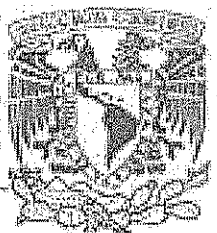


00571
4

UNAM
POSGRADO



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO
EN CIENCIAS QUÍMICAS

El pozo cuadrado cuántico
bidimensional y el
efecto de su simetría

T E S I S

PARA OBTENER EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS

Fisicoquímica
P R E S E N T A

RINA ARGELIA GARCÍA DÍAZ



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

2007



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional.

NOMBRE: Rina Argelia García

Díaz

FECHA: 14 noviembre 2012

FIRMA: [Firma]

UNAM
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS
SERVICIO DE ACREDITACIÓN Y EVALUACIÓN
CALLE DE LA MEXICALCAN 1000
C.P. 04510 MEXICO D.F.

Este trabajo estuvo respaldado por el CONACyT y se realizó en el Instituto de Ciencias Nucleares de la UNAM, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, A.P. 70-543 04510 México, D.F.

Director de tesis: Dr. Jorge Gustavo Hirsch Ganievich

Miembros del jurado

Presidente	Dr. Alejandro Frank Hoeflich
Vocal	Dr. José Francisco Recamier Angelini
Secretario	Dr. Renato Lemus Casillas
Primer suplente	Dr. Carlos Amador Bedolla
Segundo suplente	Dra. Jacqueline Quintana Hinojosa

A los Drs. Renato Lemus, Alejandro Frank y Jorge Hirsch les agradezco profundamente sus valiosísimas ideas y ayuda.

Resumen

Se obtuvieron los niveles de energía y las funciones de onda de electrones, huecos ligeros y huecos pesados en cajas cuánticas bidimensionales con un potencial de confinamiento finito, asociados a heteroestructuras semiconductoras de GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs. Se resolvió la ecuación de Schrödinger bidimensional mediante un método aproximado que consiste en considerar el Hamiltoniano en términos de un potencial separable, que genera la base, más una corrección que define el sistema de interés. Se empleó el método de vectores propios para generar una base adaptada por simetría, de tal forma que al usar los métodos variacional y perturbativo, los estados propios están dados por funciones caracterizadas por las representaciones irreducibles del grupo de simetría.

No sólomente el espectro de energía que se obtuvo es completamente diferente a aquel que surge de la aproximación de paredes infinitas, sino que también esta última presenta degeneraciones accidentales que desaparecen al considerar barreras finitas.

Los resultados que arroja esta aproximación son buenos comparados con los resultados exactos. Las pequeñas diferencias se deben a que nuestra base no es completa ya que no tomamos en cuenta el continuo.

Abstract

We have obtained the energy levels and wave functions of electrons, light holes and heavy holes in a two-dimensional GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum well semiconductor heterostructure with a confining potential. The method used to solve the two-dimensional Schrödinger equation consists in the decomposition of the square well potential, which defines the basis, in terms of a separable part plus farther contributions that define the system.

The eigenfunction method is employed in order to obtain a symmetry adapted basis, which allows to carry out the diagonalization in subspaces characterized by the symmetry group irreducible representations.

Not only the energy spectra arising from the finite barrier approximation is qualitative and quantitative different from the infinite one, but also the last one presents accidental degeneracies, beyond the obvious geometrical ones, which are removed in the presence of finite barriers.

Comparison of our results with the published exact ones, exhibits the power of the method. The small differences arise from to the effect of the continuum part of the spectrum, neglected in the diagonalization.

*El pozo cuadrado cuántico bidimensional
y el efecto de su simetría*

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

RECEIVED
JAN 15 1964
LIBRARY OF THE
UNITED STATES DEPARTMENT OF
COMMERCE
WASHINGTON, D. C.

Contenido

	pág
Introducción	1
Primera parte	
Uno	
<i>Pozo unidimensional infinito</i>	6
<i>Pozo bidimensional infinito</i>	8
Dos	
<i>Pozo unidimensional finito</i>	12
<i>Primer acercamiento a la caja cuadrada finita: el caso del potencial separable</i>	25
Tres	
<i>Teoría de perturbaciones</i>	29
<i>Corrección a primer orden</i>	30
<i>Otra alternativa: un método variacional</i>	35
Cuatro	
<i>Resultados</i>	41
Segunda parte	
Uno	
<i>Método de vectores propios</i>	47
Dos	
<i>El grupo C_{4v}</i>	80
Tres	
<i>Simetría en el problema de la caja cuadrada</i>	90
Discusión	98
Conclusiones generales	104
Apéndice	105
Referencias	108

Introducción

Las técnicas de crecimiento de materiales semiconductores que existen actualmente [1, 2, 3, 4, 5] han demostrado que es posible hacer crecer semiconductores de diferente composición atómica sobre otro sustrato semiconductor con precisión de una monocapa. Por ejemplo, se puede hacer crecer compuestos ternarios como el $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (donde la fracción mol de aluminio puede variar entre 0 y 1) sobre un sustrato de GaAs y formar de esta manera heteroestructuras que dan lugar a cajas o alambres cuánticos, donde el movimiento electrónico se encuentra restringido a una o dos dimensiones. A esas cajas y alambres que se generan se los denomina “cuánticos” por las dimensiones tan pequeñas de estos sistemas, que son de apenas unas pocas decenas de nanómetros. Esto trae como consecuencia que los electrones confinados en tales heteroestructuras, se comporten como si estuvieran dominados totalmente por las reglas de la mecánica cuántica. Por esta razón las heteroestructuras tienen aplicaciones importantes para la creación de dispositivos optoelectrónicos, como láseres o fotodetectores pues ese confinamiento bidimensional cambia profundamente las propiedades ópticas y de transporte que no presentan los semiconductores por separado [6, 7, 8, 9].

Un ejemplo típico de heteroestructura es una capa de arseniuro de galio, GaAs, localizada entre dos capas muy delgadas de arseniuro de galio y aluminio, $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, que se comportan como barreras, permitiendo el confinamiento en la región activa de GaAs. Un esquema de esta heteroestructura se muestra en la figura 1.

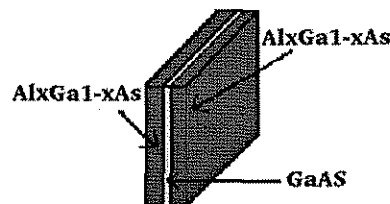


Figura 1: Esquema de una heteroestructura o caja cuántica.

Actualmente existen técnicas muy finas de crecimiento de cristales semiconductores y heteroestructuras como el Molecular Beam Epitaxy donde se puede controlar el crecimiento con la precisión de una monocapa.

En la región activa, el GaAs, en su calidad de semiconductor, presenta un diagrama de energía como función del momento como el que se puede observar en la figura 2. Allí se muestran las bandas de conducción y valencia propias del semiconductor. A bajas temperaturas los electrones se encuentran en la banda de valencia, pero si alguno se llegara a excitar migraría a la banda de conducción y en su ausencia generaría huecos o vacancias en la banda de valencia.

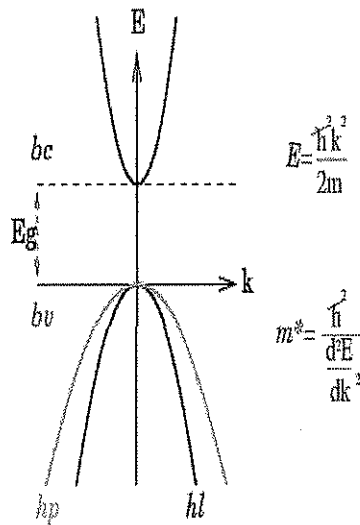
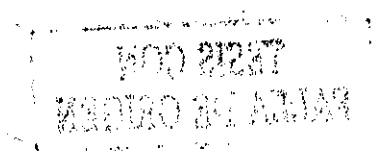


Figura 2: Esquema de la banda de valencia y sus componentes y la banda de conducción en un semiconductor.

Ahora bien, un electrón que viaja a lo largo de la red cristalina, no se comporta de la misma manera en que lo haría si estuviera libre. Esto se debe a que en su trayecto por la red va "sintiendo" el potencial de las otras partículas que se encuentran en su ruta por la malla. De esta manera las propiedades que finalmente presente el electrón en la red dependen de la dirección en la que viaje. Pero lo sorprendente de todo esto, es que es posible considerar en las ecuaciones que implican la interacción electrón-red cristalina, esas interacciones tan complicadas, simplemente cambiando en esas ecuaciones el valor de la masa del electrón en el vacío por otro valor que se denomina *masa efectiva*, es decir, es posible considerar en las ecuaciones al electrón como si fuera libre pero con una masa efectiva muy diferente a la masa del electrón en el vacío. A la derecha del diagrama en la figura 2, se muestran dos expresiones muy simples (en los



libros de Física del estado sólido la teoría de la masa efectiva es muy profunda). La segunda de ellas, nos puede permitir entrever un dato cualitativo importante sobre las masas efectivas de las partículas en las bandas pues su curvatura se encuentra muy relacionada con ellas. Así, por ejemplo, como la curvatura de la banda de valencia en el diagrama es menor que la de la banda de conducción, es posible prever que la masa efectiva de los huecos en la banda de valencia es mayor que la de los electrones que los generaron y que ahora se encuentran en la banda de conducción.

El diagrama de bandas que corresponde a toda la heteroestructura se miraría de manera aproximada como se presenta en el esquema de la figura 3, donde se observan los máximos de las bandas de valencia y los mínimos de las de conducción no sólo de la región activa sino del arsenuro de galio con impurezas de aluminio que por sus valores de energía en estas bandas constituyen barreras. Y ya se mira que debido a lo anterior se generan cajas de potencial no sólo para los electrones en la banda de conducción sino también para los huecos en la banda de valencia. De esta manera, abordar el problema de las heteroestructuras implica resolver el problema del pozo finito. En este ejemplo, el diagrama corresponde a una caja cuántica en una dimensión para un laser en una heteroestructura de GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs.

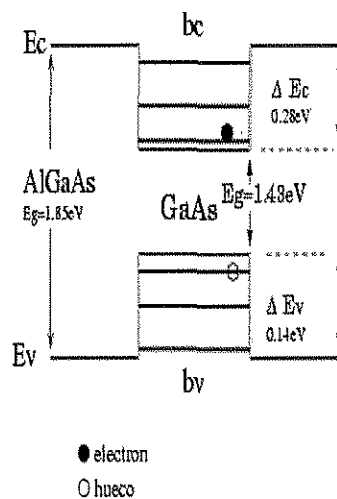


Figura 3: Diagrama de bandas de la heteroestructura GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs para una caja cuántica en una dimensión.

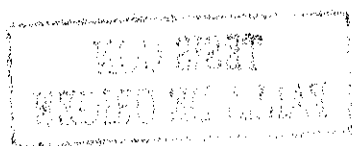
Con este trabajo pretendemos abordar el problema para una heteroestructura de GaAs/Ga_{0,63}Al_{0,37}As, en un alambre cuántico, donde el confinamiento es bidimensional. Esto implica resolver pozos finitos en dos dimensiones no sólo para los electrones en la banda de conducción, sino también para los huecos en la banda de valencia. Y puesto que la región activa es de arsenuro de galio, en la banda de valencia se generarán dos tipos de huecos: ligeros y pesados (como puede verse en la figura 2), que darán lugar a su propia caja de potencial bidimensional.

Hace poco más de veinte años, cuando se empezaban a crecer las primeras heteroestructuras, el modelo teórico que se empleaba consideraba que se estaban generando pozos bidimensionales de paredes infinitas, lo cual no es exactamente cierto si se toma en cuenta que las energías de las bandas de conducción y valencia del compuesto dopado que hace de barrera, son finitas. Sin embargo, los resultados que arrojaba esta aproximación diferían del experimento en apenas un 5%. Esto se debe a que en aquel momento las dimensiones de las heteroestructuras que se hacían crecer eran considerables (aproximadamente $1000 \times 1000 \text{Å}^2$). Con el tiempo y en busca de heteroestructuras cada vez más pequeñas, esas dimensiones fueron disminuyendo hasta el punto en que la aproximación de la caja de paredes infinitas fue insuficiente.

Hace casi trece años se publicó un trabajo [11] en donde generan un modelo del pozo finito bidimensional para las nuevas heteroestructuras más pequeñas usando el método del análisis finito. Como se tratará de explicar en la primera parte de este trabajo, nosotros tratamos generar de manera aproximada, el mismo modelo mediante una ruta alternativa que contempla como primer paso resolver en una dimensión el problema del pozo finito. Posteriormente, como un primer acercamiento a una caja en dos dimensiones, consideramos la posibilidad de que el potencial sea separable y finalmente hacemos una corrección para obtener la caja bidimensional que deseamos. En esa primera parte hacemos los cálculos necesarios para describir cajas con diferentes áreas ($100 \times 100 \text{Å}^2$, $50 \times 50 \text{Å}^2$ y $100 \times 50 \text{Å}^2$), puesto que esas son dimensiones para cajas que generan heteroestructuras que se hacen crecer todavía actualmente.

Pero antes, en la primera parte, se considera el caso de la caja bidimensional que surge bajo la aproximación de paredes infinitas, para hacer notar que los niveles de energía para el potencial finito resultan significativamente más bajos que aquellos que se obtienen con barreras infinitas. Es importante mencionar que los valores específicos para las masas efectivas, tanto para electrones en la banda de conducción, como para huecos ligeros y pesados en la banda de valencia, son parámetros ya conocidos para esta heteroestructura que tratamos de describir, por lo que no es el objetivo de este trabajo justificarlos.

Bajo el procedimiento que seguimos es posible observar cómo desaparecen las degeneraciones de ciertos niveles del alambre cuántico cuando se propone un potencial



de barrera finita para el cálculo del espectro de energía, que no se observa en la aproximación de paredes infinitas.

En la segunda parte se aborda el mismo problema desde el punto de vista de la simetría a partir de un método muy elegante y poderoso: el método de vectores propios.

Primera parte

Uno

Pozo unidimensional infinito

Consideremos un pozo infinito *unidimensional* de longitud L dividido en tres zonas como se muestra en la figura 4.

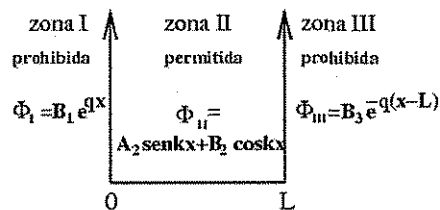


Figura 4: El potencial en un pozo unidimensional infinito.

La ecuación de Schrödinger para este sistema es:

$$\Phi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Phi = 0, \quad (1)$$

en donde

$$\Phi'' = \frac{d^2}{dx^2}\Phi. \quad (2)$$

Pero si hacemos

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \quad \text{y} \quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E), \quad (3)$$

y consideramos que $0 < E < V_0$, entonces

zona I ($x \leq 0$),

$$\Phi_I = A_1 e^{-qx} + B_1 e^{qx}, \quad (4)$$

zona II ($0 < x < L$),

$$\Phi_{II} = A_2 \text{sen} kx + B_2 \text{cos} kx, \quad (5)$$

zona III ($x > L$),

$$\Phi_{III} = A_3 e^{q(x-L)} + B_3 e^{-q(x-L)}. \quad (6)$$

Si pedimos que Φ_I y Φ_{III} sean acotadas, entonces $A_1 = A_3 = 0$, lo cual genera,

$$\begin{aligned} \Phi_I &= B_1 e^{qx} & x \leq 0, \\ \Phi_{II} &= A_2 \text{sen} kx + B_2 \text{cos} kx & 0 < x < L, \\ \Phi_{III} &= B_3 e^{-q(x-L)} & x > L. \end{aligned} \quad (7)$$

Para asegurar la continuidad de Φ y Φ' en $x = 0$ y $x = L$:

$$\begin{aligned} \Phi_I(0) &= \Phi_{II}(0); & \Phi_{II}(L) &= \Phi_{III}(L), \\ \Phi'_I(0) &= \Phi'_{II}(0); & \Phi'_{II}(L) &= \Phi'_{III}(L). \end{aligned}$$

Sin embargo, cuando $V_0 \rightarrow \infty$, $q \rightarrow \infty$, por lo que Φ_I y Φ_{III} se anulan y la función de onda queda concentrada dentro del pozo bajo la forma que indica Φ_{II} . Pero las mismas condiciones de continuidad hacen que $B_2 = 0$ y que

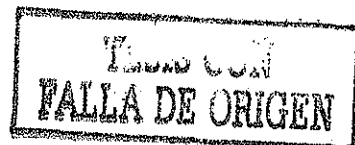
$$\Phi_n = A_n \text{sen} kL = 0, \quad (8)$$

Para que existan soluciones diferentes a la trivial, A tiene que ser diferente de cero y

$$k = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

lo que de (3) genera un espectro de energía discreto,

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad (10)$$



con eigenfunciones

$$\Phi_n = A_n \text{sen} \frac{\pi n}{L} x. \quad (11)$$

La obtención de la constante de normalización es directa, pues

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi|^2 dx = 1, \quad (12)$$

así que,

$$\Phi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen} \frac{n\pi}{L} x. \quad (13)$$

Pozo bidimensional infinito

Con los resultados de la sección anterior, ahora es posible considerar una generalización simple a dos dimensiones, ya que en el caso de potenciales infinitos el potencial es separable

$$H = H_1(x) + H_2(y) \quad y \quad \Phi(x, y) = \Phi(x)\Phi(y), \quad (14)$$

de modo que una partícula libre que se encuentre encerrada en una caja *bidimensional* impenetrable de longitud L tiene los siguientes eigenfunciones:

$$\Phi_{n_1 n_2}(x, y) = \frac{2}{L} \text{sen}\left(\frac{n_1 \pi x}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n_2 \pi y}{L}\right), \quad (15)$$

donde n_1 y n_2 son enteros positivos.

Estos estados satisfacen la condición de que $\Psi_{n_1 n_2} = 0$ en los límites de la caja y sus correspondientes eigenvalores toman la forma,

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} (n_1^2 + n_2^2), \quad (16)$$



donde m^* es la masa efectiva,¹ de los acarreadores de carga (electrones o huecos) dentro ($m^* = m_w$) de la caja.

Los eigenvalores que surgen de la ecuación 16 generan un espectro de energía infinito, sin embargo, en las siguientes tablas sólo se muestran algunos estados localizados en lo profundo de las cajas para las masas efectivas, $m_w = 0,0665m_o$, $m_w = 0,0905m_o$ y $m_w = 0,03774m_o$, donde m_o es la masa en reposo del electrón.

