

38

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MEXICO



EXCITON DE WANNIER EN SISTEMAS  
HELICOIDALES

T E S I S  
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE  
F I S I C O  
P R E S E N T A :  
LUIS FELIPE RIVERA FLORES

DIRECTORES DE TESIS: DR. MARCELO DEL CASTILLO MUSSOT

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

2002



FACULTAD DE CIENCIAS  
SECCION ESCOLAR



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**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.



REPUBLICA DE CHILE  
 MINISTERIO DE EDUCACIÓN

**M. EN C. ELENA DE OTEYZA DE OTEYZA**  
 Jefa de la División de Estudios Profesionales de la  
 Facultad de Ciencias  
 Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito:  
 "Excitón de Wannier en sistemas helicoidales"

realizado por RIVERA FLORES LUIS FELIPE

con número de cuenta 09116996-3, quién cubrió los créditos de la carrera de Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis  
 Propietario

DR. MARCELO DEL CASTILLO MUSSOT

Propietario

DR. MARCO ANTONIO MARTINEZ NEGRETE

Propietario

DR. CHUMIN WANG CHEN

Suplente

DR. JORGE HUMBERTO ARCE RINCON

Suplente

DR. GERARDO GARCIA NAUMIS

Consejo Departamental de Física

DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE  
 Coordinadora de Licenciatura

## **Dedicatoria**

Quiero dedicar esta tesis especialmente primero a :

**-Toda mi familia porque siempre me han apoyado y brindado su cariño, mi madre, mi padre y mis hermanos que siempre han estado conmigo.**

**-A mis asesores, a Carlos que siempre ha sido un gran amigo.**

**- Y en general a todas las personas que siempre se esfuerzan por superarse.**

## **Agradecimientos**

Mis más sinceros agradecimientos a:

Mis asesores de tesis

**-Dr. Juan Adrian Reyes Cervantes.**

**-Dr. Marcelo del Castillo Mussot.**

Por todo el tiempo que dedicaron para la realización de esta tesis, por sus enseñanzas, las motivaciones y apoyo que me brindan para ser de mi un físico cada vez mejor.

Al honorable jurado:

Dr. Marcelo del Castillo Mussot  
Dr. Marco Antonio Martínez Negrete  
Dr. Chuming Wang Chen  
Dr. Jorge Humberto Arce Rincón  
Dr. Gerardo García Naumis

Por su tiempo dedicado a la revisión de esta tesis, por sus críticas constructivas y acertadas para el mejoramiento de este trabajo.

Al CONACYT por el apoyo económico brindado.

1

# Índice General

0.1	Introducción . . . . .	3
<b>1</b>	<b>Conceptos útiles de la física del estado sólido y el análisis numérico</b>	<b>6</b>
1.1	Sistemas con geometría helicoidal . . . . .	6
1.2	Teoría electrónica de bandas en un sólido . . . . .	9
1.2.1	Huecos . . . . .	14
1.3	Excitones . . . . .	17
1.4	Método de <i>disparo</i> . . . . .	19
<b>2</b>	<b>Excitón en estructuras helicoidales</b>	<b>24</b>
2.1	Ecuación estacionaria de Schrödinger . . . . .	24
2.2	Método de solución . . . . .	30
2.3	Solución numérica . . . . .	33
2.4	Solución analítica . . . . .	35
<b>3</b>	<b>Resultados y discusión</b>	<b>42</b>
3.1	Parámetros característicos de varios sistemas . . . . .	42
3.1.1	Moléculas . . . . .	44
3.1.2	Alambres cuánticos . . . . .	44
3.2	Funciones y energías propias . . . . .	47
3.3	Análisis de resultados . . . . .	50
<b>4</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>52</b>

## 0.1 Introducción

Los sistemas con geometría helicoidal son sistemas muy interesantes que presentan formas de hélice, la cual se define geoméricamente [1] en base a la longitud recorrida por un punto que se mueve sobre la superficie de un cilindro o cono de tal manera que al mismo tiempo que gira alrededor del eje avanza en la dirección del mismo. En el caso en el que el punto se mueva sobre la superficie de un cilindro se obtiene una hélice más regular, de modo que la distancia que recorre paralelamente al eje del cilindro es directamente proporcional al ángulo que describe alrededor de dicho eje, por lo que forma ángulos iguales con todas las generatrices.

A diferencia de las espirales las hélices cilíndricas son curvas tridimensionales y no planas que conservan su radio de curvatura constante. De esta forma espiral y hélice son conceptos geoméricos distintos aunque muy parecidos en el sentido que una hélice se puede considerar como una espiral tridimensional.

En la naturaleza no es difícil encontrar sistemas que presenten estas geometrías. Las espirales se presentan en una gran variedad de sistemas naturales, desde las moléculas quirales, las conchas de los moluscos y las inflorescencias de un girasol, hasta la forma espiral o helicoidal de galaxias. Desde el punto de vista de las matemáticas puras las espirales más comunes son la espiral de Arquímedes y la espiral equiangular o logarítmica.

Puesto que en este trabajo se utilizan hélices cilíndricas, debemos mencionar que esta geometría la encontramos en varios sistemas naturales como

en las plantas trepadoras, varios tipos de péptidos, nanotubos de carbón y moléculas quirales, así como las moléculas que conforman el ácido desoxirribonucleico (ADN).

El estudio cuántico de partículas atractivas en sistemas con geometría de hélice cilíndrica es el trabajo teórico desarrollado en esta tesis. Pensamos que el trabajo aquí presentado es original, ya que en la literatura científica no encontramos ningún trabajo sobre partículas atrayéndose en sistemas helicoidales. Es decir, como no encontramos en la literatura científica resultados experimentales sobre estos sistemas, utilizaremos sistemas con dimensiones y composiciones factibles. Nuestros resultados serán de utilidad al investigar excitones en alambres cuánticos helicoidales y en materiales cuya naturaleza quiral de sus moléculas constituyentes sean susceptibles de representarse microscópicamente por este tipo de modelos. En particular los recientes avances científicos y tecnológicos en la fabricación de heteroestructuras semiconductores han permitido el diseño e investigación de estructuras mesoscópicas con geometrías novedosas [2] y [3].

Además de esta introducción, la tesis consiste de cuatro capítulos. En el primer capítulo se comienza presentando unos ejemplos de sistemas con geometría helicoidal. Posteriormente se mencionan resultados importantes de la teoría de bandas y de excitones, temas considerados como básicos en física del estado sólido. Este capítulo finaliza con una útil descripción de los métodos numéricos utilizados para resolver ecuaciones diferenciales. En el capítulo 2 se presenta con detalle el problema a resolver y sin considerar el espín del excitón se plantea la ecuación de Schrödinger para dos partículas con carga confinadas en un alambre sin grueso que tiene la forma de una

hélice cilíndrica. También se explica porque el estudio se restringe a estados con paridad impar. En el capítulo 3 se presentan y se discuten para diferentes parámetros los resultados de las energías de amarre y funciones propias para las cuales las soluciones son continuas y diferenciables en todo punto. En el último capítulo resumimos nuestro trabajo, presentamos las conclusiones y perspectivas para trabajos futuros sobre el tema en cuestión.

# Capítulo 1

## Conceptos útiles de la física del estado sólido y el análisis numérico

Comenzamos éste capítulo con ejemplos de sistemas diferentes magnitudes que presentan geometrías helicoidales. Ya que la física de estado sólido es muy extensa [4], aquí solamente presentamos algunos conceptos y resultados básicos que posteriormente utilizaremos. Por otra parte, los fenómenos físicos se describen frecuentemente a través de ecuaciones diferenciales, por lo que asimismo mencionaremos dos métodos numéricos ampliamente utilizados en la solución de ecuaciones diferenciales

### 1.1 Sistemas con geometría helicoidal

El tornillo es una instrumento simple (figura 1.1), con una cuerda o estría helicoidal cuya sección transversal puede ser triangular, rectangular, etc. de tal manera que la hélice se enrolla sobre el exterior de una superficie cilíndrica de manera uniforme y constante. En la tuerca la rosca está enrollada sobre

[scanned pdf 02/20 bytes]

Figura 1.1: Tornillo y tuerca

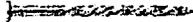


Figura 1.2: Estria helicoidal

una superficie interior. Claramente la terminación en un clavo es diferente a la de un tornillo.

El clavo con estria en forma helicoidal (figura 1.2) permite entrar con fluidez a manera de tornillo y presenta resistencia al salir.

Existen brocas para madera, concreto y hormigón; la mostrada en la figura 1.3 es para madera. Las brocas de este tipo atraviesan el material realizando perforaciones de dimensiones muy exactas gracias a la punta de broca con afilado de precisión.

Las escaleras con forma helicoidal o de caracol (figura 1.4) sirven como adorno y se usan especialmente para economizar espacios.

En sistemas naturales que presentan este tipo de geometría podemos encontrar muchas plantas del tipo trepador y a nivel microscópico o mesoscópico también hay una gran variedad de sistemas en los que destacan los péptidos helicoidales [8], bacterias, el ADN (figura 1.5) y los nanotubos de carbon en



Figura 1.3: broca con forma helicoidal para madera



Figura 1.4: Escalera con forma helicoidal.



Figura 1.5: ADN

forma de hélice (figura 1.6) los cuales son tema de más reciente investigación [9], [10], [11] y [12].

Por último mencionamos sistemas que presentan formas espirales o hélices más irregulares como las galaxias, algunas conchas de mar y de caracol (figura 1.7).

## 1.2 Teoría electrónica de bandas en un sólido

### Origen físico de las bandas

A continuación se presenta un resumen de los fundamentos de la estructura electrónica de la teoría de bandas, en la que mostramos el origen físico de las bandas de energía permitidas y prohibidas[5], así como el concepto de hueco en un sólido

### Origen físico de las bandas

La forma de los potenciales producidos por una, dos o más cargas coulombianas se muestran en la figura 1.8. las cuales representan esquemáticamente

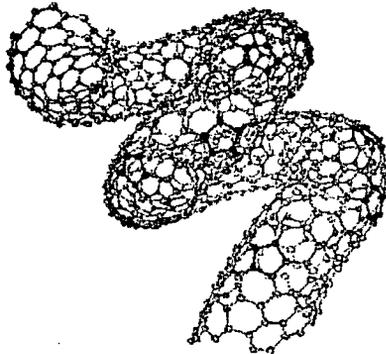


Figura 1.6: Nanotubo de carbón en forma de hélice

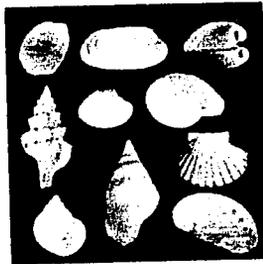


Figura 1.7: Las espirales se encuentran en varias conchas

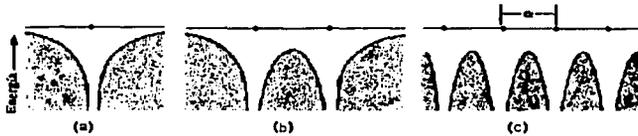


Figura 1.8: Energía potencial coulombiana debida a (a) un ion. (b) dos iones. (c) varios iones en fila

la interacción de un electrón con un ión, con dos iones y varios iones dispuestos regularmente en una fila. Si se desprecian los efectos de los extremos la energía potencial tiene la misma periodicidad o regularidad que la red cristalina en un sólido. En un cristal real la red es en tres dimensiones por lo que la energía potencial de un electrón moviéndose en este cristal también presenta una periodicidad tridimensional.

Consideremos una red cristalina lineal compuesta de  $N$  iones separados entre sí a una distancia  $a$  (figura 1.9) donde se representan las energías permitidas de tres estados electrónicos. Los electrones en el estado con energía  $E_1$  tienen menor probabilidad de desplazarse en la red a diferencia de los electrones con energía  $E_3$ . Es decir, los estados electrónicos en una red cristalina que provienen de los niveles atómicos más profundos (y más ligados) tienen menor movilidad.

El origen de las bandas electrónicas en un sólido reside en el desdoblamiento de los niveles atómicos que surgen debido al traslape de las funciones de onda. Por ejemplo, la energía potencial en las moléculas diatómicas produce un desdoblamiento en los niveles de energía que aumenta conforme la distancia interiónica disminuye. Similarmente para un conjunto de  $N$  átomos

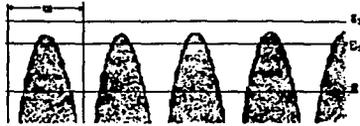


Figura 1.9: Tipos de niveles de energía en una red cristalina.

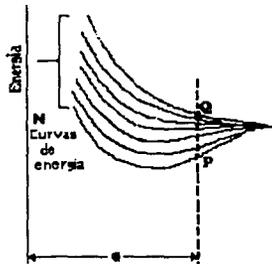


Figura 1.10: Niveles de energía en una red cristalina lineal en función de la distancia interiónica.

o moléculas, los electrones se mueven en un potencial periódico y cada nivel de energía se divide en un número de  $N$  niveles que es igual al número de átomos ver figura 1.10.

De acuerdo con la figura 1.10 a una distancia interatómica  $a$  los niveles de energía caen entre  $P$  y  $Q$ . Cuando  $N$  es muy grande los diferentes niveles de energía están espaciados tan finamente que se puede decir que forman una banda casi continua de energía. En una red hay muchas bandas, cada una corresponde a uno de los niveles de energía de los átomos que forman la red; la figura 1.11 muestra las bandas de energía que corresponden a varios

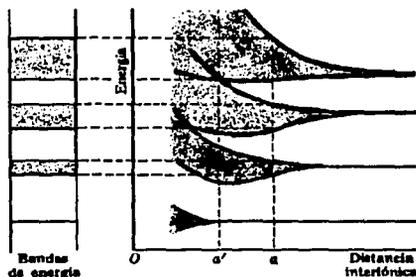


Figura 1.11: Bandas de energía correspondientes a niveles de energía

niveles de energía para una distancia interatómica  $a'$  y  $a$ .

En un metal los electrones de conducción llenan completamente los niveles de energía permitidos hasta un máximo llamado nivel de Fermi  $E_F$ . Por encima de este límite existen niveles permitidos, pero salvo por unos pocos electrones excitados térmicamente, estos niveles no están ocupados. Sin embargo, para que ocurra el proceso de conducción es esencial la existencia de estos niveles vacíos. Un aislante es una sustancia que tiene una banda de niveles permitidos completamente llena de electrones y que por encima de ella, existe una banda de energías en la que no hay niveles permitidos. En un semiconductor existe otra banda de niveles de energía permitidos que normalmente están desocupados; esta banda está separada de la banda inferior ocupada por una región en la que normalmente no hay estados electrónicos permitidos llamados brechas (o gaps en inglés) o bandas prohibidas. Si el gap  $E_g$  es lo bastante ancho, las energías térmicas ordinarias o los campos exteriores no son capaces de alterar la posición de los electrones en la banda

ocupada, y el material no puede ser conductor. Sin embargo, si existe algún mecanismo que pueda suministrar a los electrones de la parte superior de la banda ocupada la energía  $E_g$ , estos electrones pueden pasar a alguno de los niveles permitidos vacíos de la banda superior, donde pueden contribuir a la conducción pasando a distintos niveles de esta banda por efecto del campo exterior. Además, es importante mencionar que cada electrón excitado a la banda superior, llamada de conducción, deja tras de sí un estado permitido vacío. Como los electrones de la banda inferior (banda de valencia) pueden ahora cambiar de energía intercambiando su posición con este estado desocupado, esto permite también la conducción, puesto que, este estado vacío actúa como una partícula positiva de carga  $+e$ . Las propiedades de estos estados vacíos (llamados huecos) se describen en la siguiente sección.

