Sturm-Liouville en la Física de la Materia Condensada actual



Rolando Pérez Álvarez, Miladys Despaigne Rosell
y Oscar E. Nazario Sánchez

Centro de Investigación en Ciencias-IICBA,
Universidad Autónoma del Estado de Morelos

rpa@uaem.mx

Índice

1. 180 años del problema de Sturm y Liouville.
2. Sistemas a capas; excitaciones y problemas.
3. Difusión en sistemas anisótropos e inhomogéneos.
4. Teoría de masa efectiva en sistemas anisótropos e inhomogéneos.
5. Modelo Fenomenológico completo para los modos ópticos polares.
6. Excitaciones magnetoeléctricas.
7. ¿Hace falta una generalización del problema de SL?
8. Conclusiones y comentarios.

EXTRAIT

D'un Mémoire sur le développement des fonctions en séries dont les différents termes sont assujettis à satisfaire à une même équation différentielle linéaire, contenant un paramètre variable;

PAR MM. C. STURM ET J. LIOUVILLE.

Soient x une variable indépendante comprise entre deux limites données x , X ; g , k , l trois fonctions positives de x ; r un paramètre indéterminé; et V une fonction de x et de r , qui satisfasse à la fois à l'équation indéfinie

$$(1) \quad \frac{d\left(k\frac{dV}{dx}\right)}{dx} + (gr - l)V = 0,$$

et à la condition définie

$$(2) \quad \frac{dV}{dx} - hV = 0 \quad \text{pour} \quad x = x,$$

dans laquelle h représente un nombre donné positif. Il est aisé de trouver une fonction V qui vérifie ces deux équations et qui ne devienne identiquement nulle pour aucune valeur déterminée de r , lorsque x reste indéterminée. On s'est beaucoup occupé des propriétés de la fonction V dans différents mémoires auxquels nous renverrons le lecteur¹.

[1] C. Sturm and J. Liouville. « Extrait d'un mémoire sur le développement des fonctions en séries dont les différents termes sont assujettis à satisfaire à une même équation différentielle linéaire, contenant un paramètre variable. » french. In: *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées* (1837), pp. 220-222.

url: <http://eudml.org/doc/235395>.

[2] J. Liouville. « Second Mémoire sur le développement des fonctions ou parties de fonctions en séries dont les divers termes sont assujettis à satisfaire à une même équation différentielle du second ordre, contenant un paramètre variable. » fre. In: *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées* (1837), pp. 16-35.

url: <http://eudml.org/doc/235133>.

[3] J. Liouville. « Troisième mémoire sur le développement des fonctions ou parties de fonctions en séries dont les divers termes sont assujettis à satisfaire à une même équation différentielle du second ordre, contenant un paramètre variable. » fre. In: *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées* (1837), pp. 418-436.

url: <http://eudml.org/doc/233892>

[4] Anton Zettl. *Sturm-Liouville Theory*. Mathematical Surveys and Monographs, 2005. isbn: 0-8218-3905-5 (alk. paper).
doi: <http://dx.doi.org/10.1090/surv/121>.