Cuadro 1: *Energías del pozo bidimensional infinito para electrones en la banda de conducción, donde $m_w = 0,0665m_o$.*

Area (\AA^2)	Energías E_{n_1, n_2} (meV)
50 × 50	$E_{1,1} = 452.39$
	$E_{1,2} = E_{2,1} = 1130.99$
	$E_{2,2} = 1809.58$
100 × 100	$E_{1,1} = 113.09$
	$E_{1,2} = E_{2,1} = 282.74$
	$E_{2,2} = 452.39$
	$E_{1,3} = E_{3,1} = 565.49$
	$E_{2,3} = E_{3,2} = 735.08$
	$E_{3,3} = 1017$

¹masa efectiva. Se trata de una propiedad cristalina y no de los electrones o los agujeros. Este parámetro en un semiconductor depende en cierto grado de la posición de la partícula en la banda de energía que afecta por ejemplo, la movilidad o la corriente resultante y también incluye el efecto de las vibraciones de la red en la dinámica de los electrones o agujeros.

Cuadro 2: Energías del pozo bidimensional infinito para huecos ligeros en la banda de valencia, donde $m_w = 0,0905m_0$.

Area (\AA^2)	Energías E_{n_1, n_2} (meV)
50 × 50	$E_{1,1} = 332.42$
	$E_{1,2} = E_{2,1} = 831.05$
	$E_{2,2} = 1329.69$
100 × 100	$E_{1,1} = 83.10$
	$E_{1,2} = E_{2,1} = 207.76$
	$E_{2,2} = 332.42$
	$E_{1,3} = E_{3,1} = 415.53$
	$E_{2,3} = E_{3,2} = 540.19$
	$E_{3,3} = 747.95$

Cuadro 3: Energías del pozo bidimensional infinito para huecos pesados en la banda de valencia, donde $m_w = 0,3774m_0$.

Area (\AA^2)	Energías E_{n_1, n_2} (meV)
50 × 50	$E_{1,1} = 79.71$
	$E_{1,2} = E_{2,1} = 199.29$
	$E_{2,2} = 318.86$
	$E_{1,3} = E_{3,1} = 398.57$
	$E_{2,3} = E_{3,2} = 518.14$
	$E_{3,3} = 717.43$
100 × 100	$E_{1,1} = 19.93$
	$E_{1,2} = E_{2,1} = 49.82$
	$E_{2,2} = 79.71$
	$E_{1,3} = E_{3,1} = 99.64$
	$E_{2,3} = E_{3,2} = 129.53$
	$E_{1,4} = E_{4,1} = 169.39$
	$E_{3,3} = 179.36$
	$E_{2,4} = E_{4,2} = 199.29$
	$E_{3,4} = E_{4,3} = 249.11$
	$E_{1,5} = E_{5,1} = 259.07$
	$E_{2,5} = E_{5,2} = 288.96$
	$E_{4,4} = 318.86$
	$E_{3,5} = E_{5,3} = 338.79$
	$E_{4,5} = E_{5,4} = 408.54$
	$E_{5,5} = 498.21$

Dos

Pozo unidimensional finito

Si lo que se desea es generar un modelo más cercano a la realidad, se debe entonces considerar una caja con paredes finitas, es decir, el nuevo modelo debe contemplar un potencial de confinamiento finito para el electrón.

Como punto de partida se estudia una caja unidimensional centrada en el origen cuya longitud va de $-\frac{L}{2}$ a $\frac{L}{2}$ y en la que el potencial toma la forma

$$V(x) = \begin{cases} V_o & -\infty < x \leq -\frac{L}{2} \\ 0 & -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ V_o & \frac{L}{2} \leq x < \infty \end{cases} \quad (17)$$

donde $V_o = \Delta E_v$ si se trata de huecos en la banda de valencia, o $V_o = \Delta E_c$ si son electrones en la banda de conducción, según se observa en la figura 3.

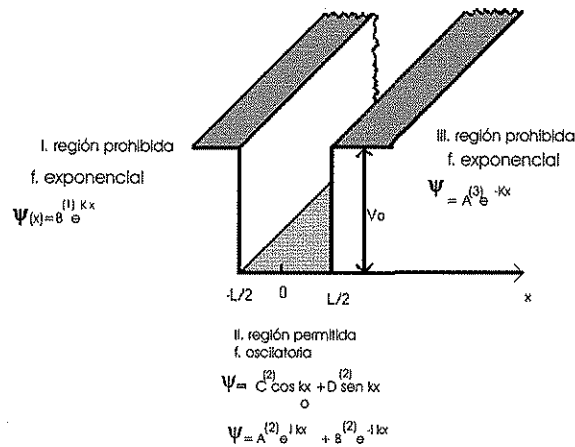


Figura 5: El potencial aproximado que experimenta un electrón en una heteroestructura.

Si en el sistema de referencia de la figura 5 consideramos a $x = 0$ como el origen, entonces la función $V(x)$ de nuestro hamiltoniano, es simétrica con respecto a la operación de inversión ($x \rightarrow -x$) desde el origen. Y ya se observa que el potencial es simétrico puesto que:

$$V(-x) = V(x). \quad (18)$$



Lo anterior implica que cada eigenfunción del sistema puede ser par o impar ante la operación de inversión, es decir, tendrá una paridad definida, puesto que las eigenfunciones de un potencial simétrico tienen paridad definida. Y justo ésto es lo que se observa, pues la dependencia en x de la función de estado del electrón se puede describir con las siguientes eigenfunciones en una dimensión [12]:

Para paridad par con $n = 1, 3, 5, \dots$

$$\Psi(x) = \begin{cases} C_{par}[\cos(k_n L/2)\exp(K_n L/2)]\exp(K_n x) & -\infty < x < -L/2 \\ C_{par}\cos k_n x & -L/2 < x < L/2 \\ C_{par}[\cos(k_n L/2)\exp(K_n L/2)]\exp(-K_n x) & L/2 < x < \infty. \end{cases} \quad (19)$$

Para paridad non con $n = 2, 4, 6, \dots$

$$\Psi(x) = \begin{cases} -C_{impar}[\sin(k_n L/2)\exp(K_n L/2)]\exp(K_n x) & -\infty < x < -L/2 \\ C_{impar}\sin k_n x & -L/2 < x < L/2 \\ C_{impar}[\sin(k_n L/2)\exp(K_n L/2)]\exp(-K_n x) & L/2 < x < \infty. \end{cases} \quad (20)$$

Donde K_n y k_n son funciones de la energía que se definen más abajo y tanto C_{par} como C_{impar} son constantes de normalización. Además se observa que la paridad de las eigenfunciones del Hamiltoniano, son reflejo de la paridad de sus funciones trigonométricas.

Cuando se toma en cuenta la existencia de masas efectivas distintas dentro (m_w) y fuera (m_b) de la caja, el número de onda (para la región permitida clásicamente) tiene la forma:

$$k_n = \sqrt{\frac{2m_w E_n}{\hbar^2}}, \quad (21)$$

y la constante de decaimiento (para las regiones prohibidas clásicamente) tiene la forma:

$$K_n = \sqrt{\frac{2m_b (V_o - E_n)}{\hbar^2}}, \quad (22)$$

ya que las condiciones a la frontera que se exigen, son que la función ψ y su primera

derivada (dividida por la masa efectiva), $(\frac{1}{m_*})(\frac{d\psi}{dx})$, sean continuas en la interfase entre la barrera y la caja:

$$\begin{aligned} \psi^I(-\frac{L}{2}) &= \psi^{II}(-\frac{L}{2}), \\ \frac{1}{m_b} \frac{d\psi(x)^I}{dx} \Big|_{x=-\frac{L}{2}} &= \frac{1}{m_w} \frac{d\psi(x)^{II}}{dx} \Big|_{x=-\frac{L}{2}}. \end{aligned} \quad (23)$$

Estas condiciones de continuidad surgen de manera natural cuando se supone que la probabilidad de flujo (o densidad de corriente) en ambas zonas (I y II) son iguales, todo, de acuerdo con la ecuación de continuidad² puesto que de antemano consideramos que las funciones y las probabilidades de flujo son continuas.

Los superíndices I y II, indican dos de las zonas de la caja en una dimensión, pues de acuerdo con lo que se observa en la figura 5 consideramos que la caja se encuentra dividida en tres zonas, donde las zonas I y III son las regiones prohibidas clásicamente a la partícula, cuyo comportamiento se describe mediante funciones exponenciales, mientras que la zona II, se considera una región clásicamente permitida a la partícula y su comportamiento lo describen funciones oscilatorias. Lo anterior da lugar a las siguientes ecuaciones trascendentes :

$$\sqrt{\frac{m_b}{m_w}} \tan \eta_n^p = \frac{\sqrt{\zeta^2 - \eta_n^{p2}}}{\eta_n^p}, \quad (24)$$

donde η_n^p representa raíces pares y

$$\sqrt{\frac{m_b}{m_w}} \cot \eta_n^i = -\frac{\sqrt{\zeta^2 - \eta_n^{i2}}}{\eta_n^i}, \quad (25)$$

donde η_n^i corresponde a las raíces impares. Además,

$$\eta_n = \sqrt{\zeta^2 - \frac{m_w L^2 \epsilon_n}{2\hbar^2}}, \quad (26)$$

y

$$\zeta = \sqrt{\frac{m_w L^2 V_0}{2\hbar^2}}, \quad (27)$$

²En el apéndice se obtienen las condiciones de continuidad como consecuencia de la conservación tanto de la densidad de probabilidad como de la probabilidad de flujo para el caso del escalón de potencial con $E > V_0$.

donde se introdujo la energía de enlace

$$\epsilon_n = V_0 - E_n, \quad (28)$$

que representa la cantidad de energía que se debería suministrar a la partícula para sacarla de la caja. La energía E_n está dada por la ecuación:

$$E_n = \frac{2\hbar^2 \eta_n^2}{m_w L^2}, \quad (29)$$

y se observa que esta ecuación permite de manera directa obtener los valores de la energía una vez que se encuentran las raíces η_n . La obtención de las eigenfunciones explícitas es directa una vez que se conocen las constantes de normalización C_{par} y C_{impar} (ver las ecuaciones 19 y 20), que para este sistema toman la forma:

$$C_{par} = \left\{ \left[\cos\left(k_n \frac{L}{2}\right) e^{K_n \frac{L}{2}} \right]^2 \left[\frac{e^{-K_n L}}{K_n} \right] + \frac{L}{2} + \frac{\sin(k_n L)}{2k_n} \right\}^{-\frac{1}{2}}, \quad (30)$$

y

$$C_{impar} = \left\{ \left[\sin\left(k_n \frac{L}{2}\right) e^{K_n \frac{L}{2}} \right]^2 \left[\frac{e^{-K_n L}}{K_n} \right] + \frac{L}{2} - \frac{\sin(k_n L)}{2k_n} \right\}^{-\frac{1}{2}}. \quad (31)$$

En lo que se refiere a la ortogonalidad en una dimensión, ocurre que las integrales de los extremos se suman (eso implica las zonas I y III) y cancelan la parte media para funciones con la misma paridad, como se observa a continuación:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{2n+1}^*(x) \Psi_{2l+1}(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{2n+1}^{*II}(x) \Psi_{2l+1}^{II}(x) dx + \left(\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{2n+1}^{*I}(x) \Psi_{2l+1}^I(x) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{2n+1}^{*III}(x) \Psi_{2l+1}^{III}(x) dx \right) = 0 \quad (32)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{2n}^*(x) \Psi_{2l}(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{2n}^{*II}(x) \Psi_{2l}^{II}(x) dx + \left(\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{2n}^{*I}(x) \Psi_{2l}^I(x) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{2n}^{*III}(x) \Psi_{2l}^{III}(x) dx \right) = 0 \quad (33)$$

con $n \neq l$. Para distintas paridades el resultado es inmediato.

Cada ecuación trascendente puede representarse mediante dos curvas, siendo las raíces de tales ecuaciones los puntos donde estas curvas se intersectan. Aunque esta forma de resolver las ecuaciones trascendentes es muy simple, también es imprecisa, por lo que empleamos un método numérico.

En las siguientes tablas se presentan las raíces que se obtienen al resolver las ecuaciones trascendentes, los números de onda (k_n), las constantes de decaimiento (K_n), las energías de enlace asociadas a cada raíz (ϵ_n) y las energías de cada sistema para las cajas con diferentes dimensiones y diferentes masas efectivas. Generalmente se emplearán unidades atómicas³ (E_h), a menos que se especifiquen otras.

Cuadro 4: *Energías en una dimensión, números de onda, etc., para los electrones en la banda de conducción con $V_o = 276\text{meV}$ y $m_w = 0,0665m_o$ y $m_b = 0,0858m_o$.*

Longitud (\AA)	no. de raíz(η_n)	raiz(η_n)	energía de enlace (mE_h)	energía (meV)	k_n	K_n
50	1(par)	0.9394	7.1735	80.87	0.01988	0.03508
	2(impar)	1.713	0.2613	268.89	0.03626	0.00670
100	1(par)	1.1809	8.9723	31.95	0.01250	0.03924
	2(impar)	2.3386	5.5404	125.29	0.02475	0.03083
	3(par)	3.3629	0.6221	259.08	0.03559	0.01033

Cuadro 5: *Energías en una dimensión, números de onda, etc., para los huecos ligeros en la banda de valencia con $V_o = 184\text{meV}$ y $m_w = 0,0905m_o$ y $m_b = 0,1107m_o$.*

Longitud (\AA)	no. de raíz(η_n)	raiz(η_n)	energía de enlace (mE_h)	energía (meV)	k_n	K_n
50	1(par)	0.9275	4.6349	57.92	0.01963	0.03203
	2(impar)	1.6471	0.0481	182.69	0.03487	0.00326
100	1(par)	1.1733	5.9125	23.17	0.01242	0.03618
	2(impar)	2.3154	3.4467	90.25	0.02450	0.02762
	3(par)	3.2719	0.1393	180.21	0.03463	0.00555

³unidades atómicas. En el apéndice se explican estas unidades.

Cuadro 6: Energías en una dimensión, números de onda, etc., para los huecos pesados con $V_o = 184\text{meV}$ y $m_w = 0,3774m_o$ y $m_b = 0,3865m_o$.

Longitud (\AA)	no. de raíz(η_n)	raíz(η_n)	energía de enlace (mE_n)	energía (meV)	k_n	K_n
50	1(par)	1.2026	5.9060	23.35	0.02545	0.06757
	2(impar)	2.3610	3.4554	90.01	0.04998	0.05168
	3(par)	3.3206	0.2193	178.03	0.07029	0.01302
100	1(par)	1.3649	6.4880	7.52	0.01444	0.07082
	2(impar)	2.7222	5.6648	29.91	0.02881	0.06617
	3(par)	4.0612	4.3168	66.58	0.04298	0.05777
	4(impar)	5.3602	2.5006	115.98	0.05673	0.04396
	5(par)	6.5345	0.4278	172.36	0.06916	0.01818

En la figura 6 se muestra el diagrama de bandas para la heteroestructura en una dimensión del alambre cuántico para la región activa con longitud de 100\AA . Se indica de manera cualitativa el número de estados ligados en cada caja de potencial. En la banda de valencia se muestran desfasadas las cajas propias de huecos ligeros y huecos pesados.

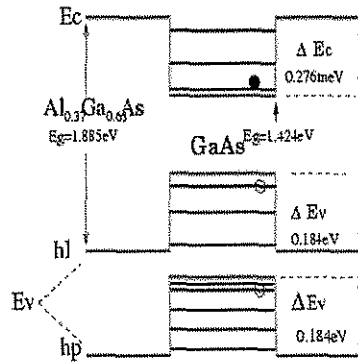


Figura 6: Diagrama de bandas para la heteroestructura $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0,63}\text{Al}_{0,37}$ en una dimensión.

Las siguientes figuras representan gráficas de las energías (en meV) del sistema de huecos pesados, caracterizado por $V_o = 184\text{meV}$, $m_w = 0,3774m_o$ y $m_b = 0,3865m_o$ para las cajas de 50\AA y 100\AA respectivamente. Se incluyen también aquellas gráficas que generan las ecuaciones trascendentes de ese mismo sistema sistema con longitud de 100\AA .



Figura 7: *Energías del pozo finito del sistema de huecos pesados con $L = 50\text{Å}$.*

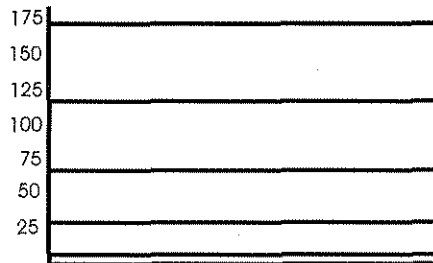
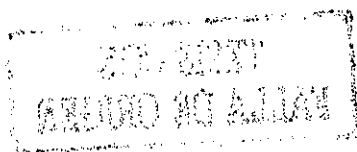


Figura 8: *Energías del pozo finito del sistema de huecos pesados con $L = 100\text{Å}$.*



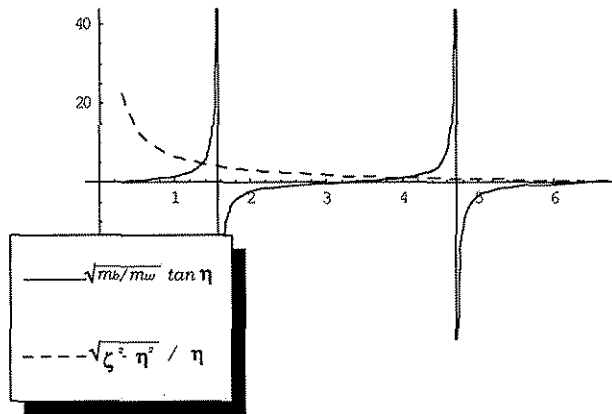


Figura 9: Esquema de las ecuaciones trascendentes para raíces pares del sistema de huecos pesados con $L = 100\text{Å}$.

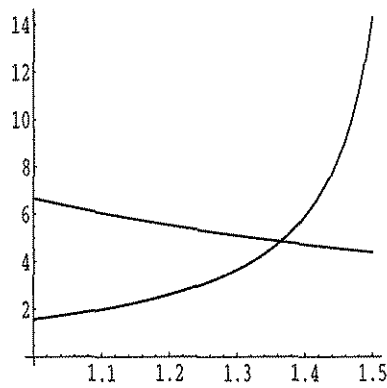


Figura 10: Primera raíz par del sistema de huecos pesados con $L = 100\text{Å}$.

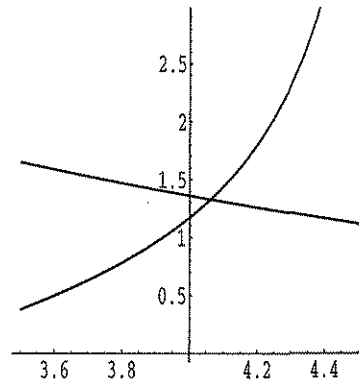


Figura 11: Segunda raíz par del sistema de huecos pesados con $L = 100\text{Å}$.