### 1.2.1 Huecos

Los huecos son partículas ficticias [6] con los cuales se describe el comportamiento de la banda de valencia cuando esta pierde electrones. Se le considera como una partícula positiva de carga  $|e|$  y masa efectiva  $m_h^*$  dada por

$$m_h^* = \frac{\hbar^2}{(dE_v/d\vec{k})^2}, \quad (1.1)$$

donde  $E_v$  es la energía de la banda de valencia como función del vector de onda  $\vec{k}$ .

La energía de un hueco en un estado  $\vec{k}$  es

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_h^*} \quad (1.2)$$

Por conservación de momento, al remover un electrón de momento  $\hbar\vec{k}$

a la banda de valencia se debe adicionar un momento  $-\hbar\vec{k}$  en la banda de conducción por lo que el momento del hueco en el estado  $\vec{k}$  es

$$p_h = -\hbar\vec{k} \quad (1.3)$$

Considerando la influencia de un campo electrico  $\vec{E}$  y despreciando las colisiones de los electrones, la ecuación de movimiento del hueco es

$$m_h^* \frac{dv_h}{dt} = e\vec{E} \quad (1.4)$$

donde  $v_h$  es la velocidad del hueco, y que es la misma que la de los electrones, pero en dirección opuesta. Es por esto que se considera en la banda de conducción la existencia de una corriente  $j$  de huecos dada por

$$j = +ev_h \quad (1.5)$$

En general considerando colisiones y un campo magnetico  $\vec{B}$  la ecuación de movimiento es

$$m_h^* \left( \frac{dv_h}{dt} + \frac{v_h}{\tau_h} \right) = e \left( \vec{E} + v_h x \vec{B} \right) \quad (1.6)$$

donde  $\tau_h$  es el tiempo de deriva medio del hueco que es el mismo que para el de los electrones.

### Teorema de Bloch

Las ideas plasmadas anteriormente se describen matemáticamente a través del teorema de Bloch[7]. En un potencial periódico que cumple con la propiedad

$$V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r}), \quad (1.7)$$

donde  $\vec{r}$  es el vector de posición del electrón y  $\vec{R}$  es el vector de la red. la ecuación de Schrödinger es

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad (1.8)$$

la cual, según el teorema de Bloch, tiene como solución

$$\Psi_{\vec{k}} = \mu_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (1.9)$$

donde  $\mu_{\vec{k}}(\vec{r})$  cumple con

$$\mu_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = \mu_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.10)$$

y la función  $\mu_{\vec{k}}(\vec{r})$  modula la amplitud de la función de onda  $\Psi_{\vec{k}}$ .

Las ecuaciones (1.9) y (1.10) constituyen el teorema de Bloch. La energía del electrón no es totalmente cinética como en el caso del electrón libre. La expresión para la energía en función de  $\vec{k}$  es complicada y depende de la geometría de la red.

Sustituyendo la ecuación (1.9) en la ecuación (1.8) y después de un poco de algebra y eliminando el término  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ , la ecuación para la función  $\mu_{\vec{k}}(\vec{r})$  es

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} (\nabla + i\vec{k})^2 + V(\vec{r}) \right] \mu_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_{\vec{k}} \mu_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.11)$$

Esta es una ecuación de valores propios, donde el término encerrado entre los paréntesis cuadrados es una función explícita de  $\vec{k}$  y por lo tanto las funciones propias (eigenfunciones) y valores propios (eigenenergías) también son funciones de  $\vec{k}$ . Para un valor fijo de  $\vec{k}$  la ecuación (1.11) ofrece muchas soluciones  $E_{1,\vec{k}}, E_{2,\vec{k}}, E_{3,\vec{k}}, E_{4,\vec{k}}, \dots$

### 1.3 Excitones

Los excitones son estados ligados resultado de la interacción coulombiana entre un electrón con carga negativa y un hueco con carga positiva que se forma al transferir un electrón de una banda ocupada a una desocupada [13] [14]. La masa efectiva del electrón es

$$m_e^* = \frac{\hbar^2}{(dE_c/d\vec{k})^2} \quad (1.12)$$

donde  $E_c$  es la energía en función del vector de onda  $\vec{k}$  de la banda de conducción [15].

Los excitones pueden moverse a través del material, pero debido a que estas cuasipartículas son electricamente neutras al moverse no producen ninguna corriente por lo que no influyen en las características eléctricas de los sólidos. Sin embargo, los excitones desempeñan un papel en muchos fenómenos ópticos y fotoeléctricos en los aislantes y semiconductores. Determinan los espectros de absorción y emisión de éstos en la región del borde de absorción intrínseca.

Existen dos tipos de excitones, el de Wannier-Mott y el de Frenkel [16] que se distinguen por sus extensiones espaciales y por sus energías de amarre. Los excitones de Frenkel son encontrados en materiales como cristales de gases raros y sólidos iónicos donde la constante dieléctrica es pequeña dando como resultado una energía de ligadura grande y una extensión espacial pequeña. Los excitones de Wannier-Mott existen en semiconductores y aislantes que exhiben constantes dieléctricas mayores. Su energía de enlace y su distancia de separación son aproximadamente  $10^{-2}$ eV y  $10^{-6}$ cm respectivamente, por lo que el excitón está ligado débilmente y la separación electrón-hueco es

grande comparada con las distancias interatómicas.

En los dieléctricos y en los semiconductores se construye un modelo simple considerando al electrón y al hueco como cuasipartículas con cargas unitarias de signo contrario y con una energía potencial de interacción

$$V(r) = \frac{-e^2}{\epsilon r} \quad (1.13)$$

donde

$$r = \|r_e - r_h\|, \quad (1.14)$$

es el vector de posición relativo entre el electrón y el hueco. En el sistema de centro de masa y masa reducida, la ecuación que determina la energía de los pares electrón-hueco [17] es

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{e^2}{\epsilon r}\right) \varphi_{nlm}(r) = [E_n(k) - E_g - \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e^* + m_h^*)}] \varphi_{nlm}(r); \quad (1.15)$$

donde

$$\mu = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*} \quad (1.16)$$

es la masa reducida efectiva del electrón y el hueco, por lo que de acuerdo con la ecuación (1.15) la energía puede representarse de la siguiente forma

$$E_n(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e^* + m_h^*)} - \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2 n^2} + E_g \quad (1.17)$$

donde el primer sumando corresponde a la energía cinética del movimiento libre conjunto del electrón y el hueco. El segundo sumando corresponde a los estados excitados discretos de un átomo hidrogenoide con masa reducida  $\mu$

que se encuentra en un medio continuo de permitividad  $\epsilon$  y  $E_g$  es la energía del gap que está entre el fondo de la banda de conducción y el techo de la banda de valencia.

El radio del excitón con número cuántico  $n$  se expresa por la fórmula

$$R_n = \frac{n^2 \epsilon m a_B}{\mu} \quad (1.18)$$

donde  $m$  es la masa del electrón libre y  $a_B$  es el radio de Bohr del átomo de hidrogeno.

## 1.4 Método de *disparo*

Cuando se requiere que las ecuaciones diferenciales ordinarias satisfagan dos condiciones de frontera (no necesariamente los puntos extremos del intervalo de interés), el problema resultante es llamado un problema con valores en dos puntos frontera, que se puede resolver numéricamente [18].

La diferencia principal entre un problema con valor en dos puntos frontera y uno con valor inicial radica en que en el último la solución construida por métodos numéricos satisface solamente una condición de frontera que usualmente es el primer punto del intervalo de la solución, siendo por ello que se pueden obtener por este método varias soluciones. En cambio, para un problema con valor en dos puntos frontera además de satisfacer la condición anterior también debe cumplir una condición en otro punto punto que puede ser un punto interior del intervalo (punto singular) o el último punto del intervalo, y por lo cual la solución es única.

Para resolver un problema con valor en dos puntos frontera hay dos clases distintas de métodos numéricos, el método de relajación y el método de

disparo (o shooting en inglés). El primero consiste en ecuaciones de diferencias finitas que reemplazan la ecuación diferencial original, estando estas ecuaciones construidas sobre una cuadrícula o malla de puntos que abarca el dominio de interés. Por ejemplo, una ecuación diferencial de primer orden

$$\frac{dy}{dx} = g(x, y) \quad (1.19)$$

se puede reemplazar con una ecuación algebraica relacionando valores de la función en dos puntos  $k$  y  $k - 1$  de la siguiente manera

$$y_k - y_{k-1} - (x_k - x_{k-1})g\left[\frac{1}{2}(x_k + x_{k-1}), \frac{1}{2}(y_k + y_{k-1})\right] = 0. \quad (1.20)$$

Se puede demostrar que para ecuaciones diferenciales de ordenes superiores, éstas se pueden escribir como un conjunto de ecuaciones diferenciales de primer orden.

En primer lugar, en el método de relajación se comienza con una solución aproximada y se va mejorando ésta iterativamente. Como las iteraciones sucesivas mejoran la solución, se dice que el resultado se relaja a la solución verdadera.

En el método de disparo se escoge el valor de la variable dependiente en un punto frontera y la ecuación se resuelve por métodos numéricos con valores iniciales, llegando a la otra frontera y/o cualquier punto interior con condición de frontera especificado. En general se encuentra una discrepancia con el valor deseado en la frontera, por lo que se busca eliminar esta discrepancia variando los parámetros libres hasta ajustar el valor de frontera deseado en ese punto. En el caso de tener un conjunto de ecuaciones diferenciales de

primer orden, se escogen los valores para las variables dependientes en el punto inicial considerando que éstos deben ser consistentes entre ellos.

La forma de determinar la solución de una ecuación diferencial por el método de disparo se puede comparar con la trayectoria descrita por una bala disparada por una pistola al blanco, ya que, al ajustar el valor de la frontera final variando los parámetros libres lo que se busca es atinarle a un punto. Este método provee una aproximación sistemática porque tomando un conjunto de disparos alineados se mejora la precisión del objetivo sistemáticamente.

El método de relajación funciona mejor que el de disparo cuando las condiciones de frontera son especialmente delicadas, o cuando ellas involucran relaciones algebraicas complejas que no pueden ser fácilmente resueltas en forma cerrada. También funciona mejor cuando la solución es suave y no muy oscilatoria, ya que las aproximaciones podrían requerir muchos puntos sobre la malla para una buena representación aproximada. El método de disparo es preferido en estos casos porque el tamaño de pasos de integración se ajustan naturalmente a cualquier forma de la solución por extravagante que sea. Es por esta última razón y por el hecho de que el potencial de nuestro problema en esta tesis es oscilatorio, que el método de disparo es el que se utilizará aquí.

Como un ejemplo ilustrativo del método de disparo consideremos la ecuación diferencial de nuestro problema

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} + \frac{\lambda \phi}{\sqrt{4 \text{Sen}^2 \frac{\theta}{2} + \beta^2 \theta^2}} = -\xi \phi, \quad (1.21)$$

sujeta a las condiciones de frontera

$$\phi(0.0001) = 0 \quad (1.22)$$

$$\phi(50) = 0 \quad (1.23)$$

$$\phi'(0.0001) = 1 \quad (1.24)$$

para valores fijos de  $\beta$  y  $\lambda$ . Como se obtienen varias soluciones al variar el valor de  $\xi$ , la única función que cumple con las condiciones anteriores es la que tiene el valor de  $\xi = -0.01562$  (ver figura 1.12). Las otras funciones son intentos fallidos, esto es, son soluciones de la ecuación diferencial con diferentes valores de  $\xi$  para los cuales no se cumplieron las condiciones de frontera y por lo cual tuvieron que ser desechadas. A continuación se podría intentar resolver la ecuación original para encontrar otras eigenfunciones con obviamente, diferentes valores de  $\xi$  (o eigenvalores).

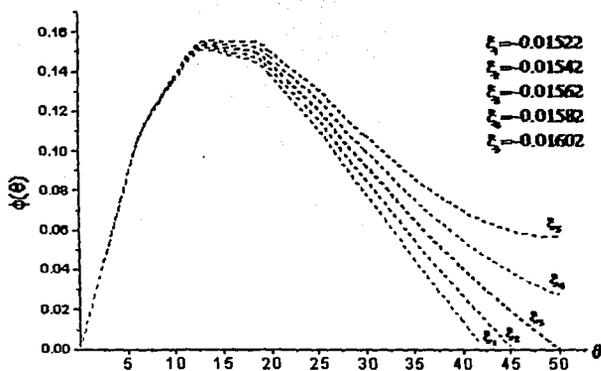


Figura 1.12: Por el método de disparo se ajusta el valor de  $\xi$  hasta lograr que la función buscada satisfaga las condiciones de frontera, lo cual equivale a hacer disparos con una pistola hasta atinarle a un blanco. En la figura  $\xi = -0.01562$  es el valor para el cual la función  $\phi(\theta)$  cumple con las condiciones de frontera.

## Capítulo 2

### Excitón en estructuras helicoidales

El problema central de la tesis se plantea en este capítulo. Ya que dicho problema pertenece al ámbito de la mecánica cuántica[19], debemos comenzar por plantear la ecuación de Schrödinger correspondiente.