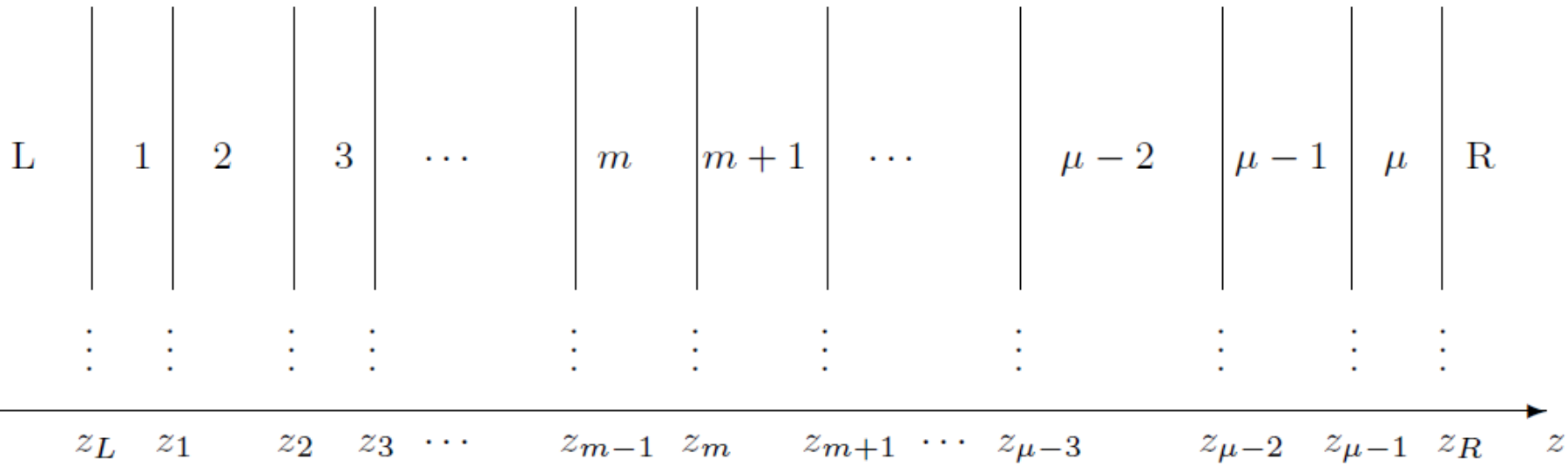
[5] W. Norrie Everitt. “A Catalogue of Sturm-Liouville Differential Equations”.
In: *Sturm-Liouville Theory: Past and Present*. Ed. by Werner O. Amrein, Andreas M. Hinz, and David P. Pearson. Basel: Birkauer Basel, 2005, pp. 271-331. isbn: 978-3-7643-7359-7.
doi: 10.1007/3-7643-7359-8_12
url: http://dx.doi.org/10.1007/3-7643-7359-8_12



Def.	Ecuación	Intervalo	Condi- ción sobre p	Condi- ción sobre q	Condición sobre w	Enfo- que de autova- lores	Ref.
1	$\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{dy}{dx} \right) + q(x)y + \lambda w(x)y = 0$	$a \leq x \leq b$	Real, continua, positiva y con derivada continua.	Real y continua	Real, continua y positiva.	no	[1]
2	$\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{dy}{dx} \right) + q(x)y + \lambda w(x)y = 0$	$a < x < b$	continua y positiva.	continua	continua y positiva.	si	[2]
3	$\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{dy}{dx} \right) + q(x)y + \lambda w(x)y = 0$	$a < x < b$	Real, continua, positiva y con derivada continua.	Real y continua	Real, continua y positiva.	si	[3], [16]
4	$\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{dy}{dx} \right) + q(x)y - \lambda w(x)y = 0$	$a \leq x \leq b$	Real	Real	Real	si	[4]
5	$\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{dy}{dx} \right) - q(x)y + \lambda w(x)y = 0$	$a \leq x \leq b$	continua, positiva y con derivada continua.	continua	continua y positiva.	si	[5], [9]

Probablemente lo más importante es que suceda lo siguiente:

$$\langle \hat{L}f | g \rangle = \langle f | \hat{L}g \rangle + [p (g f' - f g')]_a^b$$



Forma general de una heteroestructura con capas extremas L (izquierda), R (derecha) y desde 1 hasta μ son las distintas capas intermedias entre z_L y z_R . A menos que se indique otra cosa, la capa L va de $-\infty$ a z_L mientras que R va de z_R a $+\infty$. $z_0 \equiv z_L$ y $z_\mu \equiv z_R$.

$$\mathbf{F}(\vec{r}, t) = \mathbf{F}(z) e^{i(\vec{\kappa} \cdot \vec{\rho} - \omega t)}$$

$$\vec{\kappa} = \kappa_x \vec{e}_x + \kappa_y \vec{e}_y$$

$$\vec{\rho} = x \vec{e}_x + y \vec{e}_y .$$

Excitaciones:

1. Elásticas
2. Oscilaciones ópticas
3. ...
4. Electromagnéticas
5. Piezoeléctricas
6. Piezomagnéticas
7. En materiales
bianisotrópicos
8. ...
9. Teoría de Masa Efectiva
10. Teoría de Funciones
Envolvertes
11. Pseudopotenciales
12.
13. Excitaciones
superconductoras
14.