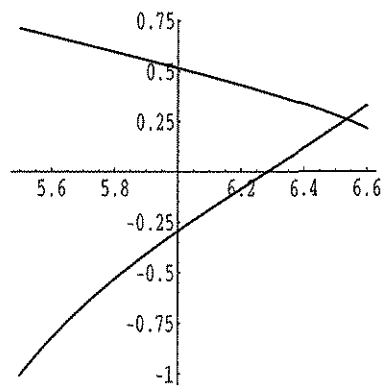
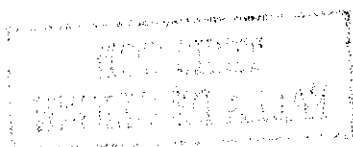


Figura 12: Tercera raíz par del sistema de huecos pesados con $L = 100\text{Å}$.



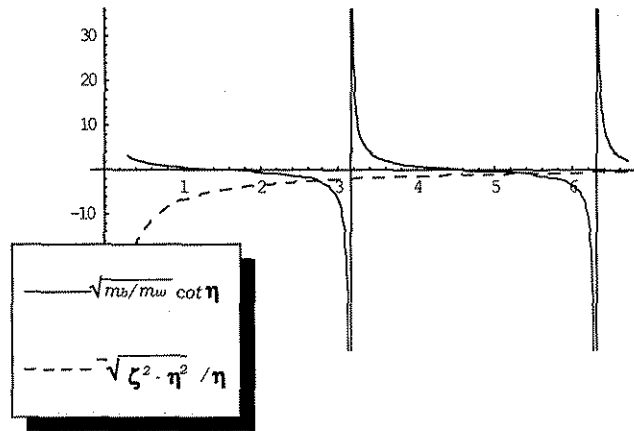


Figura 13: Esquema de las ecuaciones trascendentes para raíces impares del sistema de huecos pesados con $L = 100\text{Å}$.

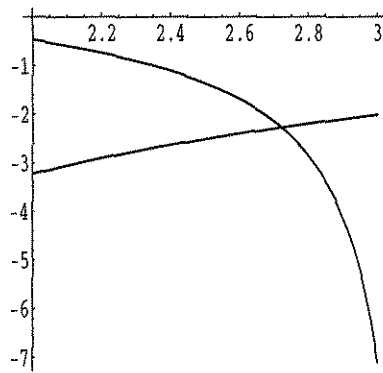


Figura 14: Primera raíz impar del sistema de huecos pesados con $L = 100\text{Å}$.

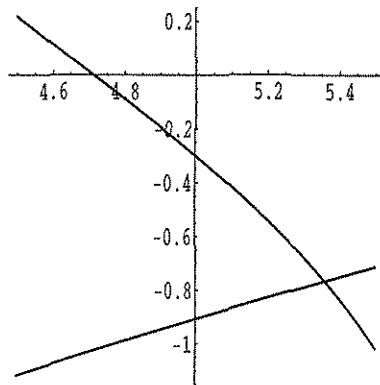


Figura 15: Segunda raíz impar del sistema de huecos pesados con $L = 100\text{\AA}$.

A continuación se muestra una lista de las funciones de onda, que serán muy útiles como se verá más adelante, para la zona I (basta con describir al sistema en una esquina puesto que la caja es simétrica) de acuerdo al sistema que describen.

Cuadro 7: *Funciones de onda para el sistema de electrones en la banda de conducción a 276meV con $m_w = 0,0665m_o$ y $m_b = 0,0858m_o$ en la zona I.*

Longitud (\AA)	$\Psi_n^o = a_n^I e^{K_n x}$
50	$\Psi_1^o(x) = 0,34378e^{K_1 x}$ $\Psi_2^o(x) = -0,00601e^{K_2 x}$
100	$\Psi_1^o(x) = 1,37828e^{K_1 x}$ $\Psi_2^o(x) = -1,15568e^{K_2 x}$ $\Psi_3^o(x) = -0,18659e^{K_3 x}$

Cuadro 8: *Funciones de onda para el sistema de huecos ligeros a 184meV con $m_w = 0,0905m_o$ y $m_b = 0,1107m_o$ en la zona I.*

Longitud (\AA)	$\Psi_n^o = a_n^I e^{K_n x}$
50	$\Psi_1^o(x) = 0,29919e^{K_1 x}$ $\Psi_2^o(x) = -0,00490e^{K_2 x}$
100	$\Psi_1^o(x) = 1,04699e^{K_1 x}$ $\Psi_2^o(x) = -0,86269e^{K_2 x}$ $\Psi_3^o(x) = -0,10099e^{K_3 x}$

Cuadro 9: Funciones de onda para el sistema de huecos pesados a 184meV con $m_w = 0,3774m_o$ y $m_b = 0,3865m_o$ en la zona I.

Longitud (\AA)	$\Psi_n^o = a_n^I e^{K_n x}$
50	$\Psi_1^o(x) = 1,10949e^{K_1 x}$
	$\Psi_2^o(x) = -0,98914e^{K_2 x}$
	$\Psi_3^o(x) = -0,16341e^{K_3 x}$
100	$\Psi_1^o(x) = 15,77927e^{K_1 x}$
	$\Psi_2^o(x) = -20,17118e^{K_2 x}$
	$\Psi_3^o(x) = -13,43428e^{K_3 x}$
	$\Psi_4^o(x) = 4,68492e^{K_4 x}$
	$\Psi_5^o(x) = 0,44149e^{K_5 x}$

Pero hasta aquı solo hemos logrado definir el problema de la caja finita unidimensional, sin embargo, el modelo que buscamos para nuestra heteroestructura requiere describir una caja bidimensional con un potencial de confinamiento finito, dentro de la cual el potencial sea cero y fuera igual a V_o (que corresponde a la altura de las paredes ΔE_v o ΔE_c), como se muestra en la siguiente figura.

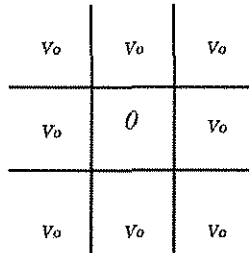
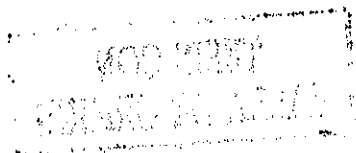


Figura 16: Vista aerea del pozo finito bidimensional.

Nosotros logramos acercarnos a ese modelo pero solo a traves de la perspectiva que ofrecen los metodos perturbativo y variacional que se abordan en el siguiente capıtulo. Antes, y con los resultados de la caja finita para una dimension, nos tomamos la libertad de hacer la suposicion de que el potencial fuera separable y generar ası una primera caja cuadrada, como se describe en la siguiente seccion.



Primer acercamiento a la caja cuadrada finita: el caso del potencial separable

En este punto es muy tentador generar un espectro de energías bidimensionales que surjan de la sola consideración de un potencial separable. Según lo que se observó de la sección anterior, ya tendríamos no sólo las raíces y con ellas las energías unidimensionales, sino también los números de onda (k_n) y las constantes de decaimiento respectivas (K_n). Así,

$$H_o(x, y)\Psi_{n,m}^o(x, y) = E_{n,m}^o \Psi_{n,m}^o(x, y), \quad (34)$$

con

$$H_o(x, y) = H_o(x) + H_o(y), \quad (35)$$

$$\Psi_{n,m}^o(x, y) = \Psi_n^o(x)\Psi_m^o(y), \quad (36)$$

y

$$E_{n,m}^o = E_n^o(x) + E_m^o(y), \quad (37)$$

además

$$V_o(x, y) = V_o(x) + V_o(y). \quad (38)$$

que en la ecuación de Schrödinger bidimensional tiene solución, cuando por separado, la ecuaciones de Schrödinger unidimensionales con $V(x)$ y $V(y)$ la tienen.

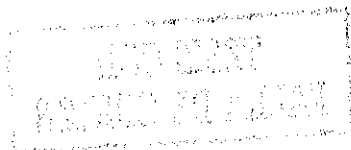
En las siguientes tablas se muestran las energías que se obtienen al considerar la suma de los potenciales en la dirección x y y para cada sistema.

Cuadro 10: Energías para el sistema de electrones en la banda de conducción para la caja finita considerando un potencial separable a 276meV con $m_w = 0,0665m_o$ y $m_b = 0,0858m_o$.

Area (\AA^2)	$E_{n,m}^o$ (meV)
50×50	$E_{1,1}^o = 161,74$
	$E_{1,2}^o = E_{2,1}^o = 349,76$
	$E_{2,2}^o = 537,78$
100×100	$E_{1,1}^o = 63,89$
	$E_{1,2}^o = E_{2,1}^o = 157,24$
	$E_{2,2}^o = 250,59$
	$E_{1,3}^o = E_{3,1}^o = 291,02$
	$E_{2,3}^o = E_{3,2}^o = 384,37$
	$E_{3,3}^o = 518,15$

Cuadro 11: Energías para el sistema de huecos ligeros en la banda de valencia para la caja finita considerando un potencial separable a 184meV con $m_w = 0,0905m_o$ y $m_b = 0,1107m_o$.

Area (\AA^2)	$E_{n,m}^o$ (meV)
50×50	$E_{1,1}^o = 115,85$
	$E_{1,2}^o = E_{2,1}^o = 240,61$
	$E_{2,2}^o = 365,38$
100×100	$E_{1,1}^o = 46,35$
	$E_{1,2}^o = E_{2,1}^o = 113,42$
	$E_{2,2}^o = 180,49$
	$E_{1,3}^o = E_{3,1}^o = 203,39$
	$E_{2,3}^o = E_{3,2}^o = 270,46$
	$E_{3,3}^o = 360,42$



Cuadro 12: Energías para el sistema de huecos pesados en la banda de valencia para la caja finita considerando un potencial separable a 184meV con $m_w = 0,3774m_o$ y $m_b = 0,3865m_o$.

Area (\AA^2)	$E_{n,m}^o$ (meV)
50 × 50	$E_{1,1}^o = 46,70$
	$E_{1,2}^o = E_{2,1}^o = 113,36$
	$E_{2,2}^o = 180,02$
	$E_{1,3}^o = E_{3,1}^o = 201,38$
	$E_{2,3}^o = E_{3,2}^o = 268,04$
	$E_{3,3}^o = 356,07$
	100 × 100
$E_{1,2}^o = E_{2,1}^o = 37,43$	
$E_{2,2}^o = 59,82$	
$E_{1,3}^o = E_{3,1}^o = 74,1$	
$E_{2,3}^o = E_{3,2}^o = 96,49$	
$E_{3,3}^o = 133,16$	
$E_{1,4}^o = E_{4,1}^o = 123,50$	
$E_{2,4}^o = E_{4,2}^o = 145,89$	
$E_{3,4}^o = E_{4,3}^o = 182,56$	
$E_{4,4}^o = 231,96$	
$E_{1,5}^o = E_{5,1}^o = 179,88$	
$E_{2,5}^o = E_{5,2}^o = 202,28$	
$E_{3,5}^o = E_{5,3}^o = 238,92$	
$E_{4,5}^o = E_{5,4}^o = 288,34$	
$E_{5,5}^o = 344,73$	

Ahora bién, es importante notar que las energías $E_{nm}^o(x, y)$ que se obtienen, si bien constituyen una primera aproximación al problema real, no describen en realidad al sistema que nos ocupa. Y es que están asociadas a un sistema en donde las cuatro esquinas de la caja han adquirido un valor de potencial de $2V_o$, por el simple hecho de que se ha considerado que el potencial es la suma de los potenciales en x y en y . El esquema correpondiente a este sistema se presenta en la figura 17. Nótese también que sólo para el caso en que $V_o \rightarrow \infty$ (o las paredes de la heteroestructura son infinitas $\Delta E_v = \Delta E_c \rightarrow \infty$), el potencial bidimensional es automáticamente separable ya que es de la forma aditiva $V(x, y) = V(x) + V(y)$.

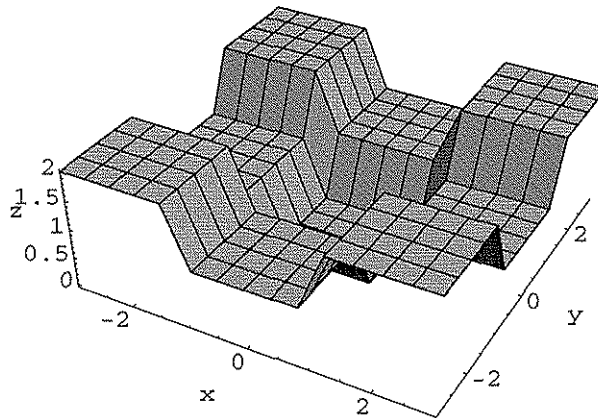


Figura 17: Sistema que se obtiene suponiendo que el potencial es separable.

Se observa que al potencial de la figura 17 se le debe hacer una corrección posterior para que sus paredes correspondan a una caja real como requiere nuestro modelo, en el cual el potencial es uniforme e igual a V_o fuera de la caja.

Así, como una primera aproximación al modelo que buscamos podemos recurrir a un método perturbativo como se observa en el siguiente capítulo, aunque en general se puede diagonalizar en una base finita (pero ésto no es exacto porque faltaría el continuo), como también se observa más adelante.

Tres

Teoría de perturbaciones

Existen problemas dentro de la mecánica cuántica, para los que se pueden formular leyes exactas y ecuaciones que gobiernen totalmente el fenómeno. Por otra parte, también se necesitan soluciones aproximadas a ecuaciones donde las soluciones rigurosas usualmente se pueden encontrar solo sobresimplificando a los modelos físicos[15]. Pero a pesar de ser soluciones aproximadas, en ocasiones pueden resultar satisfactorias, porque sirven como punto de partida para las soluciones de ecuaciones más complicadas para problemas que no poseen soluciones analíticas exactas. Si se tiene un sistema físico complejo, se elige de ser posible un sistema físico de referencia cuyas ecuaciones cuánticas se puedan resolver exactamente. El sistema complejo que nos interesa puede entonces describirse en ocasiones con muy buena aproximación en términos del sistema conocido. Estos métodos separan el hamiltoniano del problema en una parte que sí tiene solución, más una corrección o perturbación. Las funciones exactas del hamiltoniano que sí tiene solución, se usan como punto de partida o como funciones de prueba para generar las soluciones aproximadas. Existen varios niveles de aproximación que dependen de la precisión que se requiera.

Partimos de la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V_1\Psi = E\Psi, \quad (39)$$

donde V_1 es un potencial que no se puede resolver exactamente. Supongamos que conocemos las soluciones normalizadas de una ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^o + V_o\Psi^o = E^o\Psi^o, \quad (40)$$

donde V_1 difiere de V_o por un potencial⁴ $V = V_1 - V_o$. Si V es de magnitud pequeña (todavía falta precisar qué tan pequeña), intuitivamente se espera que los eigenvalores E^o de la ecuación (40) sean razonablemente cercanos a los eigenvalores E de la ecuación (39) y que las correspondientes eigenfunciones Ψ^o sean similares a Ψ .

⁴Nota. V_1 y V_o son funciones de las coordenadas y pueden diferir poco o mucho en distintas regiones.

Si la eigenfunción no perturbada Ψ^o se usa como una función de prueba y si E^o es no degenerada, la expresión que se genera es

$$\langle H \rangle = \int \Psi^{o*} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_1 \right] \Psi^o d^3r = \int \Psi^{o*} (H_o + V) \Psi^o d^3r = E^o + \int \Psi^{o*} V \Psi^o d^3r \quad (41)$$

El potencial V se denomina perturbación de la energía potencial no perturbada V_o y el cambio en el eigenvalor de la energía que es el valor esperado es

$$\Delta E = E - E^o \approx \int \Psi^{o*} V \Psi^o d^3r \quad (42)$$

Corrección a primer orden

Para obtener una primera corrección al sistema que se genera bajo la consideración de que el potencial es separable, usamos un método perturbativo como primera aproximación. Se trata de hacer una corrección en las cuatro esquinas de la caja de la figura 17, y ya se observa que para generar una caja con un potencial uniforme de valor V_o fuera del interior se requiere disminuir en V_o el potencial de las cuatro esquinas, como se muestra en la figura 18.

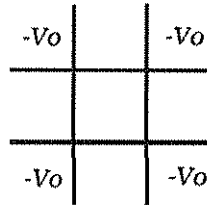


Figura 18: *Interacción para corregir la caja.*

Si consideramos que el problema que nos ocupa posee un hamiltoniano que se puede separar en un hamiltoniano H_o (que surgió de considerar el potencial aditivo en x y y) más una corrección o perturbación $-V_o$, entonces el hamiltoniano del sistema a resolver toma la forma:

$$H(x, y) = H_o(x, y) - V_o(x, y) \quad (43)$$

con

$$V_o(x, y) = \begin{cases} \mathbf{V}_o & \begin{cases} -\infty < x \leq -\frac{L}{2} & y & \begin{cases} -\infty < y \leq -\frac{L}{2} \\ 0 \\ -\frac{L}{2} \leq y \leq \frac{L}{2} \\ 0 \\ \frac{L}{2} \leq y < \infty \end{cases} \\ -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} & y & \begin{cases} -\infty < y \leq -\frac{L}{2} \\ 0 \\ \frac{L}{2} \leq y < \infty \end{cases} \\ \frac{L}{2} \leq x < \infty & y & \begin{cases} -\infty < y \leq -\frac{L}{2} \\ 0 \\ -\frac{L}{2} \leq y \leq \frac{L}{2} \\ 0 \\ \frac{L}{2} \leq y < \infty \end{cases} \end{cases} \\ \mathbf{0} & \begin{cases} -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ y \\ -\frac{L}{2} \leq y \leq \frac{L}{2} \end{cases} \end{cases} \quad (44)$$

y los elementos de matriz del mismo se describen mediante

$$\langle n, m | H | n, m \rangle = E_{n,m}^p = E_{n,m}^o - \langle n, m | V_o(x, y) | n, m \rangle \quad (45)$$

que se pueden reescribir de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} E_{n,m}^p &= E_{n,m}^o - 4 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{n,m}^{o*} V_o(x, y) \Psi_{n,m}^o dx dy \\ &= E_{n,m}^o - V_{nm, nm} \end{aligned} \quad (46)$$

en donde los valores $V_{nm, nm}$ se definen como

$$\begin{aligned} V_{nm, nm} = V_o & \left[\int_{-\infty}^{-\frac{L}{2}} \int_{-\infty}^{-\frac{L}{2}} \Psi_{n,m}^{o*}(x, y)^{I,I} \Psi_{n,m}^o(x, y)^{I,I} dx dy + \right. \\ & \int_{\frac{L}{2}}^{\infty} \int_{\frac{L}{2}}^{\infty} \Psi_{n,m}^{o*}(x, y)^{III,III} \Psi_{n,m}^o(x, y)^{III,III} dx dy + \\ & \int_{-\infty}^{-\frac{L}{2}} \int_{\frac{L}{2}}^{\infty} \Psi_{n,m}^{o*}(x, y)^{I,III} \Psi_{n,m}^o(x, y)^{I,III} dx dy + \\ & \left. \int_{\frac{L}{2}}^{\infty} \int_{-\infty}^{-\frac{L}{2}} \Psi_{n,m}^{o*}(x, y)^{III,I} \Psi_{n,m}^o(x, y)^{III,I} dx dy \right] , \end{aligned} \quad (47)$$

y donde las funciones $\Psi_{n,m}^o(x, y)$ nos permitirán hacer la corrección en las esquinas, como se observa en la figura 19. Para obtener estas funciones basta tomar en cuenta la ecuación (36) y las tablas 7,8 y 9.