#### 2.1 Ecuación estacionaria de Schrödinger

Consideramos la interacción electrostática de dos partículas cargadas con cargas opuestas  $e$  cuyo movimiento está restringido a un alambre sin grueso en forma de hélice cilíndrica (véase figura 2.1). Sin considerar el espín la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$-\left(\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_2} - V_{int}\right) \Psi = \varepsilon \Psi, \quad (2.1)$$

$$V_{int} = \frac{-e^2}{\varepsilon \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}} \quad (2.2)$$

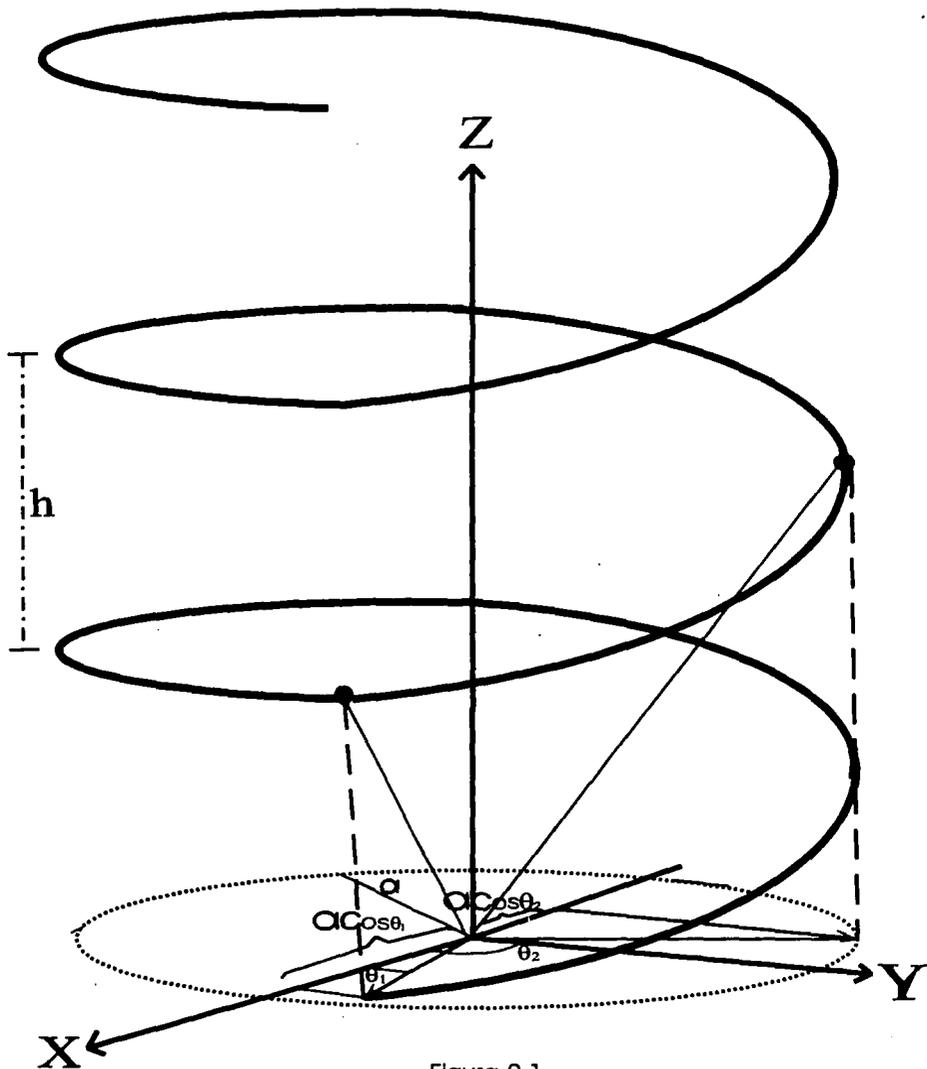


Figura 2.1

Dos partículas cargadas con cargas opuestas restringidas a moverse en un alambre sin grosor con simetría helicoidal

donde  $m_1$  y  $m_2$  son las masas de las partículas,  $h$  es la constante de Planck dividida entre  $2\pi$ ,  $\epsilon$  es la constante dielectrica,  $e$  es la carga del electrón y  $\epsilon$  es la energia.

Podemos escribir las ecuaciones paramétricas de las coordenadas de las partículas en la hélice en unas coordenadas similares a las cilíndricas de la siguiente manera

$$x_i = a \cos \theta_i \quad (2.3)$$

$$y_i = a \sin \theta_i, \quad (2.4)$$

$$z_i = \alpha \theta_i \quad (2.5)$$

donde el subíndice  $i = 1, 2$ , etiqueta a cada partícula,  $a$  es el radio constante de la hélice y la variable  $\theta$  de cada partícula está definida para todos los reales y corresponde a la variable angular de las coordenadas cilíndricas  $\theta_c$ . La proyección de  $\theta$  en el plano  $xy$  corresponde obviamente a  $\theta_c$ . Esta definición de  $\theta$  tiene la ventaja de describir tanto el movimiento rotacional en la hélice como el movimiento vertical. En la ecuación (2.5), el factor de proporcionalidad  $\alpha$  que relaciona a  $\theta$  y  $z$  es una constante que nos da la razón de vueltas por unidad de longitud axial. Como se verá más adelante, este factor de proporcionalidad junto con el radio  $a$  son utilizados para definir otro coeficiente  $\beta$  que nos servirá para caracterizar las dimensiones de la hélice. Ya que el radio de la hélice es constante, entonces el laplaciano para este sistema es

$$\nabla^2 = \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_2^2}. \quad (2.6)$$

Se susstituyen las ecuaciones (2.3), (2.4), (2.5) y (2.6) y las coordenadas de cada una de las partículas en la ecuación (2.1) para obtener

$$\frac{-\hbar^2}{2m_1} \left( \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_1^2} + \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_2^2} \right) \Psi - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left( \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_1^2} + \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_2^2} \right) \Psi - \frac{e^2 \Psi}{\epsilon \sqrt{2a^2(1-\cos(\theta_1-\theta_2)) - \alpha^2(\theta_1-\theta_2)^2}} = \epsilon \Psi. \quad (2.7)$$

Esta es la ecuación de Schrödinger en nuestro sistema de coordenadas para dos partículas en términos de dos variables independientes  $\theta_1$  y  $\theta_2$ . Para resolverla, transformamos las coordenadas al sistema de coordenadas relativa y de centro de masa definidas por

$$\theta = \theta_1 - \theta_2, \quad (2.8)$$

$$\theta_{cm} = \frac{m_1 \theta_1 + m_2 \theta_2}{m_1 + m_2}. \quad (2.9)$$

Aplicando el teorema de cambio de variable se llega a las siguientes ecuaciones que relacionan la segundas derivadas de las variables  $\theta_1$  y  $\theta_2$  de las partículas 1 y 2 con  $\theta$  y  $\theta_{cm}$  del nuevo sistema.

$$\frac{\partial^2}{\partial \theta_1^2} = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_{cm} \partial \theta} + \left( \frac{m_1}{m_1 + m_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial \theta_{cm}^2}, \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \theta_2^2} = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_{cm} \partial \theta} + \left( \frac{m_1}{m_1 + m_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial \theta_{cm}^2}. \quad (2.11)$$

Sustituyendo las ecuaciones (2.8), (2.10) y (2.11) en (2.7) se llega a

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{a^2} + \frac{1}{\alpha^2} \right) \left( \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} + \frac{1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta_{cm}^2} \right) - \frac{e^2 \Psi}{\epsilon \sqrt{2a^2 (1 - \cos \theta) + \alpha^2 \theta^2}} = \epsilon \Psi.$$

Si introducimos los parámetros siguientes:  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  y  $M = m_1 + m_2$  definidos como la masa reducida y la masa total, respectivamente y haciendo uso de la identidad trigonométrica  $2(1 - \cos \theta) = 4 \sin^2 \frac{\theta}{2}$  se tiene:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{a^2} + \frac{1}{\alpha^2} \right) \left( \frac{1}{\mu} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} + \frac{1}{M} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta_{cm}^2} \right) - \frac{e^2 \Psi}{\epsilon \sqrt{4a^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \alpha^2 \theta^2}} = \epsilon \Psi. \quad (2.12)$$

Utilizando el método de separación de variables, se propone como solución a  $\Psi = \phi(\theta)S(\theta_{cm})$ , que al sustituirse en la ecuación anterior, dividiendo entre  $\Psi$  y al separar los términos que tienen a  $\theta$  en el lado izquierdo y en el lado derecho los que tienen a  $\theta_{cm}$  se llega a

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{1}{a^2} + \frac{1}{\alpha^2} \right) \frac{1}{\phi} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{4a^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \alpha^2 \theta^2}} - \epsilon = \frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{1}{a^2} + \frac{1}{\alpha^2} \right) \frac{1}{S} \frac{\partial^2 S}{\partial \theta_{cm}^2}. \quad (2.13)$$

Como las variables  $\theta$  y  $\theta_{cm}$  son independientes, por consistencia ambos lados por separado son iguales a una constante la cual se denotará por  $E_{cm}$  pues resulta ser la energía del centro de masa, de esta manera se tiene lo siguiente

$$E_{cm} = \frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{1}{a^2} + \frac{1}{\alpha^2} \right) \frac{1}{S} \frac{\partial^2 S}{\partial \theta_{cm}^2}. \quad (2.14)$$

Como la energía total del sistema  $\varepsilon$  es igual a la del excitón  $E_{exct}$  más la energía del centro de masa  $E_{cm}$  se tiene que  $E_{exct} = (\varepsilon - E_{cm})$  la cual se sustituye en la ecuación (2.13) para obtener

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{1}{a^2} + \frac{1}{\alpha^2} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} - \frac{e^2 \phi}{\varepsilon \sqrt{4a^2 S \varepsilon n^2 \frac{\theta}{2} + \alpha^2 \theta^2}} = E_{exct} \phi. \quad (2.15)$$

Definiendo las siguientes variables adimensionales

$$\xi = \left( \frac{a^2 \alpha^2}{a^2 + \alpha^2} \right) \frac{2\mu}{\hbar^2} E_{exct}, \quad (2.16)$$

$$\lambda = \frac{2\mu e^2}{\hbar^2 a \varepsilon} \left( \frac{a^2 \alpha^2}{a^2 + \alpha^2} \right), \quad (2.17)$$

se llega a la ecuación de Schrödinger en términos de una sola variable independiente.

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} + \frac{\lambda \phi}{\sqrt{4S \varepsilon n^2 \frac{\theta}{2} + \beta^2 \theta^2}} = -\xi \phi \quad (2.18)$$

donde  $\beta = \frac{\alpha}{a}$ .

El segundo término del lado derecho de la ecuación (2.18) es el potencial  $V(\theta)$  definido como

$$V(\theta) = \frac{\lambda}{\sqrt{4\text{Sen}^2\frac{\theta}{2} + \beta^2\theta^2}} \quad (2.19)$$

Dependiendo de los valores que tomen  $\beta$  y  $\lambda$ , la forma del potencial presentará oscilaciones grandes o pequeñas como se muestran en la figura 2. 2 dependiendo del valor de  $\beta$ . A  $\lambda$  se le identifica como factor de proporcionalidad de la intensidad del campo,  $4\text{sen}^2\frac{\theta}{2}$  es denotado como el factor responsable de las oscilaciones del potencial y finalmente a  $\beta$  dado por  $\frac{\alpha}{a}$  lo definimos como un factor de torsión, el cual no es igual al comúnmente definido en geometría diferencial dado por  $\frac{\alpha}{\sqrt{a^2 - \alpha^2}}$  [20]. Es importante hacer notar que en hélices más comprimidas, que corresponden a valores de  $\beta$  más pequeños, se obtienen potenciales más profundos, pues el promedio del potencial disminuye y aparecen mínimos más pronunciados en valores de  $\theta$  múltiplos de  $2\pi$ .

Si consideramos a una de las partículas viajando en forma ascendente sobre la hélice, la altura alcanzada  $h$  como función de  $\theta$  está dada por

$$h = \alpha\theta, \quad (2.20)$$

que en la ecuación (2.5) se representó por  $z$ . De esta forma al despejar a  $\alpha$  y al dividir ambos lados de la ecuación entre  $a$  se tiene

$$\beta = \frac{\alpha}{a} = \frac{h}{\theta a}. \quad (2.21)$$

Cuando  $\theta = 2\pi$ , ésto es, cuando la partícula ha dado una vuelta completa alrededor del eje de la hélice se tiene que  $\beta$  nos da la razón entre la altura alcanzada y la logitud arco que recorre en una vuelta. Nótese que el potencial de interacción presenta mínimos para valores de  $\theta$  multiples de  $2\pi$ . pues estos puntos describen mínimos locales de la distancia relativa entre las dos partículas.  $\beta$  es un parámetro que nos sirve para caracterizar a una hélice. ésto es, si  $\beta$  tiene valores pequeños se puede decir que la hélice está muy comprimida o torcida y en el caso límite cuando  $\beta \rightarrow 0$  el potencial de la ecuación (2.18) se reduce al de un anillo. En cambio, si  $\beta$  tiene valores grandes se puede decir que la hélice está muy estirada y por lo tanto el potencial de la ecuación (2.18) se aproxima al de un alambre cuántico unidimensional.

## 2.2 Método de solución

Los sistemas cuánticos con potenciales coulombianos unidimensionales continúan generando mucho interés y, desafortunadamente, mucha confusión [21], la cual radica en la existencia de las soluciones pares. Loudon [22] en su trabajo pionero concluye que las energías de amarre de los estados ligados son doblemente degeneradas, y la existencia de un estado base con energía de amarre infinita; Haines y Roberts [23] determinaron también soluciones pares que formaban un espectro continuo y aunque Davtyan, Pogosyan, Sissakian y Ter-Antonyan [24] explicaron que la doble degeneración de las eigenenergías de Loudon es consecuencia de la existencia de una simetría oculta, al pasar el tiempo, varios autores han refutado a todos los autores que han defendido las soluciones con paridad par. Andrews [25] cuestionó la existencia del estado base de Loudon, Dai Xianxi, Jixin Dai y Jiqiong Dai [26] concluyeron que

las soluciones pares no existen demostrando que estas no conforman un conjunto ortogonal. Andrews [27] objeta la existencia de la simetría escondida al igual que Gordeyev y Chhajlany [28] quienes además concluyen que sólo las soluciones impares son admisibles. Como no es difícil dar argumentos que defiendan a los estados con paridad par, el cuestionamiento sobre la existencia de éstos estados seguirá siendo un tema controversial. Y es por esto que sólo describo los estados impares excluyendo a los pares.

Antes de continuar, analizaremos el potencial dado por la ecuación (2.19). Como la forma del potencial debe ser oscilatorio, se requiere que para valores de  $\theta$  pequeños

$$4\text{Sen}^2\frac{\theta}{2} \gg \beta^2\theta^2. \quad (2.22)$$

Utilizando la siguiente identidad trigonométrica para la función seno válida para valores de  $\theta$  pequeños

$$\text{Sen}\theta \approx \theta, \quad (2.23)$$

se tiene

$$\text{Sen}^2\frac{\theta}{2} \approx \frac{\theta^4}{4}, \quad (2.24)$$

esta última ecuación se sustituye en la ecuación (2.22) y al despejar  $\beta$  se obtiene

$$1 \gg \beta. \quad (2.25)$$

Por lo cual concluimos que el potencial presentará oscilaciones, sólo si se cumple que  $\beta$  toma valores mucho menores que 1. En la figura 2.2 se

muestra la forma del potencial para diferentes valores de  $\beta$ . Demostrando que efectivamente lo anterior se cumple.

Regresando a las funciones con paridad impar, tenemos que por ser estas antisimétricas, es suficiente con resolver la ecuación (2.18) para valores de  $\theta$  positivos. Ahora bien, este dominio lo dividimos en dos regiones; una en la cual el término oscilatorio domina al término  $\beta^2\theta^2$  y otra donde ocurre lo contrario. En la segunda región se resuelve analíticamente la ecuación de Schrödinger (2.18) para unirla con la solución numérica en la primera región.