Problemas:

1. Barreras infinitas
2. Extremos libres
3. Condiciones de Bloch
4. ...
5. Escape
6. Captura
7. Regularidad en el
infinito
8. ...

Nosotros nos permitimos escribir la ecuación original y la muestra con las siguientes notaciones y cambios

$$\frac{d}{dz} \left(B(z) \frac{dF(z)}{dz} \right) + W(z)F(z) = 0$$
$$\frac{d}{dz} \left(B(z) \frac{dF(z)}{dz} + P(z)F(z) \right) + Y(z) \frac{dF(z)}{dz} + W(z)F(z) = 0$$

En lugar de V , estamos denotando F a la función incógnita. El lugar de k en la ecuación como la escribieron Sturm y Liouville ahora lo tiene $B(z)$. Aparecen $P(z)$ y $Y(z)$, y $W(z)$ contiene a $gr - l$. Probablemente lo más importante en esta pequeña generalización de la ecuación de SL que se estudia es la presencia de las funciones $P(z)$ y $Y(z)$. En una cantidad significativa de casos $P(z) = Y(z) = 0$ o las funciones son muy bien comportadas y $P(z) + Y(z) = 0$, con lo cual la ecuación muestra se reduce a la clásica con una maniobra algebraica sencilla.

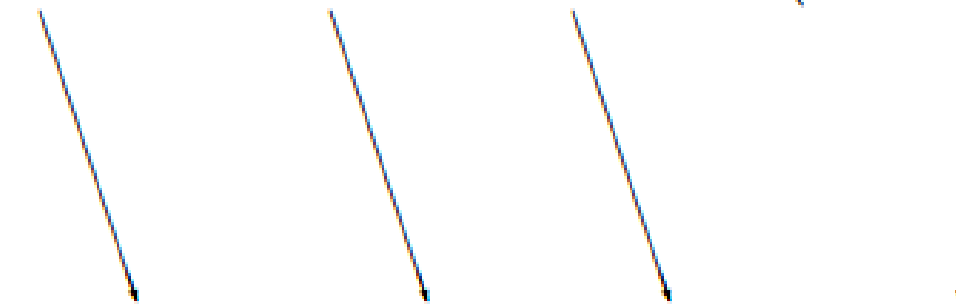
Difusión en sistemas anisótropos e inhomogéneos

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\vec{D}(\vec{r}) \cdot \nabla u(\vec{r}, t) \right)$$

$$u(\vec{r}, t) = F(z) e^{i\vec{\kappa} \cdot \vec{\rho}} T(t)$$

$$\vec{a} = (D_{31}(z), D_{32}(z), D_{33}(z)) \quad ; \quad \vec{b} = (D_{13}(z), D_{23}(z), D_{33}(z))$$

$$\frac{d}{dz} \left[D_{33}(z) \frac{dF(z)}{dz} + i(\vec{\kappa} \cdot \vec{a}) F(z) \right] + i(\vec{\kappa} \cdot \vec{b}) \frac{dF(z)}{dz} - \left(\vec{\kappa} \cdot \vec{D}(z) \cdot \vec{\kappa} - \lambda \right) F(z) = 0$$



$$\frac{d}{dz} \left[B(z) \frac{dF(z)}{dz} + P(z) F(z) \right] + Y(z) \frac{dF(z)}{dz} + W(z) F(z) = 0$$

$$B = B^\dagger \quad ; \quad P = -Y^\dagger \quad ; \quad W = W^\dagger$$

Teoría de masa efectiva en sistemas anisótropos e inhomogéneos

$$\frac{1}{2}\hat{\vec{p}} \cdot [\vec{\nu}(\vec{r}) \cdot \hat{\vec{p}}F(\vec{r})] + (V(\vec{r}) - E)F(\vec{r}) = 0$$