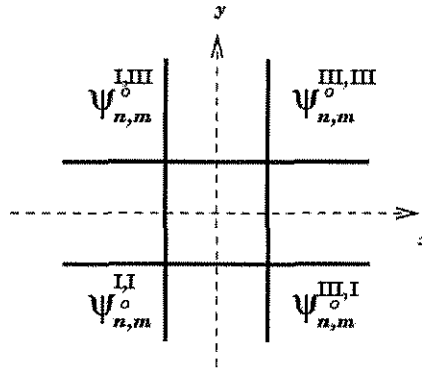


Figura 19: *Funciones para la corrección.*

La forma explícita de la ecuación (46), cuando se trata de una caja cuadrada ($100 \times 100 \text{Å}^2$ o $50 \times 50 \text{Å}^2$) y cuando $m = n$ (es decir, los elementos diagonales), está dada por

$$E_{n,n}^p = E_{n,n}^o - V_o(a_n^I)^4 \left[\frac{e^{-2K_n L}}{K_n^2} \right] \quad (48)$$

Las energías que se generan para todos los sistemas después de esta corrección usando el método perturbativo, se listan en las siguientes tablas.

Cuadro 13: Energías de la corrección a primer orden para el sistema de electrones en la banda de conducción con $m_w = 0,0665m_o$ y $m_b = 0,0858m_o$.

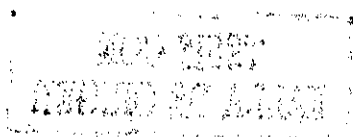
Area (\AA^2)	$E_{n,m}^p$ (meV)
50 × 50	$E_{1,1}^p = 157,61$
100 × 100	$E_{1,1}^p = 63,66$
	$E_{1,2}^p = E_{2,1}^p = 156,21$
	$E_{2,2}^p = 246,09$

Cuadro 14: Energías de la corrección a primer orden para el sistema de huecos ligeros en la banda de valencia con $m_w = 0,0905m_o$ y $m_b = 0,1107m_o$.

Area (\AA^2)	$E_{n,m}^p$ (meV)
50 × 50	$E_{1,1}^p = 112,47$
100 × 100	$E_{1,1}^p = 46,15$
	$E_{1,2}^p = E_{2,1}^p = 112,55$
	$E_{2,2}^p = 176,59$

Cuadro 15: Energías de la corrección a primer orden para el sistema de huecos pesados en la banda de valencia con $m_w = 0,3774m_o$ y $m_b = 0,3865m_o$.

Area (\AA^2)	$E_{n,m}^p$ (meV)
50 × 50	$E_{1,1}^p = 46,53$
	$E_{1,2}^p = E_{2,1}^p = 112,55$
	$E_{2,2}^p = 176,24$
100 × 100	$E_{1,1}^p = 15,03$
	$E_{1,2}^p = E_{2,1}^p = 37,41$
	$E_{2,2}^p = 59,73$
	$E_{1,3}^p = E_{3,1}^p = 74,04$
	$E_{2,3}^p = E_{3,2}^p = 96,25$
	$E_{3,3}^p = 132,56$
	$E_{1,4}^p = E_{4,1}^p = 123,38$
	$E_{2,4}^p = E_{4,2}^p = 145,37$
	$E_{3,4}^p = E_{4,3}^p = 181,27$
	$E_{1,5}^p = E_{5,1}^p = 179,54$



El efecto de esta corrección se presenta en las tablas 23, 24 y 25 del siguiente capítulo, donde se observa que muy a pesar de ser sólo una corrección a primer orden, los resultados que genera se acercan a los que tomamos como referencia y que se generan usando el método del análisis del elemento finito.

Otra alternativa: un método variacional

Puede procederse de manera más general empleando un tratamiento alternativo (que de hecho incluye la corrección que ya se describió), que consiste en diagonalizar la interacción de la figura 18 en un subespacio generado por todos los estados ligados del sistema. Esta base sin embargo, no es completa, pues para que lo fuera, necesitaríamos incluir también el continuo. Se emplean como funciones de la base las $\Psi_{n,m}^o(x, y)$ que se describen en la ecuación (36).

Así, por ejemplo, para el sistema en el que existen más estados ligados (el sistema de los huecos pesados) con $m_w = 0,3774m_o$, donde la caja tiene un área de $100 \times 100 \text{Å}^2$ y considerando sólo las funciones par-par (tomemos para ejemplificar a la función $\Psi_{1,1}(x, y)$), se propone

$$\Psi_{1,1}(x, y) = \sum_{i,j} C_{i,j}^{1,1} \Psi_{i,j}^o(x, y) \quad (49)$$

pues en una dimensión existen cinco estados ligados que generan estados en dos dimensiones que se mezclan y precisamente los coeficientes $C_{i,j}^{1,1}$ indican cómo es esa mezcla. Sus respectivos valores numéricos se pueden conocer al obtener los eigenvalores.

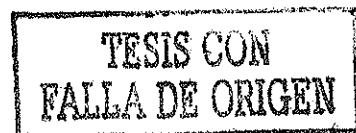
Al final,

$$\begin{aligned} \Psi_{1,1}(x, y) = & \left[C_{1,1} \Psi_{1,1}^o(x, y) + C_{1,3} \Psi_{1,3}^o(x, y) + C_{1,5} \Psi_{1,5}^o(x, y) + \right. \\ & C_{3,1} \Psi_{3,1}^o(x, y) + C_{3,3} \Psi_{3,3}^o(x, y) + C_{3,5} \Psi_{3,5}^o(x, y) + \\ & \left. C_{5,1} \Psi_{5,1}^o(x, y) + C_{5,3} \Psi_{5,3}^o(x, y) + C_{5,5} \Psi_{5,5}^o(x, y) \right] \quad (50) \end{aligned}$$

Si consideramos que

$$H(x, y) \Psi_{1,1}(x, y) = E_{1,1} \Psi_{1,1}(x, y) \quad (51)$$

y tomamos en cuenta la ecuación (43), al calcular los elementos de matriz,



$$\begin{aligned}
&\langle \Psi_{1,1}^o(x,y)|H|\Psi_{1,1}(x,y) \rangle & \langle \Psi_{1,3}^o(x,y)|H|\Psi_{1,1}(x,y) \rangle & \langle \Psi_{1,5}^o(x,y)|H|\Psi_{1,1}(x,y) \rangle \\
&\langle \Psi_{3,1}^o(x,y)|H|\Psi_{1,1}(x,y) \rangle & \langle \Psi_{3,3}^o(x,y)|H|\Psi_{1,1}(x,y) \rangle & \langle \Psi_{3,5}^o(x,y)|H|\Psi_{1,1}(x,y) \rangle \\
&\langle \Psi_{5,1}^o(x,y)|H|\Psi_{1,1}(x,y) \rangle & \langle \Psi_{5,3}^o(x,y)|H|\Psi_{1,1}(x,y) \rangle & \langle \Psi_{5,5}^o(x,y)|H|\Psi_{1,1}(x,y) \rangle
\end{aligned} \quad (52)$$

se obtiene la matriz a diagonalizar

$$\begin{pmatrix}
E_{1,1}^o - V_{11,11} & -V_{11,13} & -V_{11,15} & -V_{11,31} & -V_{11,33} & -V_{11,35} & -V_{11,51} & -V_{11,53} & -V_{11,55} \\
-V_{13,11} & E_{1,3}^o - V_{13,13} & -V_{13,15} & -V_{13,31} & -V_{13,33} & -V_{13,35} & -V_{13,51} & -V_{13,53} & -V_{13,55} \\
-V_{15,11} & -V_{15,13} & E_{1,5}^o - V_{15,15} & -V_{15,31} & -V_{15,33} & -V_{15,35} & -V_{15,51} & -V_{15,53} & -V_{15,55} \\
-V_{31,11} & -V_{31,13} & -V_{31,15} & E_{3,1}^o - V_{31,31} & -V_{31,33} & -V_{31,35} & -V_{31,51} & -V_{31,53} & -V_{31,55} \\
-V_{33,11} & -V_{33,13} & -V_{33,15} & -V_{33,31} & E_{3,3}^o - V_{33,33} & -V_{33,35} & -V_{33,51} & -V_{33,53} & -V_{33,55} \\
-V_{35,11} & -V_{35,13} & -V_{35,15} & -V_{35,31} & -V_{35,33} & E_{3,5}^o - V_{35,35} & -V_{35,51} & -V_{35,53} & -V_{35,55} \\
-V_{51,11} & -V_{51,13} & -V_{51,15} & -V_{51,31} & -V_{51,33} & -V_{51,35} & E_{5,1}^o - V_{51,51} & -V_{51,53} & -V_{51,55} \\
-V_{53,11} & -V_{53,13} & -V_{53,15} & -V_{53,31} & -V_{53,33} & -V_{53,35} & -V_{53,51} & E_{5,3}^o - V_{53,53} & -V_{53,55} \\
-V_{55,11} & -V_{55,13} & -V_{55,15} & -V_{55,31} & -V_{55,33} & -V_{55,35} & -V_{55,51} & -V_{55,53} & E_{5,5}^o - V_{55,55}
\end{pmatrix}$$

donde los elementos diagonales $E_{n,m}^o - V_{nm,nm}$ corresponden justamente a la ecuación (48) con $V_{nm,nm}$, según la ecuación (47), que de manera explícita, con $n = m$ genera

$$V_{nm,nm} = V_o(a_n^I)^4 \left[\frac{e^{-2K_n L}}{K_n^2} \right] \quad (54)$$

Para los elementos no diagonales con $n \neq m$, la ecuación anterior toma la forma,

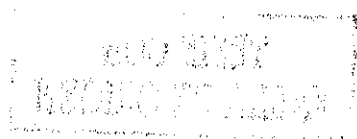
$$V_{nm,nm} = V_o(a_n^I)^2 (a_m^I)^2 \left[\frac{e^{-K_n L} e^{-K_m L}}{K_n K_m} \right] \quad (55)$$

donde los valores a_n^I corresponden a los coeficientes de las funciones de onda del pozo finito unidimensional definidas en la zona I, como se puede ver en las tablas 7, 8 y 9. Puesto que la caja es simétrica, basta definir al sistema en una sola esquina al hacer las correcciones. El tema de la simetría del sistema se discute más adelante.

Para este ejemplo en específico la matriz (53) adquiere la forma explícita

$$\begin{pmatrix}
15,03383 & 0,01739 & -0,03476 & 0,01739 & -0,05599 & 0,11192 & -0,03476 & 0,11192 & -0,22371 \\
0,01739 & 74,0419 & 0,11904 & -0,05599 & 0,18215 & -0,38330 & 0,11192 & -0,36408 & 0,76613 \\
-0,03476 & 0,11904 & 179,53931 & 0,11192 & -0,38330 & 1,10727 & -0,22371 & 0,76613 & -2,21315 \\
0,01739 & -0,05599 & 0,11192 & 74,0419 & 0,18215 & -0,36408 & 0,11904 & -0,38330 & 0,76613 \\
-0,05599 & 0,18215 & -0,38330 & 0,18215 & 132,5653 & 1,24684 & -0,38330 & 1,24684 & -2,62367 \\
0,11192 & -0,38330 & 1,10727 & -0,36408 & 1,24684 & 235,3395 & 0,76613 & -2,62367 & 7,57916 \\
-0,03476 & 0,11192 & -0,22371 & 0,11904 & -0,38330 & 0,76613 & 179,53931 & 1,10727 & -2,21315 \\
0,11192 & -0,36408 & 0,76613 & -0,38330 & 1,24684 & -2,62367 & 1,10727 & 235,3395 & 7,57916 \\
-0,22371 & 0,76613 & -2,21315 & 0,76613 & -2,62367 & 7,57916 & -2,21315 & 7,57916 & 322,8330
\end{pmatrix} \quad (56)$$

Es posible observar para este último ejemplo, que los estados de la base incluyen energías mucho mayores que la magnitud del potencial o de las paredes ΔE_v y ΔE_c



de las cajas (que corresponden a las energías $E_{5,5}, E_{5,3}, E_{3,5}$ con $2V_o > E_{nm}^o > V_o$), por lo que en primera instancia se omiten y sólomente se diagonaliza en la base de los estados ligados. Para este ejemplo, sólo se diagonaliza entonces la matriz de 6x6

$$\begin{pmatrix} 15,03383 & 0,01739 & -0,03476 & 0,01739 & -0,05599 & -0,03476 \\ 0,01739 & 74,0419 & 0,11904 & -0,05599 & 0,18215 & 0,11192 \\ -0,03476 & 0,11904 & 179,53931 & 0,11192 & -0,38330 & -0,22371 \\ 0,01739 & -0,05599 & 0,11192 & 74,0419 & 0,18215 & 0,11904 \\ -0,05599 & 0,18215 & -0,38330 & 0,18215 & 132,5653 & -0,38330 \\ -0,03476 & 0,11192 & -0,22371 & 0,11904 & -0,38330 & 179,53931 \end{pmatrix} \quad (57)$$

En adelante se procede igual para las funciones impar-impar de este mismo sistema y los restantes, así como las funciones par-impar y las cajas rectangulares de $50 \times 100\text{\AA}^2$.

A manera de comparación, en la siguiente tabla se listan los valores propios que se obtienen de la diagonalización, tanto de la matriz (56) como de la (57) para la caja simétrica del sistema de huecos pesados con área de $100 \times 100\text{\AA}^2$. Esto es, deseamos observar si existe alguna diferencia numérica considerable al hacer la diagonalización entre los valores propios al considerar algunos estados no ligados (que surgen de manera natural) y aquellos que surgen después de restringirnos sólo a los estados ligados.

Cuadro 16: Valores propios para el sistema de los huecos pesados en la banda de conducción en $GaAs/Ga_{0,63}Al_{0,37}As$, con $V_o = 184meV$, $m_w = 0.3774m_o$ y $m_b = 0,3865m_o$ y área de $100 \times 100\text{\AA}^2$ para las matrices (56) y (57).

(n_x, n_y)	$E_{n,m}^d$ (meV) matriz 6×6	$E_{n,m}^d$ (meV) matriz 9×9
(1,1)	15.03	15.03
(1,2)	37.41	37.41
(2,1)	37.41	37.41
(2,2)	59.73	59.73
(1,3) _s	73.98	73.97
(1,3) _a	74.10	74.10
(2,3)	96.25	96.24
(3,2)	96.25	96.24
(1,4)	123.37	123.37
(4,1)	123.37	123.37
(3,3)	132.56	132.49
(2,4) _s	144.88	144.85
(2,4) _a	145.87	145.87
(3,4)	181.28	181.13
(4,3)	181.28	181.13
(1,5) _s	179.32	179.17
(1,5) _a	179.76	179.76
(2,5)		200.78
(5,2)		200.78
(4,4)		229.2
(3,5) _s		231.6
(3,5) _a		237.97
(4,5)		280.74
(5,4)		280.74
(5,5)		324.18

En la siguiente tabla se muestran los eigenvectores de los estados *par-par* para el sistema de huecos pesados con un área de $100 \times 100\text{\AA}^2$, con $V_o = 184meV$, $m_w = 0,3774m_o$ y $m_b = 0,3865m_o$.

Cuadro 17: *Eigenvectores para el sistema de los huecos pesados en GaAs/Ga_{0,63}Al_{0,37}As, con $V_o = 184meV$, $m_w = 0,3774m_o$ y $m_b = 0,3865m_o$.*

$(\Psi_{n,m})$	$C_{(1,1)}$	$C_{(1,3)_s}$	$C_{(1,5)_s}$	$C_{(3,1)_e}$	$C_{(3,3)}$	$C_{(5,1)_e}$	<i>eigenvalor asoci.</i>
$\Psi_{1,1}$	1.000						15.034
$\Psi_{1,3}$	4.233×10^{-4}	0.7071	-1.566×10^{-3}	0.7071	-4.417×10^{-3}	-1.566×10^{-3}	73.984
$\Psi_{3,1}$		-0.7071	4.76×10^{-5}	0.7071		-4.76×10^{-5}	74.098
$\Psi_{3,3}$	-4.803×10^{-4}	3.1417×10^{-3}	8.181×10^{-3}	3.1417×10^{-3}	0.999	8.181×10^{-3}	132.56
$\Psi_{1,5}$	2.949×10^{-4}	-1.53×10^{-3}	-0.70706	-1.53×10^{-3}	0.01158	-0.70706	179.32
$\Psi_{5,1}$		-4.76×10^{-5}	-0.70711	4.7603×10^{-5}		0.70711	179.76

En la siguiente tabla listamos los eigenvectores para el mismo sistema anterior, que posee más estados ligados pero ahora se describen aquellos estados *impar-impar*

Cuadro 18: *Eigenvectores para el sistema de los agujeros pesados en GaAs/Ga_{0,63}Al_{0,37}As, con $V_o = 184meV$, $m_w = 0,3774m_o$ y $m_b = 0,3865m_o$.*

$(\Psi_{n,m})$	$C_{(2,2)}$	$C_{(2,4)_s}$	$C_{(4,2)_e}$	<i>eigenvalor asociado</i>
$\Psi_{2,2}$	0.9999	-2.557×10^{-3}	-2.557×10^{-3}	59.728
$\Psi_{2,4}$	-3.616×10^{-3}	-0.7071	-0.7071	144.88
$\Psi_{4,2}$		-0.7071	0.7071	145.87

Al igual que en las dos tablas anteriores, se listan los eigenvectores para el sistema con más estados ligados, pero ahora se describen los estados *par-impar*

Cuadro 19: *Eigenvectores para el sistema de los agujeros pesados en GaAs/Ga_{0,63}Al_{0,37}As, con $V_o = 184meV$, $m_w = 0,3774m_o$ y $m_b = 0,3865m_o$.*

$(\Psi_{n,m})$	$C_{(1,2)}$	$C_{(1,4)}$	$C_{(3,2)}$	$C_{(3,4)}$	<i>eigenvalor asoci.</i>
$\Psi_{1,2}$	1.0000				37.409
$\Psi_{1,4}$	-5.746×10^{-5}	-0.99999	5.916×10^{-4}	6.828×10^{-3}	123.37
$\Psi_{3,2}$	1.243×10^{-3}	5.874×10^{-4}	1.0000	-6.032×10^{-4}	96.253
$\Psi_{3,4}$	-1.086×10^{-4}	6.828×10^{-3}	5.993×10^{-4}	0.99998	181.28

A continuación se muestran los eigenvectores del sistema de huecos pesados, pero ahora cuando el sistema tiene un área de $50 \times 100 \text{Å}^2$. Se describen los estados *par-par*.