A continuación se dará un criterio para escoger la posición de la frontera  $\theta_0$  entre las regiones arriba mencionadas. La frontera de ambas regiones está definida por un punto que satisface la desigualdad

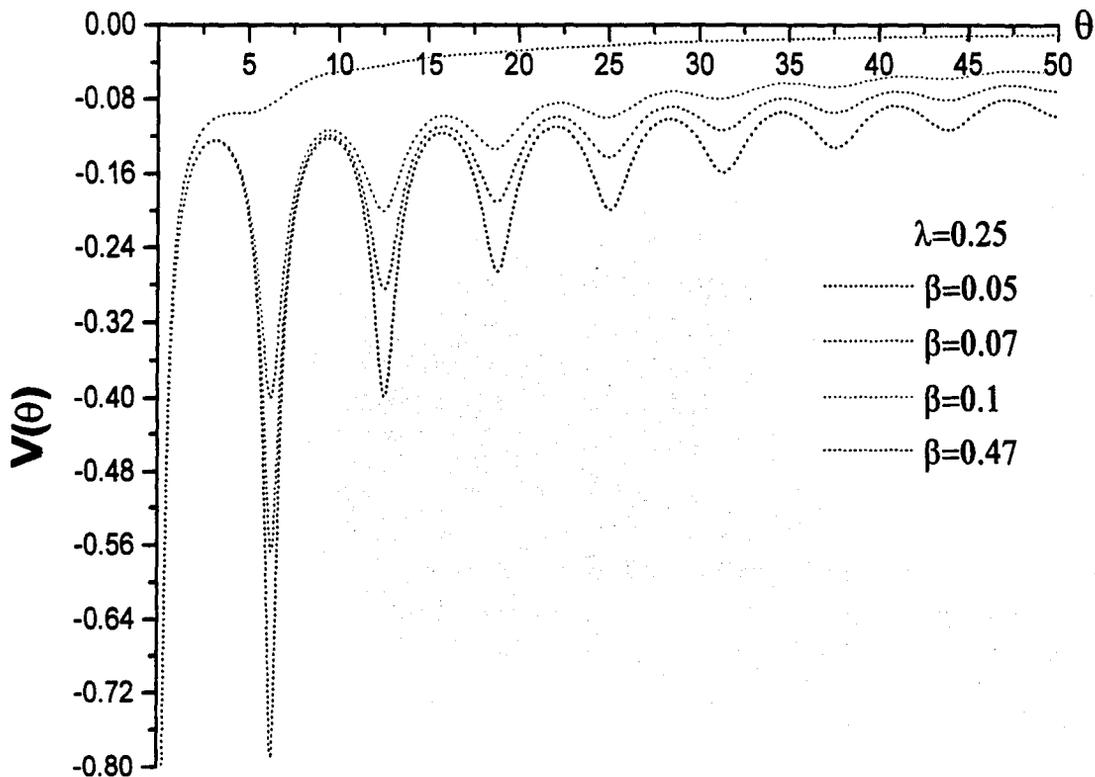
$$\beta^2\theta^2 > 4\text{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (2.26)$$

Como el último término alcanza un valor máximo de 4 se tiene entonces

$$\beta^2\theta^2 > 4. \quad (2.27)$$

En figura 2.2 se muestra como el potencial varía como función de  $\beta$ . En el caso de una hélice muy comprimida, el potencial muestra oscilaciones considerables (por ejemplo,  $\beta = 0.05$ ). Para valores  $\beta > 0.05$  la misma figura muestra que la profundidad de los pozos del potencial va disminuyendo considerablemente. Cuando  $\beta = 0.46$  el potencial se vuelve aproximadamente una función monótona creciente sin oscilaciones. Por otra parte de la ecuación (2.21) con  $\theta = 2\pi$  se obtiene

$$N = \frac{a}{h} = \frac{1}{2\pi\beta} \quad (2.28)$$



**Figura 2.2**

Las oscilaciones del potencial dado en la ecuación 2.19 decrecen al aumentar el valor de  $\beta$ . Esto confirma la validez de la ecuación 2.25 que impone como condición que  $1 \gg \beta$  para que el potencial presente oscilaciones.

donde  $N$  se define como el número de espiras que una partícula debe recorrer en una hélice para alcanzar una altura  $h$  igual al radio  $a$ .

En el cuadro 1 se muestran los valores de  $N$  para diferentes valores de  $\beta$ , y donde se puede concluir que para el valor de  $\beta = 0.05$  se tiene una hélice poco comprimida (3 espiras).

$\beta$	$N$
0.03	5.3
0.04	3.97
0.05	3.18
0.07	2.27

Cuadro 1: Para  $\beta = 0.05$   
el valor de  $N$  no denota a una  
hélice muy comprimida.

Tomando en cuenta que la expansión asintótica es válida para valores de  $\theta$  muy grandes, es conveniente escoger la posición de frontera  $\theta_0$  lo suficientemente grande para evitar errores en la expansión asintótica definida en las regiones  $|\theta| > \theta_0$ . Por ello evaluamos  $\theta_0$  con el valor de  $\beta = 0.05$  y al despejar a  $\theta_0$  se tiene que

$$\theta_0 > \frac{2}{0.05} = 40 = 800 * 0.05 = 800\beta, \quad (2.29)$$

lo que quiere decir que se debe cumplir  $\theta_0 > 800\beta$ , por lo que tomaremos  $\theta_0 = 1000\beta$ .

## 2.3 Solución numérica

Como se mencionó anteriormente, para valores de  $|\theta_0| < 1000\beta$  la solución de la ecuación de Shrödinger se determina numéricamente por el método de

disparo resumido en la sección 1.4. Ya que estamos buscando sólo las soluciones antisimétricas o impares, las condiciones de frontera que se imponen para las soluciones numéricas son por conveniencia

$$\phi(0.0001) = 0, \quad (2.30)$$

$$\phi'(0.0001) = 1, \quad (2.31)$$

$$\phi(\theta_0) = 0, \quad (2.32)$$

ya que como no es posible definir un valor para el potencial en  $\theta = 0$ , éste se evalúa en  $\theta = 0.0001$  por ser el punto más cercano a cero cuyas cifras son confiables totalmente. El valor de uno para la derivada en  $\theta = 0.0001$  carece de importancia debido a que este representa una pendiente la cual toma el valor correcto cuando la función es multiplicada por la constante de normalización.

Se calculan para diferentes valores de  $\beta$  y  $\lambda$  las funciones de onda para el primer y tercer estado excitado junto con sus respectivas eigenenergías que después son corregidas y las cuales se muestran en las figuras y los cuadros de la sección 3.3 (la precisión de las energías de amarre calculadas finales se presentan con por lo menos cuatro cifras significativas). A las eigenenergías se les hace una corrección cuando se unen las dos soluciones, puesto que, en este punto la solución numérica y su derivada deben tomar el valor de la solución analítica y su derivada respectivamente y no el valor de cero que tenían como condición inicial. Por consecuencia las condiciones de frontera que se imponen sobre las condiciones de frontera para las dos soluciones son

$$\phi(1000\beta) = \phi_a(1000\beta), \quad (2.33)$$

$$\phi'(1000\beta) = \phi'_a(1000\beta), \quad (2.34)$$

en donde  $\phi_a$  es la solución analítica.

## 2.4 Solución analítica

En esta región se satisface la ecuación (2.26) por lo que la ecuación (2.18) se reduce a una de la siguiente forma

$$\frac{-\hbar^2 d^2\psi}{2\mu du^2} - \frac{e\psi}{\epsilon |u|} = E\psi, \quad (2.35)$$

donde  $\mu$  es la masa reducida de las dos partículas

Ahora proponiendo el cambio de variable y los parámetros adimensionales siguientes:

$$w = \sqrt{\frac{-2\mu E}{\hbar^2}} u, \quad (2.36)$$

$$\gamma = \frac{e^2}{\epsilon} \sqrt{\frac{-2\mu}{\hbar^2 E}}, \quad (2.37)$$

que al sustituirlos en la ecuación (2.35) nos conduce a

$$\frac{d^2\psi}{dw^2} + \frac{\gamma\psi}{|w|} - \Psi = 0. \quad (2.38)$$

que es la ecuación de Schrödinger unidimensional para el átomo de hidrógeno. Esta ecuación ya fue estudiada por Loudon [29] quien determino las siguientes eigenfunciones

$$W(\bar{z} = -\delta y) = \frac{e^{-\frac{1}{2}\bar{z}}}{\Gamma(-\alpha)} \bar{z} {}_1F_1(1-\alpha; 2; \bar{z}) \\ [\log(\bar{z}) + \Psi(1-\alpha) - \Psi(1) - \Psi(2)] \\ - \frac{1}{\alpha} + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(1-\alpha)_r}{r!(r+1)} A_r \bar{z}^{r+1}, \quad (2.39)$$

con

$$A_r = \sum_{n=1}^{r-1} \left[ \frac{1}{n+1-\alpha} - \frac{1}{n+1} - \frac{1}{n+2} \right],$$

$$(c)_r = \frac{\Gamma(c+r)}{\Gamma(c)},$$

donde  $\Psi(s)$  es la derivada del logaritmo de la función  $\Gamma(c)$ , esto es

$$\Psi(s) = (\log \Gamma(s))' = \Gamma'(s)/\Gamma(s) \quad (2.40)$$

y  ${}_1F_1(1-\alpha; 2; \bar{z})$  es la función hipergeométrica confluyente [30] dada por

$${}_1F_1(1-\alpha; 2; \bar{z}) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(1-\alpha)_r}{(2)_r} \frac{\bar{z}^r}{r!} \quad (2.41)$$

Como las soluciones determinadas por Loudon son finitas en el origen y además estas eigenfunciones divergen en  $\pm\infty$  cuando  $\alpha$  toma valores enteros

que son los valores cuantizados correspondientes al átomo de hidrógeno; no son útiles para nosotros, puesto que, en nuestro problema hay una discontinuidad en el origen y la solución asintótica que se busca sólo no debe cubrir todo el dominio de  $\theta$ . Por lo que para resolver la ecuación (2.38) se propone la siguiente solución en series de potencias inversas

$$\psi = e^{-w} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{w^{n+r}} \quad (2.42)$$

en donde  $r$  es una constante a determinar. El factor  $e^{-w}$  se propone porque para  $w \gg 1$  la solución de la ecuación (2.38) se comporta de esta forma es decir cuando las partículas están muy alejadas entre sí la función de onda tiende a cero. Así derivando la ecuación (2.42) dos veces se tiene,

$$\frac{d^2\psi}{dw^2} = e^{-w} \left( \sum \frac{c_n}{w^{n+r}} + 2 \sum \frac{(n+r)c_n}{w^{n+r+1}} + \sum \frac{(n+r)(n+r+1)c_n}{w^{n+r+2}} \right). \quad (2.43)$$

Sustituyendo las ecuaciones (2.42) y (2.43) en la ecuación (2.38) para  $w \gg 0$  obtenemos la siguiente expresión ya simplificada

$$\sum \frac{[2(n+r) + \gamma]c_n}{w^{n+r+1}} + \sum \frac{(n+r)(n+r+1)c_n}{w^{n+r+2}} = 0. \quad (2.44)$$

En la primera suma sea  $n^* = n - 1$

$$\sum \frac{[2(n^* + 1 + r) + \gamma]c_{n^*+1}}{w^{n^*+2+r}} + \sum \frac{(n+r)(n+r+1)c_n}{w^{n-r+2}} = 0. \quad (2.45)$$

Ahora como el índice en la primera suma es mudo se puede tomar  $n$  en lugar de  $n^*$ . Igualando a cero independientemente cada potencia de la ecuación anterior se obtiene:

$$[2(n+1+r) + \gamma]c_{n+1} = -(n+r)(n+1+r)c_n. \quad (2.46)$$

Sustituyendo  $n = 1$  en la ecuación (2.46) obtenemos:

$$[2r + \gamma]c_0 = r^2c_{-1}. \quad (2.47)$$

Como  $c_0 \neq 0$  y  $c_{-1} = 0$  entonces se debe cumplir que:

$$r = \frac{-\gamma}{2}. \quad (2.48)$$

Así la relación de recurrencia queda de la siguiente forma

$$c_{n+1} = \frac{-(n - \frac{\gamma}{2})(n + 1 - \frac{\gamma}{2})c_n}{[2(n + 1 - \frac{\gamma}{2}) + \gamma]} = \frac{-(n - \frac{\gamma}{2})(n + 1 - \frac{\gamma}{2})c_n}{2(n + 1)}. \quad (2.49)$$

Para  $n = 0$  se tiene

$$c_1 = \frac{\frac{\gamma}{2}(1 - \frac{\gamma}{2})c_0}{2}, \quad (2.50)$$

para  $n = 1$  se tiene:

$$c_2 = \frac{-(1 - \frac{\gamma}{2})(2 - \frac{\gamma}{2})c_1}{2 \cdot 2} = \frac{-(1 - \frac{\gamma}{2})(2 - \frac{\gamma}{2})[\frac{\gamma}{2}(1 - \frac{\gamma}{2})c_0]}{2^2 \cdot 2}, \quad (2.51)$$

para  $n = 2$  se tiene:

$$c_3 = \frac{-(2 - \frac{\gamma}{2})(3 - \frac{\gamma}{2})c_2}{2 \cdot 3} = \frac{(2 - \frac{\gamma}{2})(3 - \frac{\gamma}{2})(1 - \frac{\gamma}{2})(2 - \frac{\gamma}{2})[\frac{\gamma}{2}(1 - \frac{\gamma}{2})c_0]}{2^3 \cdot 1 \cdot 2 \cdot 3}. \quad (2.52)$$

Por lo que se puede generalizar para el término  $c_n$  (con  $c_0 = 1$ ) de la siguiente forma:

$$c_n = \frac{(-1)(n - \frac{7}{2})_n (n - 1 - \frac{7}{2})_n}{2^n n!}, \quad (2.53)$$

en donde  $(a)_n$  son los símbolos de Pochhammer [31] definidos como

$$(a)_n = \frac{(a+n)!}{n!}. \quad (2.54)$$

Por lo tanto la solución se escribe de la siguiente forma:

$$\psi = e^{-w} \sum_{n=0}^{[\frac{7}{2}]+3} \frac{(-1)^{n-1} (n - \frac{7}{2})_n (n - 1 - \frac{7}{2})_n}{2^n n! w^{n - \frac{7}{2}}} \quad (2.55)$$

en donde  $[\frac{7}{2}]$  denota el mayor entero de  $\frac{7}{2}$ .

Ahora como la solución asintótica debe estar en términos de las variables  $\xi$  y  $\theta$  y no de  $w$ , se escribe la ecuación (2.18) de la siguiente forma

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} + \frac{\lambda \phi}{\beta |\theta|} = -\xi \phi, \quad (2.56)$$

donde el término oscilatorio ha sido despreciado por considerarse que se cumple que  $4S \text{en}^2(\frac{\theta}{2}) \ll \beta^2 \theta^2$ .

Tomemos el siguiente cambio de variable  $\theta = \frac{\beta \bar{\theta}}{\lambda}$  que al aplicarse a la ecuación (2.56) se obtiene

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \bar{\theta}^2} + \frac{\phi}{|\bar{\theta}|} = -\frac{\beta^2 \xi}{\lambda^2} \phi. \quad (2.57)$$

Por otra parte al aplicar el cambio de variable  $w = \frac{\xi}{\beta}$  a la ecuación (2.38) se tiene:

$$\frac{d^2\psi}{d\theta^2} + \frac{\psi}{|\theta|} - \frac{\psi}{\gamma^2} = 0. \quad (2.58)$$

Igualando las ecuaciones (2.57) y (2.58) se concluye que:

$$\frac{-\lambda^2}{\beta^2 \gamma^2 \xi} = 1 \quad (2.59)$$

Ahora de los cambios de variables para  $\theta$  y  $w$  se tiene:

$$w = \frac{\lambda}{\gamma \beta} \theta. \quad (2.60)$$

Sustituyendo la ecuación (2.60) en la ecuación (2.55) se tiene:

$$\psi(\xi, \theta) = e^{-\frac{\lambda}{\gamma \beta} \theta} \sum_{n=0}^{|\frac{\xi}{\beta}|-3} \frac{(-1)^{n-1} (n - \frac{\sqrt{-\lambda^2}}{\beta^2 \xi})_n (n - 1 - \frac{\sqrt{-\lambda^2}}{\beta^2 \xi})_n}{2^n n! (\frac{\lambda}{\gamma \beta} \theta)^n - \frac{\sqrt{-\lambda^2}}{\beta^2 \xi}}. \quad (2.61)$$

Esta es la solución analítica determinada para la región en la cual el término oscilatorio es despreciable.