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla \quad ; \quad \vec{\nu}(\vec{r}) = [\vec{\mu}(\vec{r})]^{-1}$$

$$F(\vec{r}) = F(z) e^{i\vec{\kappa} \cdot \vec{\rho}}$$

$$\vec{a} = (\nu_{31}(z), \nu_{32}(z), \nu_{33}(z)) \quad ; \quad \vec{b} = (\nu_{13}(z), \nu_{23}(z), \nu_{33}(z))$$

$$\frac{d}{dz} \left[\nu_{33}(z) \frac{dF(z)}{dz} - i(\vec{\kappa} \cdot \vec{a})F(z) \right] - i(\vec{\kappa} \cdot \vec{b}) \frac{dF(z)}{dz} - \left(\vec{\kappa} \cdot \vec{\nu}(z) \cdot \vec{\kappa} - \frac{V(z)-E}{\hbar^2} \right) F(z) = 0$$

$$\frac{d}{dz} \left[B(z) \frac{dF(z)}{dz} + P(z)F(z) \right] + Y(z) \frac{dF(z)}{dz} + W(z)F(z) = 0$$

$$B = B^\dagger \quad ; \quad P = -Y^\dagger \quad ; \quad W = W^\dagger$$

Modelo Fenomenológico Completo para excitaciones ópticas polares

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) \cdot \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) + \frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \varphi +$$
$$\frac{1}{2} (\nabla \varphi) \cdot \boldsymbol{\delta} \cdot (\nabla \varphi) + \frac{1}{8\pi} (\nabla \varphi) \cdot (\nabla \varphi) + \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}) : \boldsymbol{\lambda} : (\nabla \mathbf{u})$$
$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\lambda} : \nabla \mathbf{u} \quad \text{Hooke}$$

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \varphi + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0$$
$$\nabla \cdot \left(-\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\delta} \cdot \nabla \varphi + \frac{1}{4\pi} \nabla \varphi \right) = 0$$

En medios isótropos e inhomogéneos con dependencias en z de los parámetros ... se desacopla el modo TH (Transversal Horizontal) y para los modos sagitales queda:

$$\frac{d}{dz} \left[B(z) \frac{dF(z)}{dz} + P(z) F(z) \right] + Y(z) \frac{dF(z)}{dz} + W(z) F(z) = 0$$

$$\mathbf{B}(z) = \begin{pmatrix} \rho\beta_T^2 & 0 & 0 \\ 0 & \rho\beta_L^2 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\epsilon_\infty}{4\pi} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{P}(z) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ i\kappa\rho(\beta_L^2 - \beta_T^2) & 0 & \alpha \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{Y}(z) = \begin{pmatrix} 0 & i\kappa\rho(\beta_L^2 - \beta_T^2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{W}(z) = \begin{pmatrix} -\rho[(\omega^2 - \omega_T^2) + \kappa^2\beta_L^2] & -i\kappa(\rho\beta_T^2) & i\kappa\alpha \\ i\kappa(\rho\beta_T^2) & -\rho[(\omega^2 - \omega_T^2) + \kappa^2\beta_T^2] & -\alpha' \\ -i\kappa\alpha & -\alpha' & -\frac{\epsilon_\infty}{4\pi}\kappa^2 \end{pmatrix}$$

$$B = B^\dagger; \quad P = -Y^\dagger; \quad W = W^\dagger$$

Materiales no polares $\Leftrightarrow \alpha = 0$

Modos acústicos $\Leftrightarrow \beta_T = iv_T; \beta_L = iv_L; \omega_T = \omega_L = 0$

Materiales bianisotrópicos

$$\begin{aligned}\vec{D} &= \vec{\epsilon} \cdot \vec{E} + \vec{\chi} \cdot \vec{B} \\ \vec{H} &= \vec{\xi} \cdot \vec{E} + \vec{\nu} \cdot \vec{B}\end{aligned}$$

El óxido de cromo antiferromagnético es un ejemplo (Astrov, 1960). Dzyalozhinskii en 1960 propuso

$$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$$

para las cuatro matrices involucradas.