Cuadro 20: *Eigenectores para el sistema de los huecos pesados en GaAs/Ga_{0,63}Al_{0,37}As, con $V_o = 184\text{meV}$, $m_w = 0,3774m_o$ y $m_b = 0,3865m_o$ y área de $50 \times 100\text{Å}^2$.*

$(\Psi_{n,m})$	$C_{(1,1)}$	$C_{(1,3)}$	<i>eigenvalor asoc.</i>
$\Psi_{1,1}$	1.0000		30.840
$\Psi_{1,3}$		1.0000	89.609

Para el mismo sistema se describen los eigenectores de los estados *par-impar*

Cuadro 21: *Eigenectores para el sistema de los huecos pesados en GaAs/Ga_{0,63}Al_{0,37}As, con $V_o = 184\text{meV}$, $m_w = 0,3774m_o$ y $m_b = 0,3865m_o$ y área de $50 \times 100\text{Å}^2$.*

$(\Psi_{n,m})$	$C_{(1,2)}$	$C_{(1,4)}$	<i>eigenvalor asoc.</i>
$\Psi_{1,2}$	0.99999	-3.412×10^{-3}	53.262
$\Psi_{1,4}$	3.412×10^{-3}	0.99999	139.33

De nuevo, para el mismo sistema se describen los eigenectores, pero ahora de los estados *impar-par*

Cuadro 22: *Eigenectores para el sistema de los huecos pesados en GaAs/Ga_{0,63}Al_{0,37}As, con $V_o = 184\text{meV}$, $m_w = 0,3774m_o$ y $m_b = 0,3865m_o$ y área de $50 \times 100\text{Å}^2$.*

$(\Psi_{n,m})$	$C_{(2,1)}$	$C_{(2,3)}$	<i>eigenvalor asoc.</i>
$\Psi_{2,1}$	0.99997	-7.792×10^{-3}	97.526
$\Psi_{2,3}$	7.792×10^{-3}	0.99997	156.59

Cuatro

Resultados

Los métodos que se siguieron en el capítulo anterior nos permiten de manera aproximada obtener un modelo para el pozo cuántico bidimensional de una heteroestructura que describe la caja que se muestra en la siguiente figura.

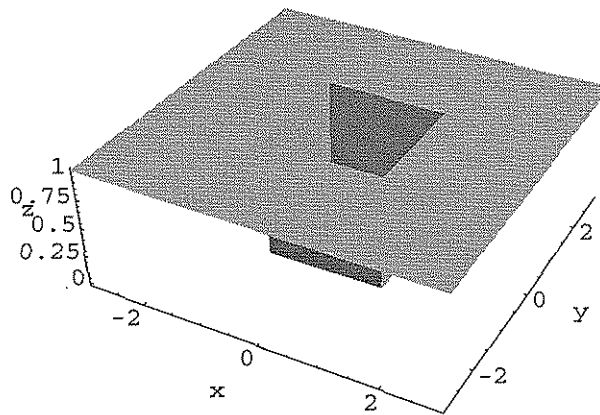


Figura 20: *Esquema del sistema corregido donde el potencial en los alrededores de la caja, con excepción del centro toman el valor de V_0 .*

De manera global, en las siguientes tablas se presentan los valores de los niveles de energía que surgen de los métodos ya expuestos para el GaAs/Ga_{0,63}Al_{0,37}As en alambres cuánticos de heteroestructuras con dimensiones $50 \times 50 \text{Å}^2$, $50 \times 100 \text{Å}^2$ y $100 \times 100 \text{Å}^2$ para diferentes valores de potencial y se comparan con los valores que se obtienen mediante el cálculo numérico del análisis del elemento finito y que tomamos como referencia [11].

Cuadro 23: Niveles de energía en meV del primer sistema de los electrones de conducción en $GaAs/Ga_{0,63}Al_{0,37}As$, con $V_o = 276meV$, $m_w = 0,0665m_o$ y $m_b = 0,0858m_o$.

Área (\AA^2)	(n_x, n_y)	Energía Ref.[11]	$E_{n,m}^o$ pot. separable	$E_{n,m}^p$ mét. perturbativo	$E_{n,m}^d$ diagonalización	Energía $V_o = \infty$
50x50	(1,1)	155.3	161.74	157.61	157.61	452.4
50x100	(1,1)	111.1	112.82	111.83	111.83	282.7
	(1,2)	197.6	206.16	201.85	201.85	452.4
100x100	(1,1)	63.5	63.89	63.66	63.66	113.1
	(1,2)	155.2	157.24	156.21	156.21	282.7
	(2,1)	155.2	157.24	156.21	156.21	282.7
	(2,2)	239.6	250.59	246.09	246.09	452.4

Cuadro 24: Niveles de energía en meV del segundo sistema de los agujeros ligeros en $GaAs/Ga_{0,63}Al_{0,37}As$, con $V_o = 184meV$, $m_w = 0,0905m_o$ y $m_b = 0,1107m_o$.

Área (\AA^2)	(n_x, n_y)	Energía Ref.[11]	$E_{n,m}^o$ pot. separable	$E_{n,m}^p$ método perturbativo	$E_{n,m}^d$ diagonalización	Energía $V_o = \infty$
50x50	(1,1)	110.7	115.85	112.47	112.47	332.4
50x100	(1,1)	79.8	81.1	80.29	80.29	207.8
	(1,2)	141.3	148.17	144.54	144.54	332.4
100x100	(1,1)	46.0	46.35	46.15	46.15	83.1
	(1,2)	111.7	113.42	112.55	112.55	207.8
	(2,1)	111.7	113.42	112.55	112.55	207.8
	(2,2)	171.0	180.49	176.59	176.59	332.4

Cuadro 25: Niveles de energía en meV del tercer sistema de los agujeros pesados en $GaAs/Ga_{0,63}Al_{0,37}As$, con $V_o = 184meV$, $m_w = 0,3774m_o$ y $m_b = 0,3865m_o$.

Área (Å ²)	(n_x, n_y)	Energía Ref.[11]	$E_{n,m}^o$ pot. separable	$E_{n,m}^P$ mét. perturbativo	$E_{n,m}^d$ diagonalización	Energía $V_o = \infty$
50x50	(1,1)	46.5	46.70	46.53	46.53	79.7
	(1,2)	112.2	113.36	112.55	112.55	199.3
	(2,1)	112.2	113.36	112.55	112.55	199.3
	(2,2)	172.7	180.02	176.24	176.24	318.8
50x100	(1,1)	30.9	30.87	30.84	30.84	49.8
	(1,2)	53.1	53.26	53.13	53.26	79.7
	(1,3)	89.5	89.93	89.61	89.61	129.5
	(2,1)	97.4	97.53	97.39	97.53	169.4
	(2,2)	119.0	119.92	119.32	119.92	199.3
	(1,4)	138.2	139.33	138.63	139.33	199.3
	(2,3)	154.0	156.59	155.09	156.59	249.1
100x100	(1,1)	15.1	15.04	15.034	15.034	19.9
	(1,2)	37.4	37.43	37.41	37.41	49.8
	(2,1)	37.4	37.43	37.41	37.41	49.8
	(2,2)	59.7	59.82	59.73	59.73	79.7
	(1,3) _s	74.0	74.1	74.04	73.98	99.6
	(1,3) _a	74.2	74.1	74.04	74.1	99.6
	(2,3)	96.2	96.49	96.25	96.25	129.5
	(3,2)	96.2	96.49	96.25	96.25	129.5
	(1,4)	123.4	123.5	123.38	123.37	169.4
	(4,1)	123.4	123.5	123.38	123.37	169.4
	(3,3)	132.2	133.16	132.56	132.56	179.4
	(2,4) _s	144.2	145.89	145.37	144.88	199.3
	(2,4) _a	145.9	145.89	145.37	145.87	199.3
	(3,4)	179.4	182.56	181.27	181.28	249.1
	(4,3)	179.4	182.56	181.27	181.28	249.1
	(1,5) _s	178.32	179.88	179.54	179.32	259.1
	(1,5) _a	179.70	179.88	179.54	179.76	259.1

Los subíndices s y a que se observan en algunos estados de la caja más profunda, se escriben por concordancia con los eigenvectores que se describen en la tabla 17, donde se indica que las funciones de onda $\Psi_{i,j}(x,y)$, son combinaciones lineales de las antiguas $\Psi_{i,j}^o(x,y)$ (ver ecuación 49) en una forma que consideramos *simétrica* cuando las constantes de normalización poseen la misma fase, o *antisimétrica* cuando no ocurre lo anterior. En la segunda parte dedicada a la simetría del sistema, se podrá observar que estos estados poseen una etiqueta especial de acuerdo con la representación irreducible que les corresponde.

En las siguientes figuras es posible observar las gráficas de las funciones de onda para los estados $(1,1)$, $(2,2)$, $(2,3)$ y $(3,2)$, respectivamente, del sistema de huecos pesados con área de $100 \times 100 \text{ \AA}^2$.

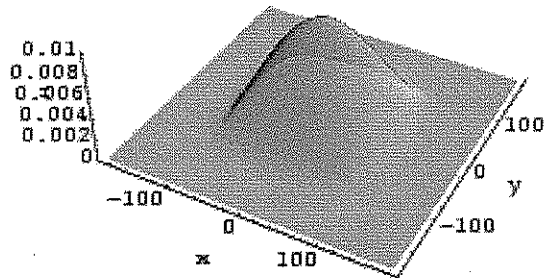


Figura 21: *Función de onda para el estado $(1,1)$ en la caja de $100 \times 100 \text{ \AA}^2$ del sistema de huecos pesados.*

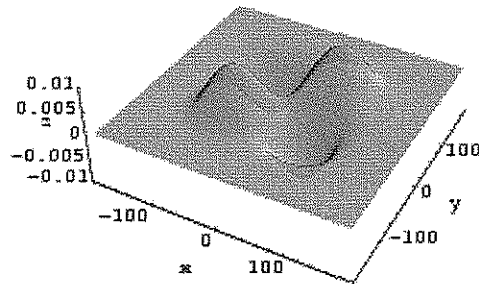


Figura 22: *Función de onda para el estado $(2,2)$ en la caja de $100 \times 100 \text{ \AA}^2$ del sistema de huecos pesados.*

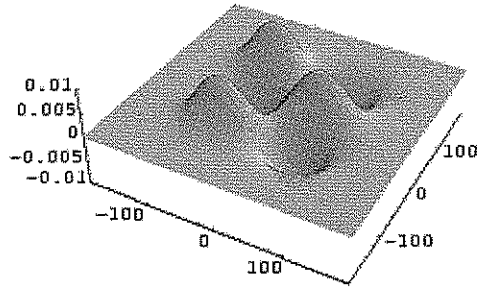


Figura 23: *Función de onda para el estado (2,3) en la caja de $100 \times 100 \text{Å}^2$ del sistema de huecos pesados.*

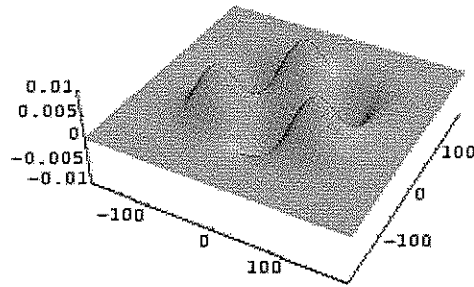


Figura 24: *Función de onda para el estado (3,2) en la caja de $100 \times 100 \text{Å}^2$ del sistema de huecos pesados.*

Hacemos ahora un pequeño recuento de lo que se ha obtenido hasta aquí: se logró construir un modelo para describir de manera aproximada una caja bidimensional con un potencial de confinamiento finito usando dos métodos por separado: un método perturbativo y uno variacional en una base donde sólo se consideran los estados ligados del sistema. Si lográramos incluir todos los elementos de la base, sería posible acercarnos todavía más en la diagonalización a los resultados que tomamos como referencia. Pero esos elementos que nos faltan se encuentran precisamente en el continuo. Los resultados que obtenemos los comparamos con aquellos que surgen del primer modelo teórico que considera paredes infinitas y también con los resultados que provienen del análisis del elemento finito del que a continuación incluimos una breve descripción pues es el tratamiento seguido en la referencia [11] que tomamos como punto de comparación.

Bajo el método del elemento finito, es posible resolver la ecuación diferencial para la función del electrón, $f(x, y)$, que ya contiene un potencial no separable puesto que

las barreras son finitas,

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)f(x, y) + V(x, y)f(x, y) = Ef(x, y) \quad , \quad (58)$$

donde m^* es la masa efectiva.

Se trata de un método variacional flexible donde la región de interés se divide en pequeños elementos, en cada uno de los cuales se toman en cuenta las condiciones físicas del problema. La función desconocida en cada elemento se aproxima a través de funciones de interpolación locales de Hermite, que poseen la propiedad de que los coeficientes de expansión corresponden a los valores de la función y sus derivadas en puntos que se denominan nodos en el elemento. La función global, $f(x, y)$ se construye uniendo las funciones de interpolación locales y pidiendo que $f(x, y)$ y sus derivadas sean continuas en las fronteras de los elementos.

Segunda parte

En esta segunda parte buscamos un acercamiento al problema del pozo cuadrado cuántico bidimensional desde la perspectiva que ofrece la simetría reconociendo que el sistema es invariante bajo las operaciones del grupo puntual C_{4v} . Con el afán de generar una base adaptada por simetría se emplea el *método de vectores propios* creado por Chen[13]. En la primera sección se tratará de describir las generalidades del método, donde se incluye, a la manera de ejemplos, el tratamiento para un par de grupos puntuales: C_{2v} y C_{3v} , en los que se observa que hasta es posible generar sus respectivas tablas de caracteres. La segunda sección se dedica exclusivamente al grupo puntual C_{4v} , puesto que corresponde al grupo de simetría de la caja cuadrada. Finalmente, en la última sección se genera la base adaptada por simetría para este sistema, en donde se verá que con ella el paso de la diagonalización se simplificará aún más.

Uno

Método de vectores propios

Representación

Si se define un conjunto de operadores $\{\hat{R}, \hat{S}, \hat{T}, \dots\}$ sobre un espacio vectorial lineal \mathbf{L} y este conjunto satisface los siguientes postulados:

- i. condición de cierre (o cerradura),
- ii. asociatividad,
- iii. existencia de la identidad,
- iv. existencia del inverso,

entonces esos operadores forman un grupo.

Si existe un mapeo homomórfico de un grupo G a un grupo de operadores $\hat{D}(G)$, se dice que $\hat{D}(G)$ forma una representación de G , donde \mathbf{L} es ahora el espacio de representación y su dimensión se denomina el grado o la dimensión de la representación $\hat{D}(G)$ [14].

Si \mathbf{L}_n es un subespacio invariante de G , entonces forma un espacio de representación de G . Es más, si se elige como base de \mathbf{L}_n a $\{\phi_i\}$, entonces las matrices asociadas a los elementos del grupo en el espacio $\mathbf{L}_n = \{\phi_i\}$ constituye una repre-

sentación \hat{D} del grupo G y las funciones $|\phi_i\rangle$ se denominan vectores base que portan la representación \hat{D} [13].

Así, como L_n es invariante bajo G ,

$$|\phi'_i\rangle = R_\alpha|\phi_i\rangle = \sum_{j=1}^n D_{ji}(R_\alpha)|\phi_j\rangle, \quad i = 1\dots n, \quad \alpha = 1\dots g. \quad (59)$$

y como los vectores base son ortonormales

$$D_{ji}(R_\alpha) = \langle\phi_j|R_\alpha|\phi_i\rangle. \quad (60)$$

Dentro de este contexto, también se cumple

$$D(R_\alpha)D(R_\beta) = D(R_\alpha R_\beta). \quad (61)$$

Representación regular

Sea G un grupo constituido por los elementos $\{R_\alpha, \alpha = 1, 2, \dots, |G|\}$ y $\phi_o(x)$ una función sin simetría bajo G , es decir, los operadores \hat{O}_{R_α} que actúan sobre $\phi_o(x)$ generan $|G|$ funciones linealmente independientes

$$\hat{O}_{R_\alpha}\phi_o(x) = \phi_\alpha(x). \quad (62)$$

Si las funciones que resultan son ortonormales, entonces

$$(\phi_\alpha(x), \phi_\beta(x)) = \delta_{\alpha\beta}. \quad (63)$$

La acción de los operadores del grupo sobre el espacio $|G|$ dimensional de funciones $\{\phi_\alpha\}$ genera la representación:

$$\hat{O}_{R_\alpha}\phi_\beta = \sum_{\beta'} D_{\beta'\beta}(R_\alpha)\phi_{\beta'}, \quad (64)$$

en donde $D(R_\alpha)$ es la representación que se denomina *regular*. Si ahora se emplea la ecuación (62) para reescribir la (64), se encuentra que

$$\hat{O}_{R_\alpha} \hat{O}_{R_\beta} \phi_o = \sum_{\beta'} D_{\beta'\beta}(R_\alpha) \hat{O}_{R_{\beta'}} \phi_o . \quad (65)$$

Aún cuando se omitiera ϕ_o y se tomara en cuenta el isomorfismo $\hat{O}_{R_\alpha} \approx R_\alpha$, la forma funcional de la ecuación se mantiene

$$R_\alpha R_\beta = \sum_{\beta'} D_{\beta'\beta}(R_\alpha) R_{\beta'} . \quad (66)$$

Esta última ecuación es muy importante porque indica que los mismos elementos del grupo R_α se pueden considerar como la base de la representación regular en lugar de las funciones $\phi_\alpha(x)$. Dentro de este contexto, la base $\{R_\alpha, \alpha = 1, 2, \dots, |G|\}$ genera lo que se denomina *espacio de grupo* \mathbf{L}_g con vectores base que satisfacen

$$(R_\alpha, R_\beta) = \delta_{\alpha,\beta} , \quad (67)$$

como lo establece (63). Pero ésto a su vez implica que

$$R_\alpha^\dagger = R_\alpha^{-1} . \quad (68)$$

Algebra de grupo

En el espacio de grupo \mathbf{L}_g , un vector se representa como

$$\mathbf{v} = \sum_{\alpha=1}^{|G|} u_\alpha R_\alpha , \quad u_\alpha \in \mathbf{C} . \quad (69)$$

Si \mathbf{w} es otro vector en el espacio,

$$\mathbf{w} = \sum_{\beta=1}^{|G|} w_\beta R_\beta , \quad (70)$$

entonces la suma de ambos vectores estará dada por

$$\mathbf{v} + \mathbf{w} = \sum_{\alpha=1}^{|G|} (u_{\alpha} + w_{\alpha}) R_{\alpha} , \quad (71)$$

el cual también está en \mathbf{L}_g .