## Capítulo 3

# Resultados y discusión

Ya que podemos utilizar la teoría presentada para diferentes sistemas helicoidales, a continuación estimaremos algunos de los posibles parámetros típicos

### 3.1 Parámetros característicos de varios sistemas

Estimaremos los parámetros característicos ( $a$ ,  $\beta$  y  $\lambda$  definidos anteriormente) de posibles hélices formadas por moléculas y alambres cuánticos semiconductores en las cuales la teoría sea aplicable.

Escogeremos parámetros con la finalidad de evitar que sistemas helicoidales en los cuales la separación entre espiras sea muy cercana. De esta manera podremos despreocuparnos del denominado efecto túnel, que se vuelve importante cuando las espiras están muy próximas una de otra. La geometría de nuestro sistema implica que al recorrer la hélice la distancia entre espira y espira presenta un mínimo local cuando la variable  $\theta$  es un múltiplo de  $2\pi$ . Puesto que el potencial de interacción coulombiana es proporcional al inverso de la distancia, este hecho se manifiesta en una intensidad mayor (o mínimos lo-

cales pues el potencial es siempre negativo) del potencial de Coulomb para esos valores de  $\theta$ , como se pudo apreciar en las gráficas del potencial de interacción. Si el efecto túnel fuese importante, nuestro modelo unidimensional dependiente de  $\theta$  no sería válido, pues habría que tomar en cuenta la posibilidad de movimiento "vertical" de espira a espira para  $\theta$  constante, esto es, realizando un salto entre espiras sin hacer un recorrido total sobre estas. Es decir, aunque nuestro modelo no considera el grosor de la hélice, definiremos parámetros para los cuales el efecto túnel es despreciable aún incluyendo valores factibles del grosor que relacionen a los anteriores con la separación de las espiras considerando un grosor para éstas. Por lo tanto, nuestros resultados no serían confiables para hélices muy comprimidas, es decir, nuestros parámetros estarán restringidos debido a las limitaciones de nuestro modelo

Si definimos  $S$  como la distancia mínima entre espiras con grosor,  $h$  como la distancia entre espiras sin grosor y  $d$  como el grosor de la hélice en la coordenada  $z$ , entonces

$$S = h - d. \quad (3.1)$$

Como la ecuación (2.21) contiene  $a$  y  $\beta$  podemos despejar a  $h$  para  $\theta = 2\pi$ , obteniendo

$$h = 2\pi a\beta, \quad (3.2)$$

Por otra parte, la relación entre  $a$  y  $\beta$  con  $\lambda$  está dada por la ecuación (2.17). Despejando  $a$  en términos de  $\beta$  y de  $\lambda$  a través de la ecuación (2.17) se obtiene

$$a = \frac{\lambda \hbar^2 \epsilon}{2\mu e^2} \left( \frac{1 + \beta^2}{\beta^2} \right). \quad (3.3)$$

De esta manera, dependiendo del potencial de confinamiento y de las dimensiones y el grosor de la hélice, escogeremos un valor mínimo de  $S$  que evite que se produzca efecto túnel. Tomaremos  $S = 30 \text{ \AA}$  para hélices semiconductoras y  $S = 10 \text{ \AA}$  para moléculas en forma helicoidal.

### 3.1.1 Moléculas

En primer lugar, las estructuras como los nanotubos son un ejemplo de moléculas helicoidales chicas cuyos parámetros suponemos que son

$S = 10 \text{ \AA}$ ,  $h \approx 15 \text{ \AA}$ ,  $d = 5 \text{ \AA}$ ,  $\epsilon = 1$  donde  $a$  está ya determinada por el valor de los parámetros anteriores cumpliéndose  $a \in (8, 10) \text{ \AA}$ . Además también se considera que las partículas son un electrón y una partícula con carga positiva y masa infinita que representaría un protón o un ión.

Los valores de  $\lambda$ ,  $a$  y  $\beta$  que cumplen aproximadamente con los parámetros anteriores están dados en el cuadro 2.

$a(\text{\AA})$	$\beta$	$h(\text{\AA})$	$S(\text{\AA})$	$\lambda$
12	0.2	15	10	10.96
13	0.18	14.7	9.7	9.69
14	0.17	14.9	9.9	9.34
15	0.15	14	9	7.84

Cuadro 2: Valores calculados de  $a$ ,  $\beta$  y  $\lambda$  que deben caracterizar a las moléculas helicoidales chicas.

### 3.1.2 Alambres cuánticos

Por otra parte, basándonos en resultados experimentales de alambres cuánticos semiconductores las dimensiones típicas de posibles hélices formadas por estos materiales están en el rango siguiente.

$$d \in (50, 100) \text{ \AA}, a \approx 500 \text{ \AA} \text{ y } S > 30 \text{ \AA}.$$

Los valores de  $\beta$  calculados son mostrados en el cuadro 3

$\beta$	$h(\text{Å})$	$S(\text{Å})$
0.05	157	57
0.07	220	120
0.09	282	182
0.12	376	276

Cuadro 3: Valores de  $\beta$  estimados para alambres cuánticos semiconductores

De este cuadro se deduce que para  $d = 100 \text{ Å}$  y para valores de  $\beta \geq 0.05$  la condición que impone  $S$  se cumple; quedando entonces como única condición que los radios de las hélices semiconductoras sean de aproximadamente de  $500 \text{ Å}$ . Por lo cual ahora los parámetros que se deben variar en los cálculos son sólo  $\beta$  y  $\lambda$  y los cuales se estiman para diferentes semiconductores.

#### Aplicación a algunos semiconductores

En las hélices formadas por alambres cuánticos semiconductores existe una variedad de materiales caracterizados por las masas efectivas de los electrones y huecos y la constante dieléctrica de apantallamiento. Para cada uno de los siguientes materiales se estima el valor de  $\lambda$  (cuadros 4, 5, 6, 7 y 8).

	<i>GaSb</i>	
$\epsilon = 15.69$	$m_e^* = 0.047$	$m_{lh}^* = 0.06$
$\lambda$	$\beta$	$a$
0.1	0.05	502
0.19	0.07	488
0.32	0.09	499
0.55	0.12	485

Cuadro 4: Valores calculados para  $\lambda$  considerando las masas efectivas de un electrón y un hueco ligero.

<i>GaAs</i>		
$\epsilon = 13.13$	$m_e^* = 0.07$	$m_{lh}^* = 0.12$
$\lambda$	$\beta$	$a$
0.2	0.05	501
0.39	0.07	500
0.65	0.09	505
1.1	0.12	484

Cuadro 5: Valores calculados para  $\lambda$  considerando las masas efectivas de un electrón y un hueco ligero.

<i>InP</i>		
$\epsilon = 12.37$	$m_e^* = 0.073$	$m_{lh}^* = 0.078$
$\lambda$	$\beta$	$a$
0.18	0.05	498
0.35	0.07	495
0.58	0.09	498
1	0.12	486

Cuadro 6: Valores calculados para  $\lambda$  considerando las masas efectivas de un electrón y un hueco ligero.

<i>InSb</i>		
$\epsilon = 17.88$	$m_e^* = 0.015$	$m_{lh}^* = 0.021$
$\lambda$	$\beta$	$a$
0.03	0.05	517
0.05	0.07	529
0.09	0.09	481
0.17	0.12	514

Cuadro 7: Valores calculados para  $\lambda$  considerando las masas efectivas de un electrón y un hueco ligero.

<i>InAs</i>		
$\epsilon = 14.53$	$m_e^* = 0.026$	$m_{lh}^* = 0.025$
$\lambda$	$\beta$	$a$
0.05	0.05	481
0.1	0.07	492
0.17	0.09	508
0.3	0.12	507

Cuadro 8: Valores calculados para  $\lambda$  considerando las masas efectivas de un electrón y un hueco ligero.

Debido a los recientes avances en técnicas de litografía [32], es posible que en un futuro no muy remoto se puedan construir hélices semiconductoras.

toras para las cuales los radios no necesariamente deban tener el valor de  $500 \text{ \AA}$ , sino aún más pequeños. Para estos casos hemos estimado diferentes radios con diferentes valores de  $\beta$  y un valor fijo de  $\lambda = 0.25$  el cual se escoge arbitrariamente, ya que de la ecuación (3.3) se puede notar que  $a$  y  $\lambda$  son proporcionales. Por tanto, para calcular los radios de las hélices para diferentes valores de  $\lambda$  y con valores de  $\beta$  (dados en el cuadro 9) en un semiconductor dado, sólo es necesario multiplicar el valor de  $a$  por el cociente  $\frac{\lambda_p}{0.25}$  donde  $\lambda_p$  es el valor de  $\lambda$  propuesto. Por ejemplo, si se quiere saber cuánto vale el radio para  $\lambda = 0.09$  del *InSb* y  $\beta = 0.12$ , al utilizar la formula anterior se tiene que al multiplicar  $459 \text{ \AA}$  por  $\frac{0.09}{0.25}$  y el radio que resulta es  $165 \text{ \AA}$ .

	$a(\text{Å}) \quad \lambda = 0.25$			
<i>Semiconductor</i>	$\beta$ 0.05	0.07	0.09	0.12
<i>InP</i>	423	216	131	74
<i>GaAs</i>	436	223	135	77
<i>InAs</i>	1255	642	390	221
<i>GaSb</i>	815	417	253	143
<i>InSb</i>	2611	1335	810	459

Cuadro 9 Radios  $a$  en Angstroms de las hélices considerando las masas efectivas de un electrón y un hueco pesado para las partículas cargadas.

### 3.2 Funciones y energías propias

Las funciones propias calculadas para el primer estado excitado se muestran en las figuras 3.1, 3.2, 3.3 y 3.4, y las gráficas para el tercer estado excitado se muestran en las figuras 3.5, 3.6, 3.7 y 3.8. En cada una de ellas se han graficado las eigenfunciones para diferentes valores del factor de proporcionalidad de la intensidad de campo  $\lambda$  con valores constantes de  $\beta$ . Ya que las funciones de onda son antisimétricas sólo se ha graficado la parte positiva de las eigenfunciones; la antisimetría de las funciones implica que el valor de la

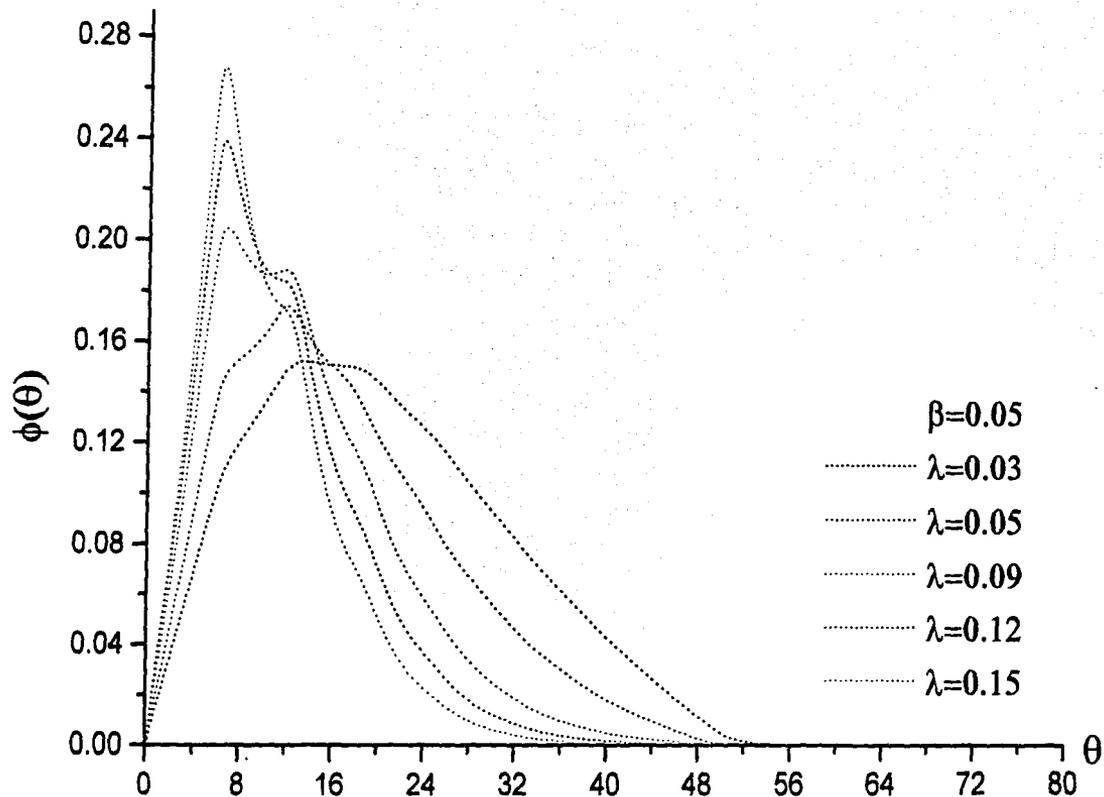


Figura 3.1

Funciones de onda del primer estado excitado para cinco valores diferentes de  $\lambda$ . Las funciones se dispersan más conforme disminuye el valor de  $\lambda$ .

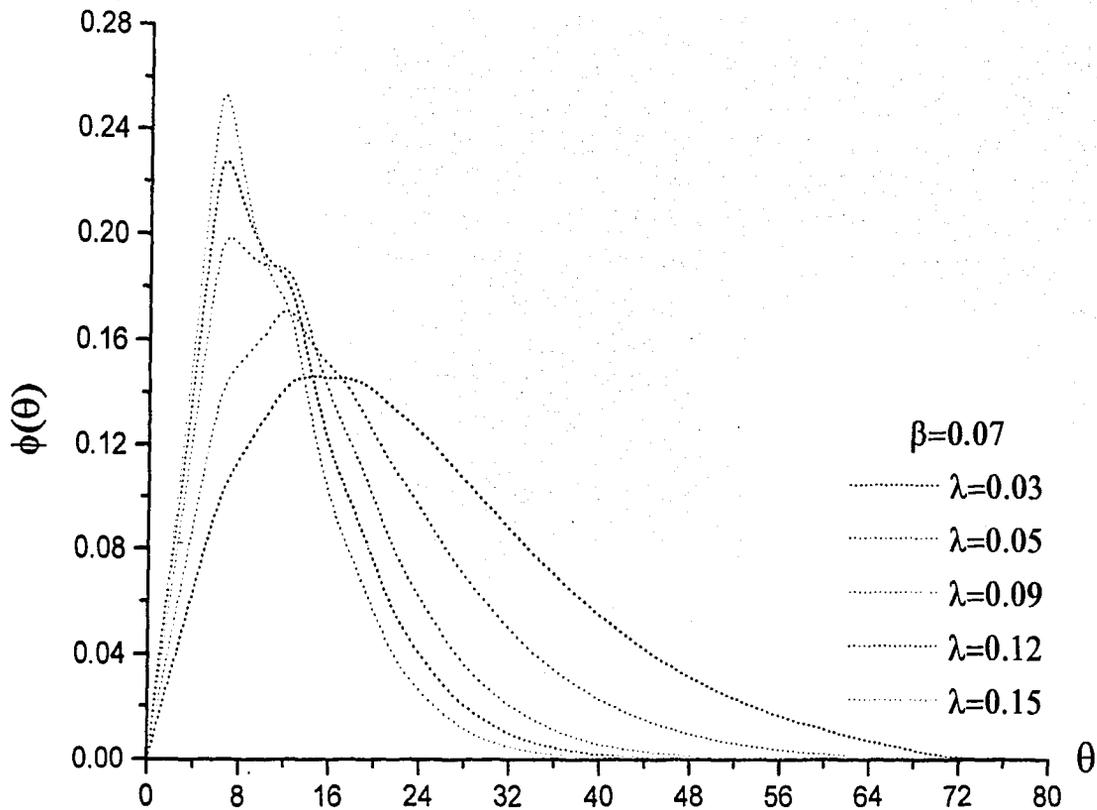


Figura 3.2

Funciones de onda del primer estado excitado. La dispersión de estas funciones es mayor que sus correspondientes anteriores cuyo valor de  $\beta$  es de 0.05.