Tellegen estudió otros sistemas donde las cuatro matrices son escalares y $\chi = \xi$ con $\chi^2 \simeq \epsilon\mu$.

Estudios específicos de propagación de ondas en una subclase de medios bianisotrópicos se pueden encontrar en los trabajos de Chen et al de 2013 y de Chang et al de 2014. En este caso, la estructura de estos tensores es

$$\begin{aligned}\vec{\epsilon} &= \begin{pmatrix} \epsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_z \end{pmatrix} ; & \vec{\mu} &= \begin{pmatrix} \mu_x & 0 & 0 \\ 0 & \mu_y & 0 \\ 0 & 0 & \mu_z \end{pmatrix} \\ \vec{\chi} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{23} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} ; & \vec{\xi} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & \xi_{32} & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

$$\vec{\epsilon} = \vec{\epsilon}(z); \vec{\chi} = \vec{\chi}(z)$$

$$\vec{\xi} = \vec{\xi}(z); \vec{\nu} = \vec{\nu}(z)$$

$$\nabla \cdot (\vec{\epsilon} \cdot \vec{E} + \vec{\chi} \cdot \vec{B}) = \rho_f$$

$$\nabla \times (\vec{\xi} \cdot \vec{E} + \vec{\nu} \cdot \vec{B}) = \vec{j}_f + \frac{\partial (\vec{\epsilon} \cdot \vec{E} + \vec{\chi} \cdot \vec{B})}{\partial t}$$

$$\vec{E} = -\nabla\phi + C_4 \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

$$\vec{H} = \nabla \times \vec{A}$$

$$\phi(\vec{r}, t) = \phi(z) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}(z) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

Para aligerar la carga de índices y en general las notaciones definamos

$$\alpha_{jmn} = \chi_{jk} e_{kmn}$$

$$\beta_{ijm} = e_{ijk} \xi_{km}$$

$$\gamma_{ijmn} = e_{ijk} \nu_{kl} e_{lmn}$$

$$\mathbf{F}(z) = (F_1, F_2, F_3, F_4)^t = (\phi, A_1, A_2, A_3)^t$$

•
•
•

$$\frac{d}{dz} \left(\mathbf{B}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{P}(z) \cdot \mathbf{F}(z) \right) + \mathbf{Y}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{W}(z) \cdot \mathbf{F}(z) = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{B}(z) = \mathbf{B} \left(\vec{\epsilon}(z), \vec{\nu}(z), \vec{\xi}(z), \vec{\chi}(z) \right)$$

$$\mathbf{P}(z) = \mathbf{P} \left(\vec{\epsilon}(z), \vec{\nu}(z), \vec{\xi}(z), \vec{\chi}(z) \right)$$

$$\mathbf{Y}(z) = \mathbf{Y} \left(\vec{\epsilon}(z), \vec{\nu}(z), \vec{\xi}(z), \vec{\chi}(z) \right)$$

$$\mathbf{W}(z) = \mathbf{W} \left(\vec{\epsilon}(z), \vec{\nu}(z), \vec{\xi}(z), \vec{\chi}(z) \right)$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} -\epsilon_{zz} & \alpha_{zz1} & \alpha_{zz2} & \alpha_{zz3} \\ -\beta_{1zz} & \gamma_{1zz1} & \gamma_{1zz2} & \gamma_{1zz3} \\ -\beta_{2zz} & \gamma_{2zz1} & \gamma_{2zz2} & \gamma_{2zz3} \\ -\beta_{3zz} & \gamma_{3zz1} & \gamma_{3zz2} & \gamma_{3zz3} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}^\dagger$$

$$\mathbf{P} = -\mathbf{Y}^\dagger$$

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}^\dagger$$

Ubicuidad del problema de Sturm-Liouville matricial

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\rho} \cdot \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{F} + \frac{1}{2} \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{F} \\ + \frac{1}{2} \nabla \mathbf{F} : \boldsymbol{\lambda} : \nabla \mathbf{F} + \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\mu} : \nabla \mathbf{F} + \nabla \mathbf{F} : \boldsymbol{\chi} \cdot \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} .$$