Así mismo, se puede llevar a cabo el producto escalar (puesto que el espacio es unitario¹), entre los vectores,

$$(\mathbf{v}^i, \mathbf{v}^j) = \sum_{\alpha} u_{\alpha}^{(i)*} u_{\alpha}^j , \quad (72)$$

así como su producto $\mathbf{v}^i \mathbf{v}^j$,

$$\mathbf{v}^i \mathbf{v}^j = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} u_{\alpha}^{(i)} u_{\beta}^{(j)} R_{\alpha} R_{\beta} , \quad \in \mathbf{L}_g . \quad (73)$$

Como cabe esperar, este producto también se encuentra definido en el espacio \mathbf{L}_g . Así que todo lo anterior da lugar a la definición de álgebra, pues *un espacio lineal forma un álgebra si el espacio es cerrado bajo las operaciones binarias de suma y multiplicación*. Así que el álgebra del espacio \mathbf{L}_g se denomina *álgebra de grupo*.

Operadores de clase y representación natural

La suma de todos los elementos que pertenecen a la misma clase se denomina operador de clase. Si suponemos que la i -ésima clase tiene $|K_i|$ elementos: R_1, R_2, \dots, R_{g_i} , entonces el operador de clase es

$$K_i = \sum_{l=1}^{|K_i|} R_l^{(i)} , \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (74)$$

¹**Espacio unitario.** En un espacio vectorial abstracto, es conveniente extender el concepto de ortogonalidad y esto se hace al definir el producto interno o también llamado producto escalar. El producto interno entre dos vectores \mathbf{x}, \mathbf{y} , (\mathbf{x}, \mathbf{y}) es un número complejo y cumple los siguientes axiomas:

1. $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{y}, \mathbf{x})^*$
2. $(\alpha \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \alpha^* (\mathbf{x}, \mathbf{y})$, $\alpha \in \mathbf{C}$
3. $(x_1 + x_2, \mathbf{y}) = (x_1, \mathbf{y}) + (x_2, \mathbf{y})$
4. $(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \geq 0$

El espacio vectorial complejo bajo el cual está definido el producto interno y bajo el cual se satisfacen todos los axiomas anteriores se denomina *espacio unitario*. Cuando el producto interno se define en un espacio vectorial real, entonces éste recibe el nombre de *espacio euclidiano*

A estos operadores de clase se los puede considerar como la base de un espacio vectorial $|K|$ -dimensional. El espacio vectorial $|K|$ -dimensional, que generan los K operadores de clase K_i de un grupo G , se denomina **espacio de clase** L_c , el cual es un subespacio del espacio de grupo $|G|$ -dimensional, L_g . Cualquier vector $Q^{(\mu)}$ en L_c se puede expresar como una combinación lineal de los vectores base K_i

$$Q^{(\mu)} = \sum_{i=1}^{|K|} q_i^{(\mu)} K_i , \quad (75)$$

donde $q_i^{(\mu)}$, son números complejos y representan las coordenadas del vector $Q^{(\mu)}$.

Si $Q^{(\nu)}$ es otro vector en L_c , entonces la suma de los vectores toma la forma

$$Q^{(\mu)} + Q^{(\nu)} = \sum_{i=1}^{|K|} (q_i^{(\mu)} + q_i^{(\nu)}) K_i . \quad (76)$$

Como $L_c \subset L_g$, es posible obtener el producto escalar con base en (67) y de esta forma determinar la métrica del espacio L_c :

$$\begin{aligned} (K_i, K_j) &= \sum_{\alpha}^{g_i} \sum_{\beta}^{g_j} (R_{\alpha}^{(i)}, R_{\beta}^{(j)}) , \\ &= \sum_{\alpha}^{g_i} \sum_{\beta}^{g_j} \delta_{\alpha\beta} \delta_{i,j} , \\ &= g_i \delta_{ij} . \end{aligned} \quad (77)$$

donde $g_i = |K_i|$. Pero este resultado indica que si bien los vectores base de L_c son ortogonales, no están normalizados. También se puede definir el producto escalar de dos vectores en este espacio

$$\begin{aligned} (Q^{(\mu)}, Q^{(\nu)}) &= \sum_{i=1}^{|K|} \sum_{j=1}^{|K|} q_i^{(\mu)*} q_j^{(\nu)} (K_i, K_j) , \\ &= \sum_{i=1}^{|K|} g_i q_i^{(\mu)*} q_i^{(\nu)} . \end{aligned} \quad (78)$$

A su vez, el producto de vectores en L_c , tiene la forma

$$Q^{(\mu)} Q^{(\nu)} = \sum_{i=1}^{|K|} \sum_{j=1}^{|K|} q_i^{\mu} q_j^{\nu} K_i K_j = \sum_{i=1}^{|K|} \sum_{j=1}^{|K|} q_i^{\mu} q_j^{\nu} \sum_{k=1}^{|K|} C_{ij}^k K_k$$

$$= \sum_{k=1}^{|K|} \left\{ \sum_{i=1}^{|K|} \sum_{j=1}^{|K|} q_i^\mu q_j^\nu C_{ij}^k \right\} K_k . \quad (79)$$

que es nuevamente un vector en \mathbf{L}_c . Las constantes C_{ij}^k son números enteros y se denominan coeficientes de estructura (o constantes de estructura).

Así, puesto que estos vectores $\mathbf{Q}^{(\mu)}$ también satisfacen la condición de cierre tanto bajo la suma como bajo el producto, se tiene un álgebra en el espacio de clases \mathbf{L}_c , que se denomina *álgebra de clases*. Se dice que esta álgebra que forman a su vez los operadores de clase constituye una subálgebra del álgebra de grupos.

En resumen, los operadores de clase poseen las siguientes propiedades,

- 1. Conmutan con cualquier otro elemento del grupo G.

$$[K_i, R_a] = 0 , \quad a = 1, 2, \dots, g.$$

- 2. Conmutan con cualquier otro operador de \mathbf{L}_c .

$$[K_i, K_j] = 0 ,$$

- 3. Cierran ante el producto

$$K_i K_j = \sum_{k=1}^{|K|} C_{ij}^k K_k .$$

donde C_{ij}^k son números enteros.

Ahora bien, así como los elementos del grupo forman parte del álgebra de grupo, y éstos a su vez forman la base de la representación regular del grupo, de manera similar, en el espacio de clases los operadores de clase pueden considerarse como operadores y vectores base a la vez, de tal forma que generarán por sí mismos una representación, la cual se denomina *representación natural* del álgebra de clases. Así, de manera análoga a la ecuación (66),

$$\hat{K}_i K_j = \sum_k \Delta_{kj}(K_i) K_k , \quad (80)$$

en donde $\Delta(K_i)$ constituye una representación matricial de la clase K_i con dimensión $|K|$ a la cual se denomina *representación natural* del álgebra de clases. Se observa que la representación $\Delta(K_i)$ corresponde a los coeficientes de estructura del álgebra de clases

$$\Delta_{kj}(K_i) = C_{ij}^k . \quad (81)$$

Así pues, la tabla de multiplicación de clases genera de manera directa la representación natural.

Tomaremos como ejemplo al grupo abeliano C_{2v} (de hecho la molécula de agua es invariante bajo este grupo)

$$C_{2v} = \{E; C_2; \sigma_v^a, \sigma_v^b\} , \quad (82)$$

donde E corresponde a la identidad, C_2 a una rotación de 180 grados y las σ_v a reflexiones sobre los ejes de coordenadas como se muestra en la figura 25.

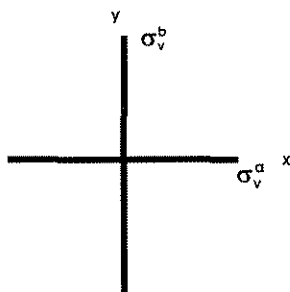


Figura 25: Sistema de referencia y elementos de simetría del grupo C_{2v} .

De hecho, el efecto de estos operadores sobre una función $f(x, y)$ es:

$$\begin{aligned} Ef(x, y) &= f(x, y) \\ C_2f(x, y) &= f(-x, -y) \\ \sigma_v^a f(x, y) &= f(x, -y) \\ \sigma_v^b f(x, y) &= f(-x, y) \end{aligned} \quad (83)$$

C_{2v}	E	C_2	σ_v^a	σ_v^b	permutaciones asociadas
	1	2	3	4	
E	E	C_2	σ_v^a	σ_v^b	e
C_2	C_2	E	σ_v^b	σ_v^a	(12)(34)
σ_v^a	σ_v^a	σ_v^b	E	C_2	(13)(24)
σ_v^b	σ_v^b	σ_v^a	C_2	E	(14)(23)

Cuadro 26: tabla de multiplicación del grupo C_{2v} .

La tabla de multiplicación de este grupo se presenta en la tabla 26.

Empleando el sistema de referencia de la figura 25, no es difícil verificar los productos, digamos

$$C_2\sigma_v^a = \sigma_v^b .$$

Este resultado se obtiene al aplicar primero el operador σ_v^a sobre un punto en el sistema de referencia seguido del operador C_2 . Finalmente, reconocer que la relación entre el punto inicial y el punto final después de la acción del segundo operador la establece σ_v^b , es directo.

Se incluyeron también las permutaciones asociadas a cada elemento puesto que indican el orden del mismo. Esto es muy útil para establecer el número de clases. En este caso, todos los elementos son de segundo orden. Ya se dijo anteriormente que este grupo es abeliano, puesto que cada elemento forma una clase por sí mismo, pero en general, los elementos que pertenecen a la misma clase, tienen el mismo orden y además, uno es conjugado del otro. En este grupo abeliano, cada elemento es conjugado a sí mismo, (por ejemplo, $C_2 \sigma_v^a C_2^{-1} = \sigma_v^a$) por lo cual, cada uno forma su propia clase.

Si $K_1 = E$; $K_2 = C_2$; $K_3 = \sigma_v^a$ y $K_4 = \sigma_v^b$ y se emplea la tabla 26, entonces la tabla de multiplicación de clases se verá de la siguiente manera

C_{2v}	K_1	K_2	K_3	K_4
K_1	K_1	K_2	K_3	K_4
K_2	K_2	K_1	K_4	K_3
K_3	K_3	K_4	K_1	K_2
K_4	K_4	K_3	K_2	K_1

Cuadro 27: tabla de multiplicación de clases del grupo C_{2v} .

De la tabla de multiplicación de clases (tabla 27) se obtiene entonces la representación natural

$$\Delta(K_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (84)$$

$$\Delta(K_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (85)$$

$$\Delta(K_3) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (86)$$

$$\Delta(K_4) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (87)$$

la cual coincide con la representación regular, como se espera de un grupo abeliano.

Conjunto Completo de Operadores que conmutan, (CCOC).

Un conjunto de operadores que conmutan entre sí $C=(K_1, K_2, \dots, K_l)$ se dice que es un CCOC en un espacio L , si los valores propios involucrados determinan biunivocamente los vectores propios. Dicho de otra manera, si $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ son los valores propios asociados a los vectores propios simultáneos de los operadores $K_1, K_2, \dots, K_\lambda$, entonces se satisfacen simultáneamente las ecuaciones de valores propios

$$\begin{pmatrix} K_1 \\ \vdots \\ K_l \end{pmatrix} |\psi_{\lambda_1 \dots \lambda_l}\rangle = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_l \end{pmatrix} |\psi_{\lambda_1 \dots \lambda_l}\rangle, \quad (88)$$

con los valores propios no degenerados. Ésto, escrito de manera más compacta tiene



la forma

$$\begin{aligned} C|\psi_\lambda\rangle &= \lambda|\psi_\lambda\rangle, & \lambda &= (\lambda_1 \dots \lambda_l) \\ |\psi_\lambda\rangle &= \sum_a u_{\lambda_a} |\varphi_a\rangle \end{aligned} \quad (89)$$

donde $|\varphi_a\rangle$ son vectores base de L .

En un espacio n -dimensional, L_n , C solamente tiene n distintos eigenvalores. A cada λ le corresponde uno y sólo un eigenvector $|\psi_\lambda\rangle$. Los n eigenvectores $|\psi_\lambda\rangle$ forman un conjunto completo en L_n . Si todas los K_i son autoadjuntos, entonces los eigenvectores con diferente λ son ortogonales, es decir, los eigenvectores del CCOC forman un conjunto completo y ortonormal en L_n .

$$\langle \psi_\lambda | \psi_{\lambda'} \rangle = \delta_{\lambda, \lambda'} \quad (90)$$

$$\sum_\lambda |\psi_\lambda\rangle \langle \psi_\lambda| = 1 \quad (91)$$

Se debe enfatizar que un CCOC se encuentra relacionado con un espacio en especial. Un CCOC en el espacio L_n en general no será más un CCOC en otro espacio L_m .

Existe un teorema que da la pauta para reducir una representación de grupo (Lema de Schur). Este dice que si un operador C conmuta con los elementos del grupo G , entonces el subespacio L_λ de C genera una representación de G . En este caso, como cada operador de clase conmuta con el grupo G , es natural elegir uno de ellos, digamos K_i como el operador C del teorema y descomponer la representación del espacio L de G en una suma directa de subespacios L_{λ_i} de K_i , es decir,

$$K_i L_{\lambda_i} = \lambda_i L_{\lambda_i} \quad (92)$$

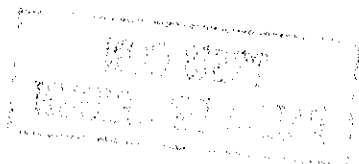
$$L_\lambda = \sum_{\lambda_i} \oplus L_{\lambda_i} \quad (93)$$

Pero si el subespacio L_{λ_i} todavía pudiera reducirse, entonces se requeriría elegir otro operador de clase K_j y descomponer L_{λ_i} en una suma directa del eigenespacio de K_j , es decir,

$$K_j L_{\lambda_i \lambda_j} = \lambda_j L_{\lambda_i \lambda_j} \quad (94)$$

$$L_{\lambda_i} = \sum_{\lambda_j} \oplus L_{\lambda_i \lambda_j} \quad (95)$$

$$L_\lambda = \sum_{\lambda_i \lambda_j} \oplus L_{\lambda_i \lambda_j} \quad (96)$$



Entonces cada subespacio $L_{\lambda_i \lambda_j}$ es un eigenspacio simultáneo de los operadores K_i y K_j y generará una representación del espacio de G . El proceso se continúa hasta que cada subespacio no se pueda reducir más mediante la adición de más operadores de clase de G . Entonces ¿cómo es que se eligen los operadores de clase K_i, K_j, \dots de tal forma que sus eigenspacios simultáneos ya no se puedan descomponer más al adicionar operadores de clase extra? Además, ¿son esos eigenspacios espacios irreducibles de G ?

Conjunto Completo de Operadores que Conmutan de tipo I (CCOC-I)

En la sección que se dedicó a los operadores de clase y a la representación natural, se vió que las clases poseen dos propiedades importantes: conmutan entre sí y también entre los elementos del grupo. La primera de estas propiedades indica que existen vectores propios comunes a todas las matrices $\Delta(K_i)$, lo cual es importante porque a partir de este hecho será posible seleccionar un conjunto de clases que satisfaga el requerimiento de ser un conjunto completo de acuerdo a lo que se mencionó en la sección anterior, pues las $|K|$ matrices $\Delta_{k_j}(K_i), i = 1, 2, \dots, |K|$, se pueden diagonalizar simultáneamente. La segunda propiedad significa que la representación natural puede reducirse a una suma directa de $|K|$ representaciones unidimensionales (y por ello irreducibles) del álgebra de clases.

Como ejemplo se puede considerar nuevamente al grupo C_{2v} , cuyas clases no forman por sí mismas un conjunto completo, pues todas ellas presentan al menos dos vectores propios degenerados. Un conjunto completo puede formarse, por ejemplo, con la combinación lineal $K_2 + 2K_3$, pues presenta vectores propios no degenerados y comunes a todas las clases, como se mira en la tabla 28.

<i>valor propio</i>					<i>vector propio</i>
$K_2 + 2K_3$	K_1	K_2	K_3	K_4	
1	1	-1	1	-1	(-1,1,-1,1)
-3	1	-1	-1	1	(1,-1,-1,1)
3	1	1	1	1	(1,1,1,1)
-1	1	1	-1	-1	(-1,-1,1,1)

Cuadro 28: *Valores y vectores propios del grupo C_{2v} .*

La matriz que diagonaliza de forma simultánea todas las matrices de la representación (84) a (87) tiene la siguiente forma según los vectores propios que se encon-

traron

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (97)$$

de tal forma que

$$\mathbf{S}^{-1}\Delta(K_1)\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (98)$$

$$\mathbf{S}^{-1}\Delta(K_2)\mathbf{S} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (99)$$

$$\mathbf{S}^{-1}\Delta(K_3)\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (100)$$

$$\mathbf{S}^{-1}\Delta(K_4)\mathbf{S} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (101)$$

Con esto, se observa que no sólo se han generado cuatro representaciones irreducibles, sino que además, el conjunto completo, que se denotará como \hat{C} , en este ejemplo es $\hat{C} = \hat{K}_2 + 2\hat{K}_3$.

Las consecuencias de que las clases conmuten con los elementos del grupo, se observan en el siguiente teorema.

Teorema 1. Sea \hat{H} un operador que conmuta con todos los elementos del grupo

$$[\hat{H}, \hat{O}_R] = 0, \quad \forall R \in G. \quad (102)$$

Entonces el subespacio L_{E_n} de vectores propios de \hat{H} , con valor propio E_n , genera una representación de G .