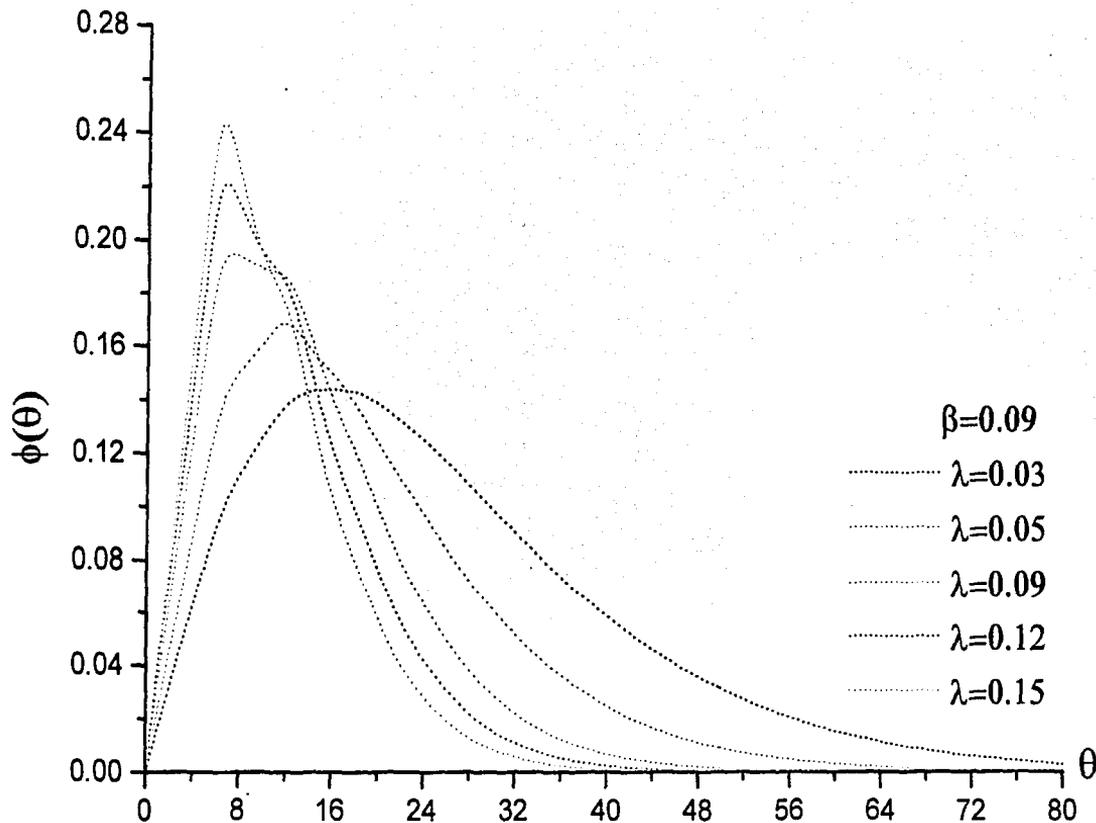


Figura 3.3

Funciones de onda del primer estado excitado. Al igual que en la anterior figura, se puede notar el aumento de la dispersión de estas funciones al disminuir el valor de  $\lambda$ .

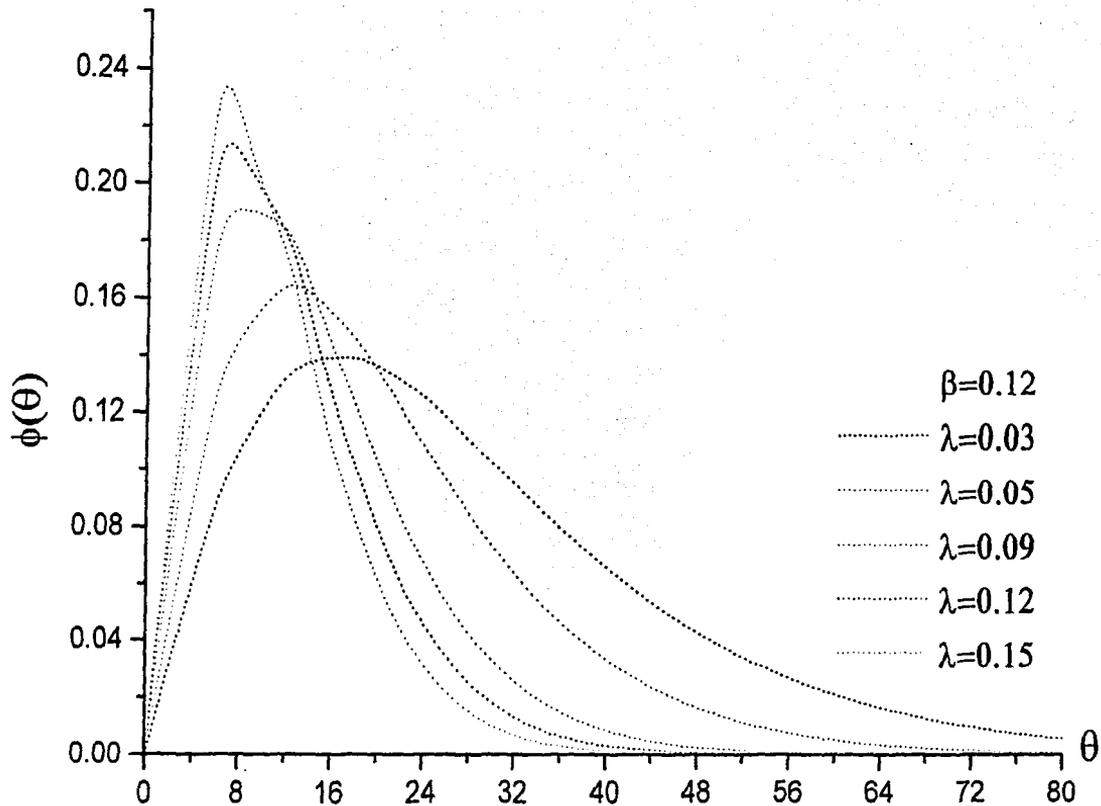


Figura 3.4

Funciones de onda para el primer estado excitado para  $\beta=0.12$ .

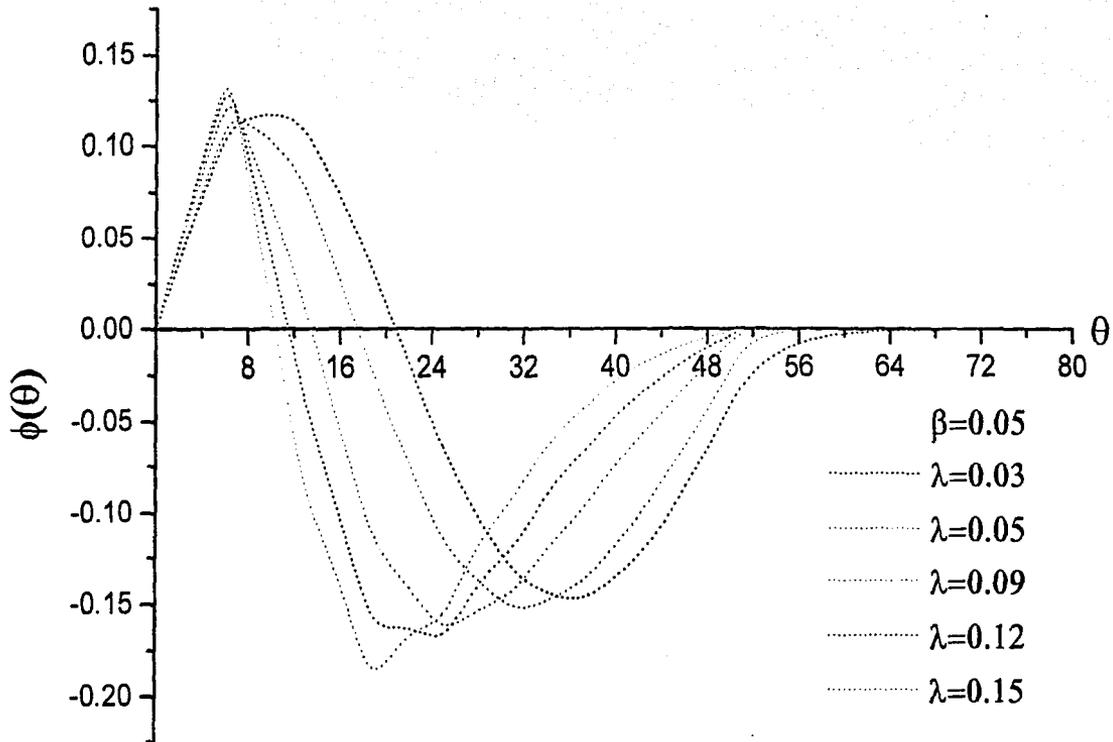


Figura 3.5

Funciones de onda del tercer estado excitado para diferentes valores de  $\lambda$  y  $\beta=0.05$ .

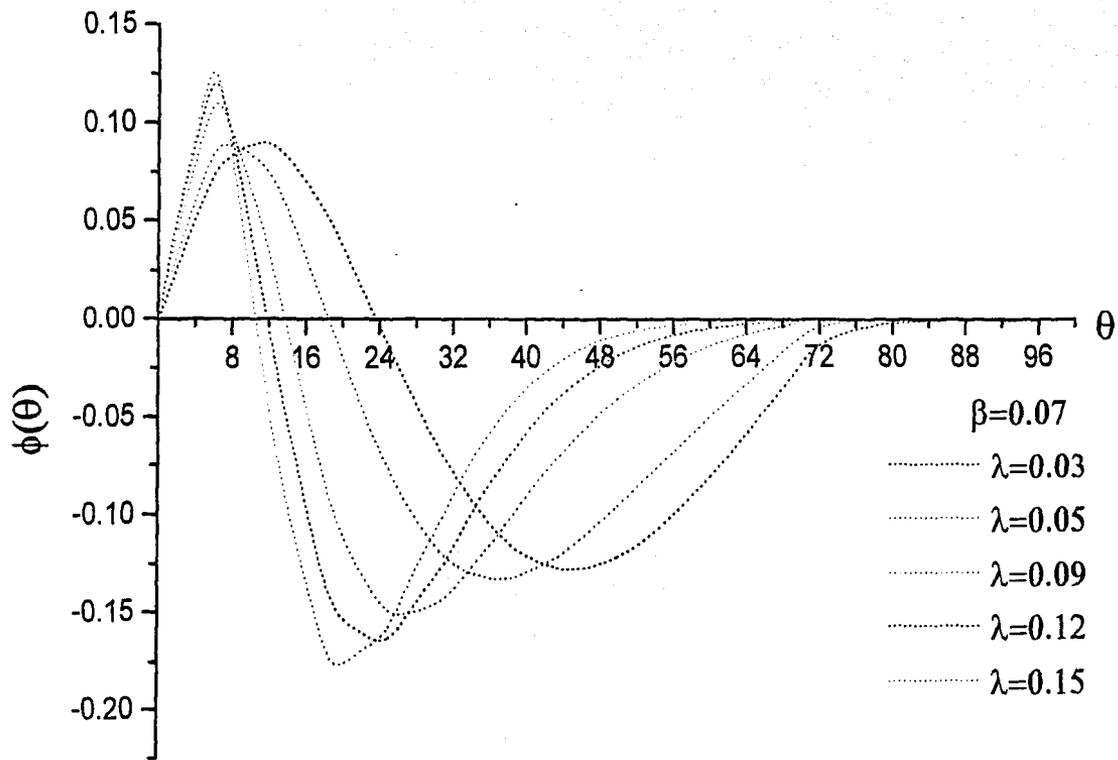


Figura 3.6

Funciones de onda del tercer estado excitado para diferentes valores de  $\lambda$  y  $\beta=0.07$

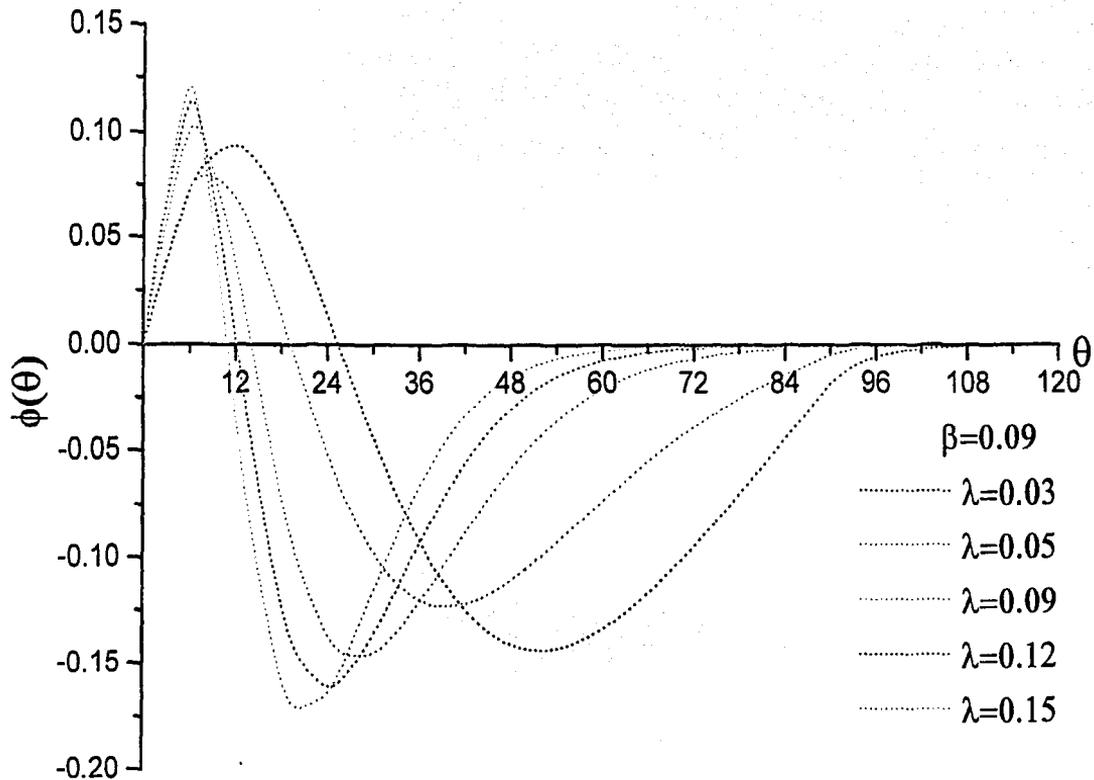


Figura 3.7

Funciones de onda del tercer estado excitado para valores diferentes de  $\lambda$  y  $\beta=0.09$ .