Caso	$\boldsymbol{\rho}$	$\boldsymbol{\Omega}$	$\boldsymbol{\gamma}$	$\boldsymbol{\lambda}$	$\boldsymbol{\mu}$	$\boldsymbol{\chi}$
Elasticidad	$\neq 0$	$= 0$	$= 0$	$\neq 0$	$= 0$	$= 0$
Modelo Fenomenológico Completo	$\neq 0$	$= 0$	$\neq 0$	$\neq 0$	$\neq 0$	$= 0$
Electromagnetismo	$\neq 0$	$= 0$	$= 0$	$\neq 0$	$= 0$	$\neq 0$

$$\frac{d}{dz} \left[\mathbf{B}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{P}(z) \cdot \mathbf{F}(z) \right] + \mathbf{Y}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{W}(z) \cdot \mathbf{F}(z) = \mathbf{0} .$$

$$\begin{aligned}
 B_{\nu\alpha} &= \frac{1}{2}(\lambda_{3\nu 3\alpha} + \lambda_{3\alpha 3\nu}) , \\
 P_{\nu\alpha} &= \frac{1}{2} \sum_i^2 i \kappa_i (\lambda_{3\nu i\alpha} + \lambda_{i\alpha 3\nu}) + \mu_{\alpha 3\nu} - i\omega \chi_{3\nu\alpha} , \\
 Y_{\nu\alpha} &= \frac{1}{2} \sum_k^2 i \kappa_k (\lambda_{k\nu 3\alpha} + \lambda_{3\alpha k\nu}) - \mu_{\nu 3\alpha} - i\omega \chi_{3\alpha\nu} , \\
 W_{\nu\alpha} &= -\frac{1}{2} \sum_k^2 \sum_i^2 \kappa_k \kappa_i (\lambda_{k\nu i\alpha} + \lambda_{i\alpha k\nu}) \\
 &\quad + i \sum_k^2 \kappa_k \mu_{\alpha k\nu} - i \sum_j^2 \kappa_j \mu_{\nu j\alpha} \\
 &\quad - \frac{1}{2} \omega^2 (\rho_{\nu\alpha} + \rho_{\alpha\nu}) - \frac{1}{2} (\gamma_{\nu\alpha} + \gamma_{\alpha\nu}) \\
 &\quad + \omega \sum_i^2 \kappa_i \chi_{i\alpha\nu} + \omega \sum_k^2 \kappa_k \chi_{k\nu\alpha} + \frac{1}{2} i\omega (\Omega_{\alpha\nu} - \Omega_{\nu\alpha})
 \end{aligned}$$

¿Hace falta una generalización del problema de SL?

$$\frac{d}{dz} \left[\mathbf{B}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{P}(z) \cdot \mathbf{F}(z) \right] + \mathbf{Y}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{W}(z) \cdot \mathbf{F}(z) = \mathbf{0} .$$

Conclusiones y comentarios

- El problema de Sturm-Liouville aparece de manera persistente en el amplio mundo de las excitaciones elementales en medios no homogéneos.
- Hay que hacer una pequeña generalización al problema planteado por Sturm y Liouville en 1837. Cobra relevancia la forma lineal $\mathbf{A} = \mathbf{B}\mathbf{F}' + \mathbf{P}\mathbf{F}$.
- El operador de Sturm-Liouville es hermiteano para varias condiciones de contorno físicamente muy significativas. Excepción de lo anterior son los problemas de captura, escape y regularidad en el ∞ .
- Para acometer diversos problemas de Sturm-Liouville se vienen introduciendo hace casi 70 años diversas matrices de transferencia de campos y de coeficientes, así como la función de Green. Varias matrices de transferencia son numéricamente inestables para grandes valores del autovalor y/o de los anchos de las capas. Algunas son inestables para anchos pequeños. Otras, como las de *scattering* e *híbrida* son estables en ambos límites.

¡GRACIAS!