Sea ψ_i^n un vector propio de \hat{H} , con valor propio E_n

$$\hat{H}\psi_i^n = E_n\psi_i^n, \quad i = 1, 2, \dots, g_{E_n} \quad (103)$$

cuya degeneración es g_{E_n} . Actuando con el elemento R del grupo tenemos

$$\hat{O}_R\hat{H}\psi_i^n = \hat{H}(\hat{O}_R\psi_i^n) = E_n(\hat{O}_R\psi_i^n), \quad (104)$$

lo cual indica que $\hat{O}_R\psi_i^n$ es también una función propia de \hat{H} con valor propio E_n . La función $\hat{O}_R\psi_i^n$ pertenece al subespacio invariante L_{E_n} que está caracterizado por el valor propio E_n y que es generado por las funciones ψ_i^n . Además como $\hat{O}_R\psi_i^n$ está en L_{E_n} y el conjunto $\{\psi_i^n\}$ es base de L_{E_n} , entonces

$$\hat{O}_R\psi_i^n = \sum_j D_{ji}(R)\psi_j^n. \quad (105)$$

donde la matriz $D(R)$ es una representación del grupo. Si $D(R)$ fuese irreducible, se diría entonces que la degeneración es normal, pero si no fuese de esa manera, entonces la degeneración se considera accidental. Cabe agregar que la misma representación se puede generar a partir de funciones asociadas a diferente valor propio. Así,

$$\hat{H}\psi_i^{n,(\nu)} = E_n\psi_i^{n,(\nu)}. \quad (106)$$

donde ν es otra etiqueta del grupo que genera $\psi_i^{n,(\nu)}$. Como en esta ecuación la degeneración está asociada a la dimensión de la representación, entonces sólo depende de ν y por lo tanto

$$i = 1, 2, \dots, n_\nu.$$

En el espacio de clase L_c identificamos a \hat{H} con \hat{C} (conjunto completo) y a R con K_i , ya que

$$[\hat{C}, \hat{K}_i] = 0, \quad (107)$$

Lo anterior indica que los vectores propios de \hat{C} en L_c son base de una representación de las clases y estas representaciones son unidimensionales y por lo tanto irreducibles. Lo anterior está implícito en la definición de conjunto completo pues éste ha de tener vectores propios no degenerados.

Para ejemplificar esto, tomemos de nuevo al grupo $C_{2\nu}$. De la tabla de valores y vectores propios que ya se obtuvo (tabla 28), se observa que $\hat{C} = K_2 + 2K_3$, de este modo

$$[\hat{C}, \hat{K}_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (108)$$

y los vectores propios (también de la misma tabla) ya normalizados (la normalización se justificará más adelante) están dados por

$$\mathbf{Q}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{4}}(-K_1 + K_2 - K_3 + K_4) , \quad (109)$$

$$\mathbf{Q}^{(-3)} = \frac{1}{\sqrt{4}}(K_1 - K_2 - K_3 + K_4) , \quad (110)$$

$$\mathbf{Q}^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{4}}(K_1 + K_2 + K_3 + K_4) ; \quad (111)$$

$$\mathbf{Q}^{(-1)} = \frac{1}{\sqrt{4}}(-K_1 - K_2 + K_3 + K_4) , \quad (112)$$

Pero de acuerdo con este teorema 1, estos vectores generan una representación unidimensional de las clases, ya que

$$\hat{C}(\hat{K}_i \mathbf{Q}^{(\nu)}) = \hat{K}_i \hat{C} \mathbf{Q}^{(\nu)} = \nu (\hat{K}_i \mathbf{Q}^{(\nu)}) . \quad (113)$$

Lo que indica que $(\hat{K}_i \mathbf{Q}^{(\nu)})$ es también vector propio de \hat{C} con valor propio ν . Pero como el subespacio \mathbf{L}_ν es unidimensional, entonces

$$\hat{C} \mathbf{Q}^{(\nu)} \approx \mathbf{Q}^{(\nu)} \quad (114)$$

y donde la constante de proporcionalidad es el valor propio λ_i^ν . Si se aplica la clase a los vectores (109) a (112), se obtiene la tabla 29

	$\mathbf{Q}^{(1)}$	$\mathbf{Q}^{(-3)}$	$\mathbf{Q}^{(3)}$	$\mathbf{Q}^{(-1)}$	representación
K_1	1	1	1	1	rep 1
K_2	-1	-1	1	1	rep 2
K_3	1	-1	1	-1	rep 3
K_4	-1	1	1	-1	rep 4

Cuadro 29: *Tabla de las representaciones.*

cuyos valores coinciden justamente con las representaciones (98-101) y donde se cumple que

$$\hat{K}_i \mathbf{Q}^{(\nu)} = \lambda_i^{(\nu)} \mathbf{Q}^{(\nu)} . \quad (115)$$

Por ejemplo, para la representación $\mathbf{Q}^{(-1)}$ se encuentra que

$$\hat{K}_3 \mathbf{Q}^{(-1)} = -1 \mathbf{Q}^{(-1)} \quad (116)$$

y no sólo eso, también es posible para cada representación generar productos usando los valores propios que ya se conocen y que de otra manera sólo con la tabla de multiplicación de clases sería posible obtener. Por ejemplo, con la tabla de multiplicación de clases (tabla 27), se observa que

$$K_3 K_4 = K_2 \quad (117)$$

Pero según la tabla 29 a K_2 aplicado al vector digamos $\mathbf{Q}^{(-3)}$, le corresponde el valor propio -1. Pero esto mismo se obtiene al emplear sólo la tabla 29, donde directamente y para el mismo vector $\mathbf{Q}^{(-3)}$, se observa que el producto $K_3 K_4 = -1 \times 1 = -1$.

Así, la tabla 29 nos proporciona cuatro representaciones irreducibles de las clases, caracterizadas por el valor propio (ν), que se obtienen a partir de la representación natural (84 - 87), mediante el cambio de base utilizando la matriz (97), es decir,

$$\mathbf{S}^{-1} \Delta(K_i) \mathbf{S} = \mathbf{D}^{(1)}(K_i) \oplus \mathbf{D}^{(-3)}(K_i) \oplus \mathbf{D}^{(3)}(K_i) \oplus \mathbf{D}^{(-1)}(K_i). \quad (118)$$

Entonces el espacio \mathbf{L}_c se ha reducido en cuatro subespacios irreducibles

$$\mathbf{L}_c = \mathbf{L}_{(1)} \oplus \mathbf{L}_{(-3)} \oplus \mathbf{L}_{(3)} \oplus \mathbf{L}_{(-1)} \quad (119)$$

El hecho de que siempre sea posible encontrar un conjunto completo en \mathbf{L}_c se encuentra referido en el siguiente teorema.

Teorema 2. El conjunto de los $|K|$ operadores de clase ($\hat{K}_1, \hat{K}_2, \dots, \hat{K}_{|K|}$) es necesariamente un conjunto completo en el espacio \mathbf{L}_c .

Si se asume que todos los operadores de clase G son autoadjuntos, y tratamos de reducir la representación natural, entonces elegimos primero un operador de clase K_{i_1} y encontramos sus eigenvectores $\mathbf{Q}^{(\nu)}$ en el espacio de clase,

$$K_{i_1} \mathbf{Q}^{(\nu)} = \lambda_{i_1} \mathbf{Q}^{(\nu)} \quad (120)$$

$$\mathbf{Q}^{(\nu)} = \sum_{j=1}^K q_j' K_j \quad (121)$$

Esto implica diagonalizar la matriz $\Delta(K_{i_1})$, es decir, resolver el sistema de ecuaciones

$$\sum_{j=1}^K \{\Delta(K_{i_1})_j^k - \lambda_{i_1} \delta_{jk}\} q_j = 0, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (122)$$

lo que implica también que

$$\det |\Delta(K_{i_1})_j^k - \lambda_{i_1} \delta_{jk}| = \prod_{\nu=1}^n (\lambda_{i_1} - \lambda_{i_1}^\nu) = 0, \quad (123)$$

donde para cada eigenvalor $\lambda_{i_1}^\nu$ existe una única solución $\mathbf{q}^{(\nu)} = (q_1^{(\nu)}, \dots, q_N^{(\nu)})$, que a su vez da un eigenvector $\mathbf{Q}^{(\nu)}$ de K_{i_1} , a la manera de (121), que satisface

$$K_{i_1}(K_j \mathbf{Q}^{(\nu)}) = K_j K_{i_1} \mathbf{Q}^{(\nu)} = \lambda_{i_1}^\nu (K_j \mathbf{Q}^{(\nu)}). \quad (124)$$

Esto muestra que $K_j \mathbf{Q}^{(\nu)}$ sigue siendo un eigenvector de K_{i_1} con el eigenvalor $\lambda_{i_1}^\nu$. Por tanto los eigenvectores del CCOC, K_{i_1} , son necesariamente eigenvectores de todos los demás operadores de clase. Esto implica que si $\mathbf{Q}^{(\nu)}$ es la nueva base, entonces los K operadores de clase están todos diagonalizados. En el lenguaje de la mecánica cuántica, esto quiere decir que las representaciones no diagonales de los K operadores de clase se han transformado a una representación diagonal, es decir,

$$\Delta(K_i) = \begin{pmatrix} K_{i_1}^1 & \dots & \dots & K_{i_K}^1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ K_{i_1}^K & \dots & \dots & K_{i_K}^N \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \lambda_i^{(\nu_1)} & & & \\ & \lambda_i^{(\nu_2)} & & \\ & & \dots & \\ & & & \lambda_i^{(\nu_K)} \end{pmatrix} \quad (125)$$

Cada columna caracteriza una clase y como todas las $|K|$ clases son linealmente independientes con $|K|$ distintos vectores propios, entonces ninguna columna se puede obtener a partir de las restantes. Todos los conjuntos λ_i^ν son diferentes, lo cual implica que las matrices $\Delta(K_1), \Delta(K_2), \dots, \Delta(K_{|K|})$ tienen distintos conjuntos de valores propios, por lo tanto, constituyen un conjunto completo donde los valores λ_i^ν corresponden a la representación de las clases en \mathbf{L}_c .

Es importante volver a indicar que el conjunto completo \hat{C} no es único, pues si el conjunto $(\hat{K}_1, \hat{K}_2, \dots, \hat{K}_{|K|})$ es necesariamente completo, entonces siempre se puede

encontrar una combinación lineal de las $|K|$ clases de tal forma que

$$\hat{C} = k_1 \hat{K}_1 + k_2 \hat{K}_2 + \dots + k_{|K|} \hat{K}_{|K|} \quad (126)$$

constituya un conjunto completo. Aunque la elección de \hat{C} depende de las constantes k_i , los diferentes operadores \hat{C} que se obtengan serán equivalentes.

A pesar de lo que se ha mencionado aquí, los operadores \hat{K}_i , no necesariamente actúan sobre el espacio de clase L_c de manera exclusiva, sino también sobre el espacio de grupo L_g y sobre el espacio de funciones.

Es conveniente analizar la ortonormalidad de los vectores propios $Q^{(\nu)}$, ya que

$$(Q^{(\nu)}, Q^{(\mu)}) \neq \delta_{\mu\nu} \quad (127)$$

El producto escalar tiene la forma general

$$(Q^{(\nu)}, Q^{(\mu)}) = \sum_{i=1}^{|K|} g_i q_i^{\mu*} q_i^\nu \quad (128)$$

mientras que para el caso de nuestro ejemplo, (109- 112) satisfacen

$$(Q^{(\nu)}, Q^{(\mu)}) = \begin{cases} 0, & \mu \neq \nu \\ |G|, & \mu = \nu \end{cases} \quad (129)$$

Si normalizamos los vectores propios de la siguiente forma

$$Q^{(\nu)} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{|G|}} Q^{(\nu)} \quad (130)$$

entonces el conjunto de vectores $Q^{(\nu)}$ es ortonormal y por lo tanto la propiedad completiva se satisface

$$\sum_{\nu} Q^{(\nu)} (Q^{(\nu)},) = 1 \quad (131)$$

Operador de proyección y caracteres

La reducción de la representación natural a una suma directa de representaciones irreducibles en el espacio de clase L_c da origen a los vectores propios $Q^{(\nu)}$ que se presentan en la ecuación (121) y que caracterizan los coeficientes q_i^ν . Y precisamente estos vectores, son vectores propios tanto de \hat{C} como de las clases. En este último caso, los valores propios λ_i^ν se definen mediante (120). Para hallar el significado de q_i^ν y λ_i^ν se puede empezar por considerar el hecho de que \hat{C} y los operadores de clase conmutan

$$[\hat{C}, \hat{K}_i] = 0 \Rightarrow [\hat{C}, \hat{Q}^{(\nu)}] = 0 \quad . \quad (132)$$

Si ahora se aplica el operador \hat{C} al producto de vectores propios $Q^{(\mu)} Q^{(\nu)}$ se obtiene,

$$\begin{aligned} \hat{C}(Q^{(\mu)} Q^{(\nu)}) &= (\hat{C} Q^{(\mu)}) Q^{(\nu)} = \mu Q^{(\mu)} Q^{(\nu)} \quad , \\ &= Q^{(\mu)} (\hat{C} Q^{(\nu)}) = \nu Q^{(\mu)} Q^{(\nu)} \quad , \end{aligned} \quad (133)$$

pues se toma en cuenta la asociatividad del grupo. A partir de esto, se concluye que

$$Q^{(\mu)} Q^{(\nu)} = \delta_{\mu\nu} \eta_\nu Q^{(\nu)} \quad , \quad (134)$$

donde η_ν es una constante que depende del subespacio ν . Si ahora se define

$$P^{(\nu)} \equiv \eta_\nu^{-1} Q^{(\nu)} \quad , \quad (135)$$

se obtiene que de acuerdo con la ecuación (134)

$$P^{(\mu)} P^{(\nu)} = \delta_{\mu\nu} P^{(\nu)} \quad , \quad (136)$$

de donde se puede considerar a $P^{(\mu)}$ como un operador de proyección [13]. El operador

$P^{(\mu)}$ proyecta el espacio L_c al subespacio de L_μ . La constante de proporcionalidad, η_ν^{-1} está dada por [13]

$$\eta_\nu^{-1} = \frac{g_i q_i^{\nu*}}{\lambda_i^\nu}, \quad (137)$$

la cual se obtiene a partir de los valores propios λ_i^ν de la clase K_i y de las componentes de los vectores propios $Q^{(\nu)}$.

Hasta ahora se puede identificar a los vectores propios $Q^{(\nu)}$ como operadores de proyección sobre el subespacio irreducible L_ν del espacio de clase L_c . Por otra parte se sabe que el número de representaciones irreducibles es igual al número de clases, por lo que debe de existir una correspondencia uno a uno entre los vectores propios de \hat{C} y las representaciones irreducibles. Esta correspondencia puede establecerse mediante el siguiente

Teorema de valores propios. En todo espacio de representaciones de grupo G , los valores propios posibles del operador \hat{C} , están restringidos a corresponder a los valores propios obtenidos en el espacio de clase L_c .

Los operadores de proyección actúan entonces sobre cualquier espacio, descomponiéndolo en una suma directa de representaciones que se caracterizan por los valores propios ν . Si L fuera un espacio de funciones (que podría ser L_g si se tratara de una representación regular) entonces, $P^{(\nu)}\psi$, con $\psi \in L$, pertenece al subespacio L_ν y por lo tanto debe ser una función propia de \hat{C} con valor propio ν

$$\hat{C}(P^{(\nu)}\psi) = (\hat{C}P^{(\nu)})\psi = \nu(P^{(\nu)}\psi). \quad (138)$$

Existe, por lo tanto, una correspondencia biunívoca entre las representaciones del grupo G y los valores propios de \hat{C} en L_c . Por otra parte, las representaciones irreducibles se caracterizan mediante sus caracteres, en consecuencia, se concluye que debe de haber alguna relación entre los caracteres y las representaciones λ_i^ν de las clases y es justo la que se presenta a continuación [13]:

$$\lambda_i^\nu = \frac{g_i \chi^{(\nu)}}{n_\nu} \quad (139)$$

donde n_ν es la dimensión de la matriz y $\chi^{(\nu)}$ los caracteres. Ahora bien, los caracteres

se obtienen directamente al diagonalizar la representación natural, lo cual nos provee de un procedimiento simple en la obtención de los caracteres de un grupo, pues

$$\chi^{(\nu)*} = \sqrt{|G|} q_i^\nu \quad (140)$$

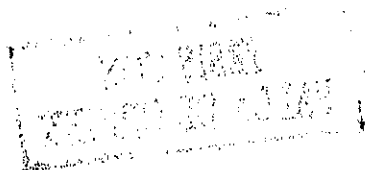
Tomemos de nuevo al grupo C_{2v} . De las ecuaciones (109) a (112), donde se observan los vectores propios, se puede obtener los caracteres

C_{2v}	K_1	K_2	K_3	K_4
	-1	1	-1	1
	1	-1	-1	1
	1	1	1	1
	-1	-1	1	1

Es claro que los caracteres de la clase $K_1 = E$ no pueden ser negativos, pues indican la dimensión de la representación. Como los vectores propios de \hat{C} están definidos con excepción de una fase que tendremos libertad para elegir, seleccionamos a q_1^ν , como real y positivo. Tomando en cuenta esto, se obtiene la tabla 30

C_{2v}	E	C_2	σ_v^a	σ_v^b	funciones base
$B_1, 1$	1	-1	1	-1	p_x, xz, R_y
$B_2, -3$	1	-1	-1	1	p_y, zy, R_x
$A_1, 3$	1	1	1	1	$p_z, z^2, x^2 + y^2$
$A_2, -1$	1	1	-1	-1	xy, R_z

Cuadro 30: Tabla de caracteres del grupo C_{2v} .



En la tabla 30 se han introducido además de los valores propios, los símbolos tradicionales de las representaciones irreducibles [14], donde la representación A_1 corresponde a la totalmente simétrica. La A_2 es aquella que bajo las reflexiones cambia de signo con respecto a la A_1 . Las representaciones B cambian de signo bajo las rotaciones con respecto a las A's y de nuevo, para distinguir entre las mismas B's, se debe observar si bajo reflexiones cambian de signo.

También se han incluido las funciones base asociadas a las representaciones[14]. Generalmente esta información se incluye en las tablas de caracteres puesto que son muy importantes, ya que se emplean como base para diagonalizar el Hamiltoniano en muchos sistemas atómicos y moleculares. Esas funciones base corresponden a los armónicos cartesianos así como a los vectores axiales. Estos últimos se incluyen porque juegan un papel importante en el análisis de las propiedades de transición asociadas al dipolo magnético. Los vectores axiales son invariantes ante la inversión a diferencia de los vectores polares, como el vector de posición. Un vector axial puede construirse a partir de dos vectores polares. De manera explícita, se tiene

$$\begin{aligned}
 \mathbf{R} &= \mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2 , \\
 R_x &= z_2 y_1 - z_1 y_2 , \\
 R_y &= z_1 x_2 - x_1 z_2 , \\
 R_z &= x_1 y_2 - y_1 x_2 ,
 \end{aligned}
 \tag{141}$$

donde (x_1, y_1, z_1) y (x_2, y_2, z_2) son las componentes de los vectores de posición \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 , respectivamente. Esas componentes se transforman como la base cartesiana. Así, por ejemplo, para la representación A_1 , las funciones base que se mantienen sin cambio de signo ante los operadores del grupo, como lo indica la tabla de caracteres, son: z , su cuadrado, z^2 , así como x^2 y y^2 , mientras que para la representación A_2 , las que cambian de signo sólo ante las reflexiones son xy y R_z . Para el caso de la representación B_1 , las funciones que cambian de signo ante C_2 y σ_v^b son x, xz y por lo tanto R_y . Por último, en la representación B_2 , las funciones que cambian de signo ante C_2 y σ_v^a son y, zy y por lo tanto R_x .