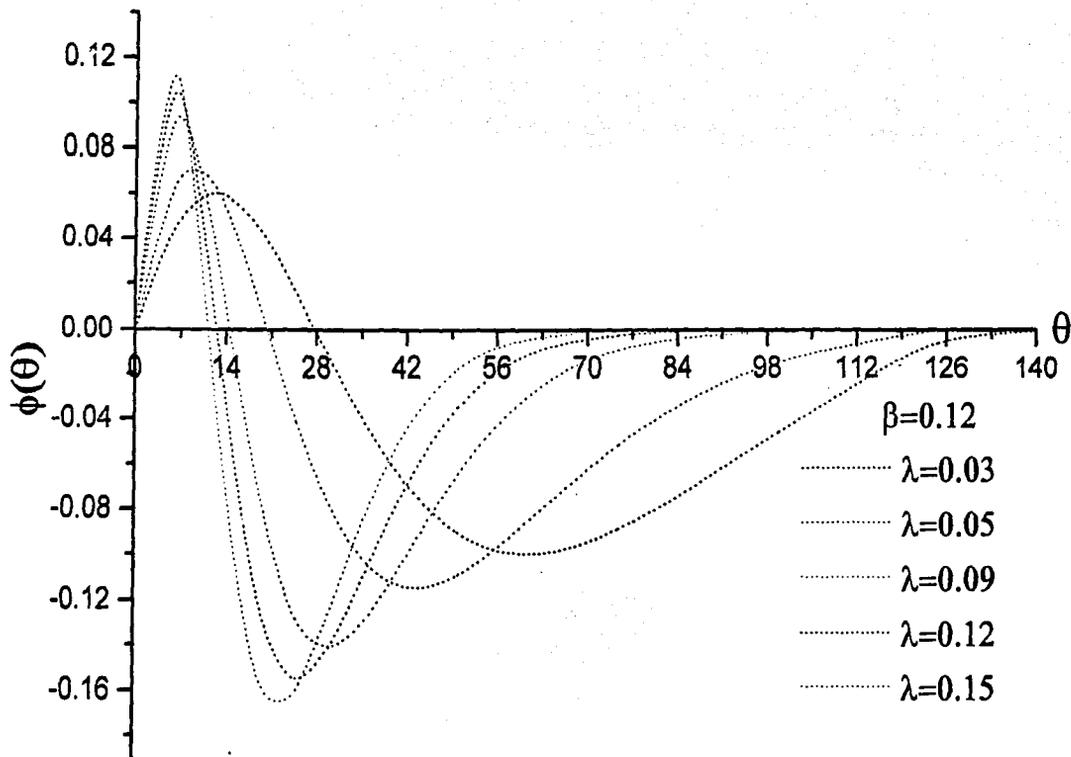


Figura 3.8

Funciones de onda del tercer estado excitado para valores diferentes de  $\lambda$  y  $\beta=0.12$ .

parte negativa es exactamente el negativo de la parte positiva de la función con respecto al eje de las ordenadas, y es por ésto que la integral de la parte positiva de la función elevada al cuadrado es igual a 0.5 en todas las gráficas de las figuras, asegurando con esto que la integral de toda función sobre todo el dominio de  $\theta$  sea la unidad.

Las gráficas del primer estado excitado mostradas en las primeras cuatro figuras exhiben como el promedio de la densidad de probabilidad relativa se acerca al origen cuando  $\lambda$  aumenta. Cuando  $\lambda = 0.05$  el máximo de las funciones para cualquier valor de  $\beta$  se sitúa en  $\theta = 4\pi = 2(2\pi)$ , ésto es la densidad de probabilidad tiene un máximo en la región que corresponde a dos giros de la hélice por abajo y por arriba pues las funciones son anti-simétricas. Cuando el valor de  $\beta$  aumenta las funciones del primer estado excitado tienden ligeramente a distribuirse más en toda la región del eje de las abscisas, lo que quiere decir que las funciones de onda se ensanchan o se dispersan.

Las funciones del tercer estado excitado tienen dos nodos más que las del estado base; uno para valores de  $\theta$  positivos y otro para  $\theta$  negativos. Su comportamiento es similar a las del primer estado excitado, ya que al incrementar el valor de  $\beta$  las funciones del tercer estado excitado tienden a distribuirse en un dominio más amplio de  $\theta$ , lo que origina que tanto los máximos como los mínimos sean menos acentuados. Por otra parte los máximos y los mínimos de las funciones se acentúan cada vez más al incrementarse el valor de  $\lambda$ .

Cuando el valor de  $\lambda$  está entre 0.05 y 0.09 no es posible decir con precisión (como en las del estado base) cuantas espiras hay entre las dos partículas cargadas que correspondan al máximo de la función de probabilidad; sólo para los dos valores más grandes de  $\lambda$  se puede decir que el máximo de la

función de probabilidad corresponde aproximadamente a seis espiras.

Las energías de amarre o eigenenergías adimensionales ya corregidas del primer y tercer estado excitado determinadas para las funciones de onda con diferentes valores de  $\beta$  y  $\lambda$  se muestran respectivamente en los siguientes cuadros 10 y 11.

$\lambda$	$\beta$	0.05	0.07	0.09	0.12
0.03		-0.0156226	-0.01249	-0.01013	-0.00764
0.05		-0.030684132	-0.024984535	-0.0208411	-0.01633401
0.09		-0.06479068	-0.053915113	-0.04604756	-0.03738025
0.12		-0.093127944	-0.077951392	-0.06708749	-0.05515771
0.15		-0.123441737	-0.103514256	-0.0894416	-0.07410118

Cuadro 10 Energías de amarre adimensionales para el primer estado excitado

$\lambda$	$\beta$	0.05	0.07	0.09	0.12
0.03		-0.004	-0.0046	-0.00376	-0.00264
0.05		-0.01551	-0.01235	-0.009424	-0.0065209
0.09		-0.039643	-0.030201	-0.02358785	-0.01702246
0.12		-0.05912	-0.0455509	-0.03617936	-0.02667499
0.15		-0.079826	-0.06217606	-0.04996708	-0.03742234

Cuadro 11 Energías de amarre adimensionales para el 3er estado excitado

En las figuras 3.9 y 3.10 se graficaron las eigenenergías del primer y tercer estado excitado respectivamente como función de  $\beta$ , donde se observó que el comportamiento mostrado era similar para los dos estados, ya que para ambos se encontró que las energías de amarre son menos negativas al aumentar el valor de  $\beta$  y de modo contrario éstas disminuyen rápidamente (son más negativas) al disminuir el valor de  $\beta$ .

Las graficas de las energías de amarre como función de  $\lambda$  del primer y tercer estado excitado se muestran en las figuras 3.11 y 3.12, respectivamente. Estas graficas se observa que las eigenenergías son menos negativas al disminuir el valor de  $\lambda$ , y más negativas al incrementar el valor de éste.

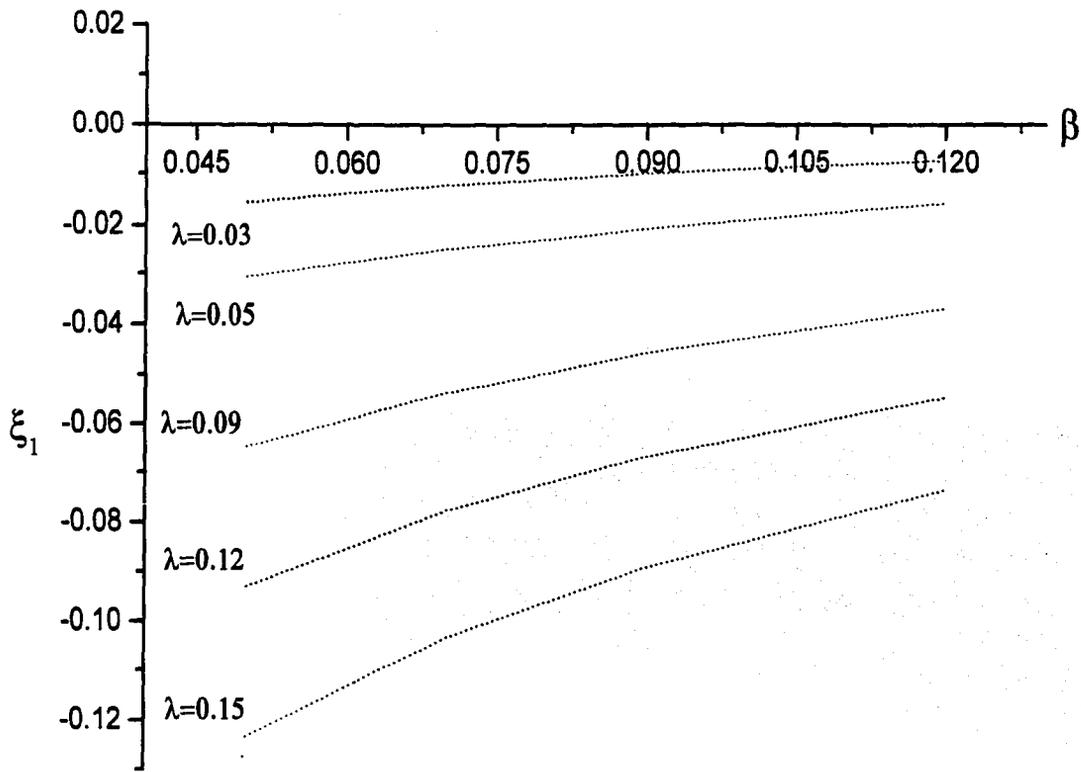


Figura 3.9

Energías de amarre adimensionales como función de  $\beta$  para el primer estado excitado. Al incrementar el valor de  $\lambda$  las funciones decrecen más rápidamente.

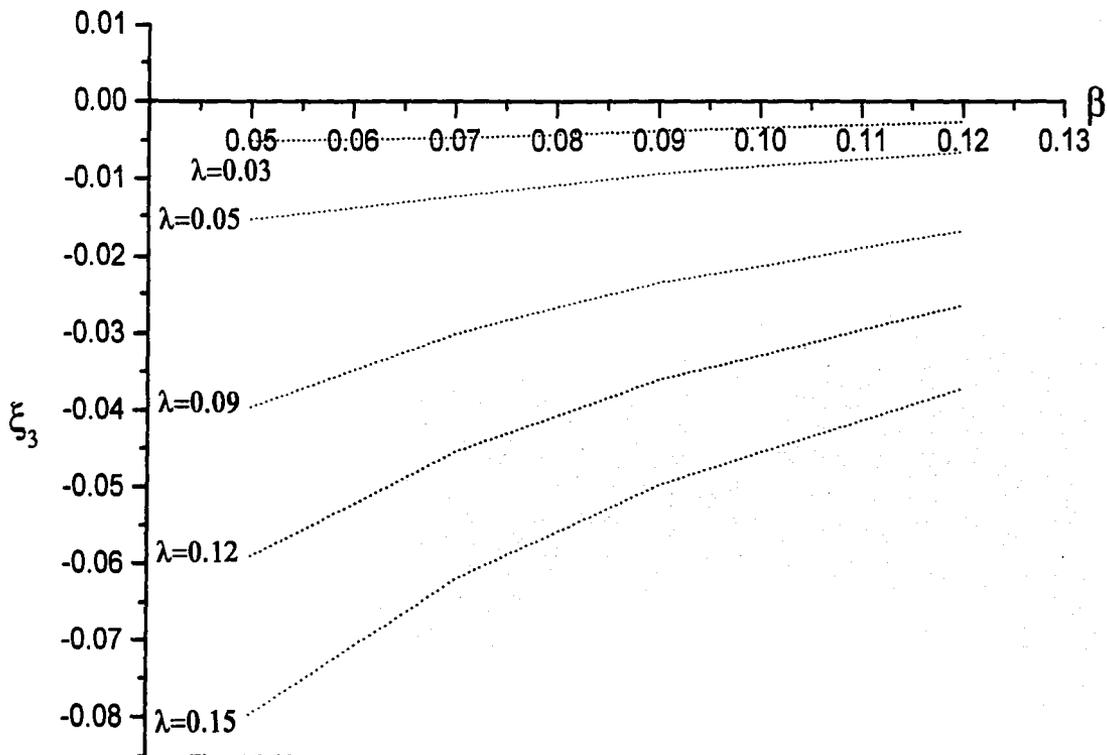


Figura 3.10

Energías de amarre adimensionales como función de  $\beta$  para el tercer estado excitado.

El decrecimiento de las energías de amarre es menos pronunciado que para las del primer estado excitado.

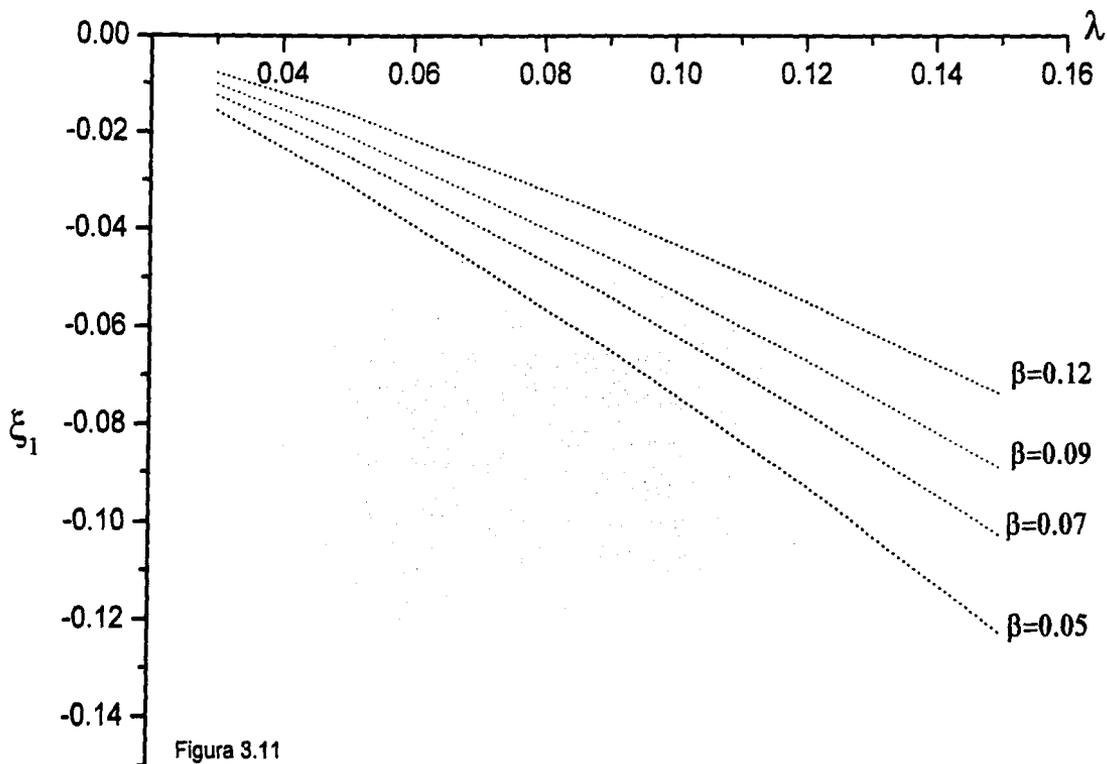


Figura 3.11

Energías de amarre adimensionales como función de  $\lambda$  para el primer estado excitado. Para un valor constante de  $\lambda$  que al ser cada vez mayor, se puede apreciar que las energías son cada vez más negativas conforme el valor de  $\beta$  disminuye.

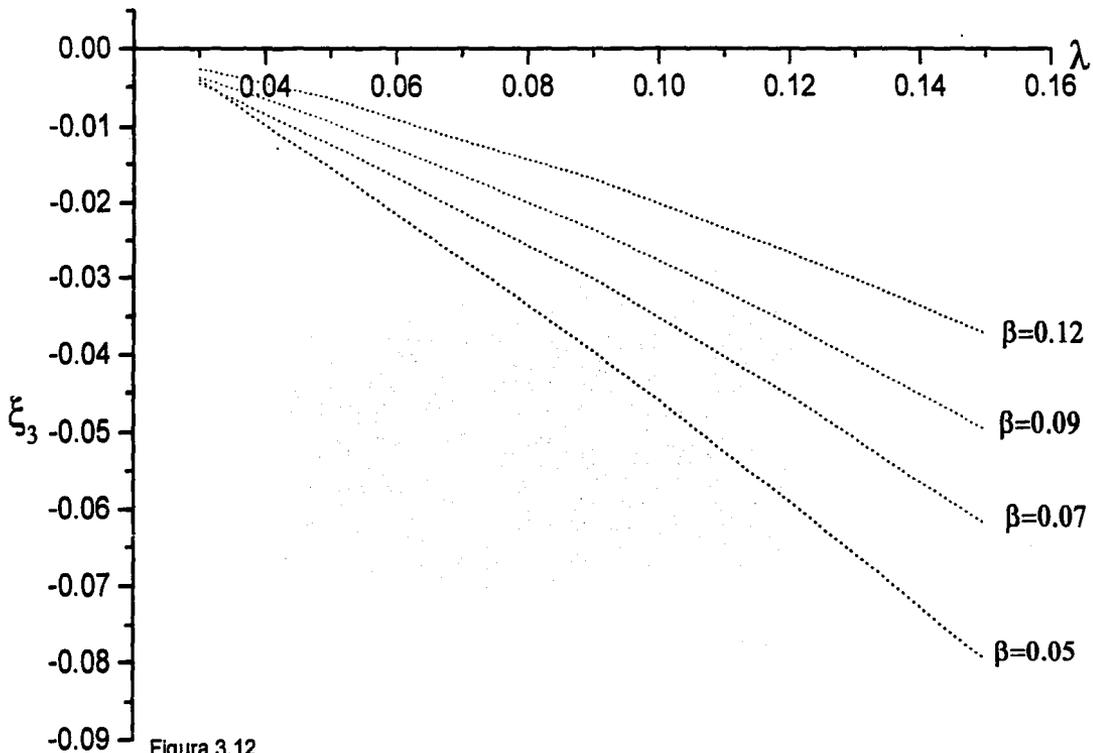


Figura 3.12

Energías de amarre adimensionales como función de  $\lambda$  para el tercer estado excitado.

### 3.3 Análisis de resultados

Las energías de amarre adimensionales mostradas en los cuadros 10 y 11 se pueden utilizar para calcular la energía excitónica de dos partículas cargadas para una hélice caracterizada por algunos de los valores de  $\beta$ , y de  $\lambda$  del cuadro 2 conociendo sus masas y la  $\epsilon$  del material en el que se encuentran. Es decir, al despejar  $E_{excit}$  de la ecuación (2.16) se tiene que

$$\frac{a^2 + \alpha^2}{a^2 \alpha^2} \frac{h^2}{2\mu} \xi = E_{excit}, \quad (3.4)$$

con  $\alpha = a\beta$  y  $a$  calculada con la ecuación (3.3). De esta manera se tienen los elementos necesarios para poder calcular la energía excitónica de dos partículas cargadas con signo opuesto. Los resultados que se presentan a continuación (cuadros 12, 13, 14, 15 y 16) son para la interacción de la masa efectiva de un electrón  $m_e^*$  y un hueco pesado  $m_{hh}^*$  (en unidades de la masa de un electrón) para los cinco semiconductores de los cuadros anteriores y tomando sólo las energías de amarre del primer estado excitado.

		<i>InP</i> $m_{hh}^* = 0.4$ $m_e^* = 0.073$							
$\lambda$	$\beta$	$\xi_0(meV)$	$\beta$	$\xi_0(meV)$	$\beta$	$\xi_0(meV)$	$\beta$	$\xi_0(meV)$	
0.03	0.05	-150.064	0.07	-235.31	0.09	-314.879	0.12	-421.245	
0.05	0.05	-106.106	0.07	-169.454	0.09	-233.216	0.12	-324.218	
0.09	0.05	-69.15	0.07	-112.861	0.09	-159.037	0.12	-229.003	
0.12	0.05	-55.9091	0.07	-91.7871	0.09	-130.333	0.12	-190.076	
0.15	0.05	-47.429	0.07	-78.0078	0.09	-111.207	0.12	-163.428	

Cuadro 12: Energías de amarre para el primer estado excitado en meV del InP.

<i>GaAs</i> $m_{hh}^* = 0.68$ $m_e^* = 0.07$								
$\lambda$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$
0.03	0.05	-137.391	0.07	-214.741	0.09	-288.493	0.12	-378.437
0.05	0.05	-97.1454	0.07	-154.641	0.09	-213.604	0.12	-291.27
0.09	0.05	-63.3105	0.07	-102.996	0.09	-145.663	0.12	-205.731
0.12	0.05	-51.1877	0.07	-83.7636	0.09	-119.373	0.12	-170.76
0.15	0.05	-43.4238	0.07	-71.1888	0.09	-101.856	0.12	-146.82

Cuadro 13: Energías de amarre en meV para el primer estado excitado del GaAs.

<i>InAs</i> $m_{hh}^* = 0.41$ $m_e^* = 0.026$								
$\lambda$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$
0.03	0.05	-43.1478	0.07	-67.2556	0.09	-89.7322	0.12	-119.18
0.05	0.05	-30.4357	0.07	-48.4328	0.09	-66.4388	0.12	-91.784
0.09	0.05	-19.8352	0.07	-32.2578	0.09	-45.3068	0.12	-64.8293
0.12	0.05	-16.0371	0.07	-26.2343	0.09	-37.1296	0.12	-53.8094
0.15	0.05	-13.6047	0.07	-22.296	0.09	-31.681	0.12	-46.2655

Cuadro 14: Energías de amarre en meV para el primer estado excitado del InAs.

<i>GaSb</i> $m_{hh}^* = 0.3$ $m_e^* = 0.047$								
$\lambda$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$
0.03	0.05	-61.5618	0.07	-95.9197	0.09	-128.297	0.12	-171.276
0.05	0.05	-43.4246	0.07	-69.0747	0.09	-94.9929	0.12	-131.905
0.09	0.05	-28.3002	0.07	-46.0059	0.09	-64.7787	0.12	-93.1676
0.12	0.05	-22.8813	0.07	-37.4153	0.09	-53.0872	0.12	-77.3306
0.15	0.05	-19.4107	0.07	-31.7984	0.09	-45.2968	0.12	-66.4891

Cuadro 15: Energías de amarre en meV para el primer estado excitado del GaSb.

<i>InSb</i> $m_{hh}^* = 0.39$ $m_e^* = 0.015$								
$\lambda$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$	$\beta$	$\xi_0(\text{meV})$
0.03	0.05	-16.8734	0.07	-26.3273	0.09	-35.2109	0.12	-46.7661
0.05	0.05	-11.9022	0.07	-18.9591	0.09	-26.0706	0.12	-36.016
0.09	0.05	-7.75675	0.07	-12.6273	0.09	-17.7784	0.12	-25.439
0.12	0.05	-6.27148	0.07	-10.2695	0.09	-14.5697	0.12	-21.1148
0.15	0.05	-5.32025	0.07	-8.72778	0.09	-12.4316	0.12	-18.1546

Cuadro 16: Energías de amarre en meV para el primer estado excitado del InSb.

## Capítulo 4

### Conclusiones

Se ha planteado el problema teórico de la solución de la ecuación de Schrödinger unidimensional de dos partículas de cargas opuestas confinadas en sistemas con simetría helicoidal. Para ello calculamos con gran precisión las energías propias y las correspondientes funciones de onda mediante una combinación de métodos analíticos y numéricos. Aunque en principio nuestro método es válido para calcular cualquier estado cuántico, por simplicidad sólo calculamos el primer y tercer estado excitado. Nuestra metodología puede aplicarse a cualquier sistema cuántico helicoidal, pero debido a los avances recientes en la construcción de estructuras semiconductores, aquí aplicamos nuestros métodos principalmente a alambres cuánticos semiconductores en forma de hélice. Sin embargo, como no encontramos en la literatura científica resultados experimentales sobre estos sistemas, utilizamos sistemas con dimensiones y composiciones factibles.

El potencial apantallado de Coulomb exhibe una estructura interesante conformada por una serie de mínimos que tienen como origen la cercanía de los puntos de la espiral al efectuar un giro completo. Encontramos que las

funciones de onda del estado base tienden a concentrar su distribuciones de probabilidad en regiones cercanas al valor de  $\theta = 2\pi$ , lo que significa que es más probable encontrar a la partícula con coordenada relativa en una región que se encuentra en la primera espira vecina de la hélice. Las funciones de onda del tercer estado excitado se comportaron de manera semejante a las del primer estado excitado, pero con densidades de probabilidad más lejanas.

Esperamos que estos resultados sean de utilidad para investigar sistemas que contengan no sólo la simetría helicoidal sino cualquier simetría similar como por ejemplo moléculas quirales, nanotubos de carbono u otros sistemas mesoscópicos.

## Bibliografía

- [1] CH. H. Leeman, *Geometría Analítica*, Editorial Limusa, 14a edición, 1990.
- [2] K. Seeger, *Semiconductor Physics*, Springer-Verlag, Berlín, 7a edición, 1999.
- [3] Editado por P. Butcher, N. H. March y M. P. Tosi, *Physics of Low-Dimensional Semiconductor Structures*, Plenum Press, New York, 1993.
- [4] Un texto elemental en esta área es: M. Ali Omar, *Elementary Solid State Physics*, Addison-Wesley, 1975.
- [5] M. Alonso y E. Finn, *Física, Vol. III : Fundamentos Cuánticos y Estadísticos*, Fondo Educativo Interamericano, S.A. México, 1976
- [6] J. R. Hook y H. E. Hall, *Solid State Physics*, John Wiley & Sons, New York, 1991,
- [7] M. Ali Omar, *Elementary Solid State Physics*, Addison-Wesley, 1975, Sec. 5.3.
- [8] H. W. Huang, *Elasticity of Lipid Bilayer Interacting with Amphiphilic Helical Peptides*, J. Phys. II France, Vol. 5, Pág. 1427 (1995).

- [9] S. Ihara y S. Itoh, *Helically Coiled Cage of Graphitic Carbon*, Phys. Rev. B, Vol. 48, Pág. 5643 (1993).
- [10] H. Ajiki y T. Ando, *Carbon Nanotubes as Quantum Wires on a Cylinder Surface*, Solid State Comm., Vol.102(2-3), págs. 135-142. (1997).
- [11] C. T. White, D. H. Robertson y J. W. Mintmire, *Helical and Rotational Symmetries of Nanoescale graphitic Tubules*, Phys. Rev. B, Vol. 47, págs. 5485-5488, (1993).
- [12] K. Akagi, R. Tamura y M. Tsukada, *Electronic Structure of Helically Coiled of Graphitic Carbon*, Phys. Rev. Lett, Vol. 74, págs. 2307-2310, (1995).
- [13] A. S. Davidov, *Teoría del Estado Sólido*, Editorial Mir, Moscú, 1981, Sec. 43.
- [14] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt Rinehart and Winston, New York, 1976, Sec. 30.
- [15] M. Alonso y E. Finn, *Física, Vol. III : Fundamentos Cuánticos y Estadísticos*, Fondo Educativo Interamericano, S.A. México, 1976
- [16] CH. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley, New York, 1997, Sec. 8.2.
- [17] A. S. Davidov, *Teoría del Estado Sólido*, Editorial Mir, Moscú, 1981, Sec. 43.
- [18] W. H. Press, B. P. Flannery, *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, 1986, New York.

- [19] L. de la Peña, *Introducción a la Mecánica Cuántica*, 2a. ed., Fondo de Cultura Económica, México D.F. 1991
- [20] Barret O'Neill, *Elementos de Geometría Diferencial*, Limusa-Wiley, México D.F., 1972.
- [21] M. Andrews, *The One-Dimensional Hydrogen Atom*, Am. J. Phys. **56**, Pág. 776 (1988)
- [22] R. Loudon, *One-Dimensional Hydrogen Atom*, Am. J. Phys. **27**, Pág. 649 (1959).
- [23] L. K. Heines y D. H. Roberts, *One-Dimensional Hydrogen Atom*, Am. J. Phys. **37**, Pág. 1145 (1969).
- [24] L. S. Davtyan, G. S. Pogosyan, A. N. Sissakian y V. M. Ter-Antonyan, *On the Hidden Symmetry of a One-Dimensional Hydrogen Atom*, J. Phys. A. **20**, Pág. 2765 (1986).
- [25] M. Andrews, *Ground State of the One-Dimensional Hydrogen Atom*, Am. J. Phys. **27**, Pág. 1194 (1966)
- [26] D. Xianxi, J. Dai, J. Dai, *Orthogonality Criteria for Singular States of the nonexistence of Stationary States with Even Parity for the One-Dimensional Hydrogen Atom*, Phys. Rev. A. **55**, Pág. 2617 (1997).
- [27] M. Andrews, *The One-Dimensional Hydrogen Atom*, Am. J. Phys. **56**, Pág. 776 (1988)

- [28] A. N. Gordeyev y S. C. Chhajlany, *One-Dimensional Hydrogen Atom: a Singular Potential in Quantum Mechanics*, J. Phys. A. **30**, Pág. 6893 (1997).
- [29] R. Loudon, *One-Dimensional Hydrogen Atom*, Am. J. Phys. **27**, Pág. 649 (1959).
- [30] G.B.Arften, *Mathematical Methods For Physicists*, Academic Press, U.S.A., 1968, Sec. 13.4.
- [31] G.B.Arften, *Mathematical Methods For Physicists*, Academic Press, U.S.A., 1968, Sec. 13.4.
- [32] A. M. Kriman, *Spectral Properties of Helical Quantum Wires, Superlattices and Microstructures*, Vol. 48, No. 4, págs. 315-319, (1995)