Volviendo al tema de la obtención de los caracteres, la ecuación (140) relaciona las componentes de los vectores propios \mathbf{Q}^ν ya normalizados y los caracteres. El procedimiento general entonces, para obtener los caracteres de un grupo, consiste en diagonalizar el CCOC-I y normalizar los vectores propios para poder elegir la fase

$$q_1^\nu = q_1^{\nu*} > 0. \tag{142}$$



Se puede hacer notar que existe una relación de ortonormalidad entre los caracteres, lo cual es consecuencia de la ortonormalidad de los vectores propios de \hat{C} .

Conjunto Completo de Operadores que Conmutan de tipo II (CCOC-II)

La representación natural se construye a partir de la acción de los operadores del grupo sobre la base del espacio de clase L_c , es decir, sobre las clases mismas. Pero el CCOC-I puede actuar sobre todo espacio de representaciones, ya sea funciones o los elementos del grupo. Si consideramos un conjunto de funciones $\{\phi_i(x), i = 1, 2, \dots, n\}$ que se transforma en sí mismo bajo la acción del CCOC-I, entonces el conjunto $\{\phi_i(x)\}$ es base de un espacio de representaciones que llamaremos L_n . Si \hat{C} es el operador asociado al CCOC-I, entonces

$$\hat{C}\phi_i(x) = \sum_{j=1}^n \Delta_{ji}(C)\phi_j(x) \quad , \quad (143)$$

donde $\Delta(C)$ es una representación generalmente reducible, por lo que se puede efectuar el cambio de base [14]

$${}_r\psi_\alpha^\nu(x) = \sum_i s_{i,r\nu\alpha}\phi_i(x) \quad , \quad (144)$$

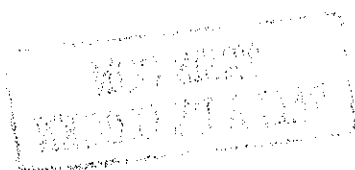
donde las funciones ${}_r\psi_\alpha^\nu(x)$ portan la ν -ésima representación irreducible del grupo y el subíndice r considera la repetición posible de representaciones y toma los valores $r = 1, 2, \dots, a_\nu$.

La matriz S (ver la ecuación anterior), permite reducir la representación $\Delta(C)$ a una suma directa de representaciones irreducibles, es decir,

$$S^{-1}\Delta(C)S = \sum_{\nu} \oplus_{a_\nu} D^\nu(C) \quad . \quad (145)$$

Los vectores propios ${}_r\psi_\alpha^\nu$ que son vectores propios del operador \hat{C}

$$\hat{C} {}_r\psi_\alpha^\nu(x) = \lambda_\nu {}_r\psi_\alpha^\nu(x) \quad (146)$$



donde λ es el valor propio que define el subespacio $\mathbf{L}_{(\nu)}$. Entonces el espacio de representación \mathbf{L}_n se descompone en subespacios de $\mathbf{L}_{(\nu)}$

$$\mathbf{L}_n = \sum_{\nu} \oplus a_{\nu} \mathbf{L}_{(\nu)}. \quad (147)$$

Pero de acuerdo con (138), el valor propio λ_{ν} debe corresponder a ν , es decir, a uno de los valores propios que caracterizan a las representaciones irreducibles. Así,

$$\hat{C} \, {}_r\psi_{\alpha}^{\nu}(x) = \nu \, {}_r\psi_{\alpha}^{\nu}(x). \quad (148)$$

Y todo esto nos conduce a lo siguiente: si un vector ψ^{ν} pertenece al espacio propio $\mathbf{L}_{(\nu)}$ del CCOC-I, entonces se dice que ψ^{ν} porta la representación irreducible ν de G . Pero pueden existir varios subespacios asociados a la misma representación (valor propio) ν ya que en general el factor de multiplicidad a_{ν} es mayor que uno. Este hecho, aunado a que los vectores propios han de portar un subíndice extra que corresponde a su componente, indican que el CCOC-I no tiene porqué seguir siendo en \mathbf{L}_n un conjunto completo de operadores que conmutan, pues según la ecuación (148), las $a_{\nu}n_{\nu}$ funciones ${}_r\psi_{\alpha}^{\nu}(x)$ tienen el mismo valor propio ν y por lo tanto no hay forma de distinguirlas únicamente con el operador \hat{C} . Para distinguirlas, es necesario introducir nuevos operadores que conmuten con \hat{C} de tal forma que introduzcan nuevos valores propios asociados a r y α en ${}_r\psi_{\alpha}^{\nu}(x)$.

Los posibles candidatos para éstos operadores extra son los CCOC de los subgrupos de G . Suponga que G tiene una cadena de subgrupos

$$G \supset G(s), \quad G(s) = G(s_1) \supset G(s_2) \supset \dots \quad (149)$$

Ahora bien, a cada uno de éstos subgrupos le corresponde un CCOC-I que conmuta con \hat{C} . Si se designa como $C(s_i)$ al CCOC-I del subgrupo $G(s_i)$ entonces el conjunto de operadores $\{\hat{C}, \hat{C}(s_i)\}$ puede satisfacer los requerimientos para desdoblar el subespacio degenerado. Para saber si realmente lo va a desdoblar, es necesario llevar a cabo la subducción [13] $\mathbf{D}^{(\mu)}(G) \downarrow G(s)$ de representaciones.

Como procedimiento general para romper la degeneración de ν , se puede establecer lo siguiente. Dado un grupo G , determinamos el CCOC-I, que denominamos \hat{C} .

La acción del operador \hat{C} en el espacio de clase L_c , determina los valores propios ν asociados a las representaciones irreducibles del grupo. Ahora bien, al actuar \hat{C} sobre las funciones de un espacio de representación L_n , se genera una representación reducible. En este caso, los vectores propios asociados a una representación de dimensión $n_\nu > 1$ necesitan de una etiqueta extra que distinga entre las diferentes componentes. Esa etiqueta la provee un operador que conmuta con \hat{C} y corresponde al CCOC-I de un subgrupo de G . Entonces el conjunto $\{\hat{C}, \hat{C}(s_i)\}$ satisface los requerimientos para desdoblar el subespacio degenerado puesto que forma un conjunto completo que distingue las diferentes componentes m de las funciones base $\psi_m^\nu(x)$ asociadas a la representación irreducible ν . Al conjunto $\{\hat{C}, \hat{C}(s_i)\}$ se lo denomina conjunto completo de operadores que conmutan de tipo II.

Sin embargo, no toda cadena de subgrupos provee de un CCOC-II. Para que esto suceda, la cadena debe de ser *canónica*. Se dice que la cadena

$$G \supset G(s_1) \quad (150)$$

es canónica si al subducir $D^\nu(G) \downarrow G(s_1)$, las representaciones irreducibles de $G(s_1)$ no están contenidas más de una vez en las representaciones de G , es decir, si en

$$D^\nu(G) \downarrow G(s_1) = \sum_{m_1} \oplus a_{m_1}^\nu D^{m_1}(G(s_1)) \quad , \quad (151)$$

$a_{(m_1)}^\nu \leq 1$ para toda ν . Esta condición simplemente dice que al subducir G a $G(s_1)$, debe de romperse la degeneración por completo. Todo lo anterior se condensa en el siguiente

Teorema. Una condición necesaria y suficiente para que las funciones $\psi_m^{(\nu)}(x)$ porten las representaciones irreducibles de la cadena de grupos $G \supset G(s)$ es que satisfagan las ecuaciones de valores propios

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \end{pmatrix} \psi_m^{(\nu)}(x) = \begin{pmatrix} \nu \\ m(s) \end{pmatrix} \psi_m^{(\nu)}(x). \quad (152)$$

donde $m(s)$ denota al conjunto de valores propios $\{m_1, m_2, \dots\}$ asociados a los subgrupos $\{G(s_1), G(s_2), \dots\}$.

Para ilustrar un poco lo anterior, tomemos como ejemplo al grupo C_{3v} que está formado por los siguientes elementos

$$C_{3v} = \{E; C_3, C_3^2, \sigma_v^a, \sigma_v^b, \sigma_v^c\}$$

Tomemos como sistema de referencia el que se muestra en la figura 26.

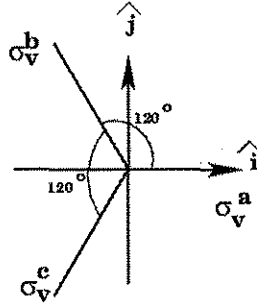


Figura 26: Sistema de referencia para el grupo C_{3v} .

La acción de estos operadores sobre la base $\{\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}\}$ tiene el siguiente efecto²

$$\begin{aligned}
 \hat{D}(E)(\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}) &= (\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
 \hat{D}(C_3)(\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}) &= (\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}) \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
 \hat{D}(C_3^2)(\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}) &= (\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}) \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
 \hat{D}(\sigma_v^a)(\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}) &= (\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
 \hat{D}(\sigma_v^b)(\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}) &= (\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}) \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
 \hat{D}(\sigma_v^c)(\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}) &= (\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}) \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{153}$$

²Las rotaciones se llevan a cabo alrededor del eje \hat{k} .

La tabla de multiplicación del grupo se observa en la siguiente tabla

C_{3v}	E	C_3	C_3^2	σ_v^a	σ_v^b	σ_v^c	permutaciones asociadas
	1	2	3	4	5	6	
E	E	C_3	C_3^2	σ_v^a	σ_v^b	σ_v^c	e
C_3	C_3	C_3^2	E	σ_v^c	σ_v^a	σ_v^b	(123)(465)
C_3^2	C_3^2	E	C_3	σ_v^b	σ_v^c	σ_v^a	(132)(456)
σ_v^a	σ_v^a	σ_v^b	σ_v^c	E	C_3	C_3^2	(14)(25)(36)
σ_v^b	σ_v^b	σ_v^c	σ_v^a	C_3^2	E	C_3	(15)(26)(34)
σ_v^c	σ_v^c	σ_v^a	σ_v^b	C_3	C_3^2	E	(16)(24)(35)

Cuadro 31: Tabla de multiplicación del grupo C_{3v}

Con ayuda de la tabla 31 observamos que existen tres clases:

$$\begin{aligned}
 K_1 &= E(\text{identidad}) \quad , \\
 K_2 &= \{C_3, C_3^2\} \quad , \\
 K_3 &= \{\sigma_v^a, \sigma_v^b, \sigma_v^c\} \quad .
 \end{aligned}
 \tag{154}$$

Por lo que la tabla de multiplicación de clases se presenta en la tabla 32,

C_{3v}	K_1	K_2	K_3
K_1	K_1	K_2	K_3
K_2	K_2	$2K_1 + K_2$	$2K_3$
K_3	K_3	$2K_3$	$3K_1 + 3K_2$

Cuadro 32: tabla de mltiplicación de clases del grupo C_{3v} .

mientras que la obtención de la representación natural es directa

$$\begin{aligned}
 \Delta(K_1) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad , \\
 \Delta(K_2) &= \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad ,
 \end{aligned}$$

$$\Delta(K_3) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 3 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix} . \quad (155)$$

Para conocer el conjunto completo de este sistema necesitamos ahora conocer los valores propios de la representación natural. En la tabla 33 se muestran los valores y vectores propios en donde se observa que podemos elegir elegir como CCOC-I a la clase K_3 , es decir, $\hat{C} = K_3$.

<i>valor propio</i>			<i>vector propio</i>
K_1	K_2	K_3	
1	2	-3	(-1,-1,1)
1	-1	0	(-2,1,0)
1	2	3	(1,1,1)

Cuadro 33: Valores y vectores propios de la representación natural para el grupo C_{3v} .

Sus tres eigenvectores son:

$$\begin{aligned} \lambda = 3, \quad \mathbf{Q}^{(3)} &= \frac{1}{\sqrt{6}}(K_1 + K_2 + K_3) \\ \lambda = 0, \quad \mathbf{Q}^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{6}}(-2K_1 + K_2) \\ \lambda = -3, \quad \mathbf{Q}^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{6}}(-K_1 - K_2 + K_3), \end{aligned} \quad (156)$$

donde se tomó en cuenta la normalización correspondiente como lo indican las ecuaciones (128)-(130).

A partir de los vectores propios se genera la matriz que diagonaliza de manera simultánea a todas las matrices de la representación (155)

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} -1 & -2 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} , \quad (157)$$

por lo que se satisface

$$\mathbf{S}^{-1}\Delta(K_1)\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} ,$$

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^{-1}\Delta(K_2)\mathbf{S} &= \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{S}^{-1}\Delta(K_3)\mathbf{S} &= \begin{pmatrix} -3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (158)$$

Ahora bien, a partir de los vectores propios se pueden obtener los caracteres cuyo resultado se condensa en la tabla 34

C_{3v}	E	C_3, C_3^2	$\sigma_v^a, \sigma_v^b, \sigma_v^c$	funciones base
A_1	3	1	1	$x^2 + y^2; z^2$
A_2	-3	1	-1	R_z
E	0	2	-1	(x, y)

Cuadro 34: Tabla de caracteres del grupo C_{3v} .

Aquí ya se ha tomado en cuenta que los caracteres de la clase K_1 no pueden ser negativos, por lo que se eligió la fase adecuada. También se incluyen para las representaciones irreducibles, tanto los símbolos tradicionales como los basados en el valor propio de \hat{C} , así como las funciones base. Sobre estas últimas, se observan los armónicos cartesianos y los vectores axiales correspondientes a cada representación. Así, las funciones base de la representación A_1 no cambian de signo ante la acción de todos los operadores del grupo. Las que pertenecen a la representación A_2 sólo cambian de signo ante las reflexiones y finalmente, para la representación E , las funciones se han de mezclar, puesto que es una representación bidimensional. En este último caso las funciones (x, y) resultan ser generadoras de la representación E .

Por otra parte, el espacio de funciones $\{p_x, p_y, p_z\}$ se transforma en sí mismo bajo la acción de $\hat{C} = K_3$ y por lo tanto constituye un espacio de representación L_3 . Así, al operar $\hat{C} = K_3 = \sigma_v^a + \sigma_v^b + \sigma_v^c$ sobre el espacio de funciones L_3 , se encuentra lo siguiente

$$\begin{aligned} \hat{C}(p_x, p_y, p_z) &= \sigma_v^a(p_x, p_y, p_z) + \sigma_v^b(p_x, p_y, p_z) + \sigma_v^c(p_x, p_y, p_z) \\ &= (p_x, p_y, p_z) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (159)$$

Lo anterior se obtiene cuando se considera que la aplicación de un operador \hat{O}_R sobre una función $\Psi(x)$ genera la nueva función

$$\hat{O}_R \Psi(\mathbf{x}) = \Psi(\hat{R}^{-1}\mathbf{x}) \quad , \quad (160)$$

con

$$\hat{O}_R \equiv \hat{R}, \quad (161)$$

por lo que

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_v^a(p_x) &= (\hat{\sigma}_v^a)^{-1} p_x = \hat{\sigma}_v^a(p_x) = p_x \quad , \\ \hat{\sigma}_v^a(p_y) &= (\hat{\sigma}_v^a)^{-1} p_y = \hat{\sigma}_v^a(p_y) = -p_y \quad , \\ \hat{\sigma}_v^a(p_z) &= (\hat{\sigma}_v^a)^{-1} p_z = \hat{\sigma}_v^a(p_z) = p_z \quad , \end{aligned} \quad (162)$$

lo cual implica que la transformación de funciones está dada por

$$\hat{\sigma}_v^a(p_x, p_y, p_z) = (p_x, p_y, p_z) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (163)$$

De la tabla de multiplicación de grupo (tabla 31) se observa que σ_v^a es su propio inverso, y esta última matriz que se obtiene indica cómo se transforman las componentes de p_x, p_y, p_z . Si se procede de la misma forma para los demás operadores de \hat{C}

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_v^b p_x &= (\hat{\sigma}_v^b)^{-1} p_x = \hat{\sigma}_v^b p_x = -\frac{1}{2} p_x - \frac{\sqrt{3}}{2} p_y \quad , \\ \hat{\sigma}_v^b p_y &= (\hat{\sigma}_v^b)^{-1} p_y = \hat{\sigma}_v^b p_y = -\frac{1}{2} p_x + \frac{1}{2} p_y \quad , \\ \hat{\sigma}_v^b p_z &= (\hat{\sigma}_v^b)^{-1} p_z = \hat{\sigma}_v^b p_z = p_z \quad , \\ \Rightarrow \hat{\sigma}_v^b(p_x, p_y, p_z) &= (p_x, p_y, p_z) \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (164)$$

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_v^c p_x &= (\hat{\sigma}_v^c)^{-1} p_x = \hat{\sigma}_v^c p_x = -\frac{1}{2} p_x + \frac{\sqrt{3}}{2} p_y \quad , \\ \hat{\sigma}_v^c p_y &= (\hat{\sigma}_v^c)^{-1} p_y = \hat{\sigma}_v^c p_y = \frac{1}{2} p_x + \frac{1}{2} p_y \quad , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_v^c p_z &= (\hat{\sigma}_v^c)^{-1} p_z = \hat{\sigma}_v^c(p_z) = p_z \quad , \\ \Rightarrow \hat{\sigma}_v^c(p_x, p_y, p_z) &= (p_x, p_y, p_z) \begin{pmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} .\end{aligned}\quad (165)$$

se comprueba que

$$\hat{C}(p_x, p_y, p_z) = (p_x, p_y, p_z) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} .$$

A partir de estos resultados se puede verificar que se cumple la ecuación (159), donde

$$\Delta(\hat{C}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}\quad (166)$$

es una representación reducible de \hat{C}

Ahora bien, de acuerdo con (148) y la tabla 34, los valores propios que se obtuvieron de la representación $\Delta(\hat{C})$ (0 y 3) efectivamente están dentro del conjunto $\{3, -3, 0\}$ además de que poseen los vectores propios

$$\{p_x^{(0)}, p_y^{(0)}, p_z^{(3)}\},\quad (167)$$

donde el superíndice indica el valor propio que se asocia a cada función. Al diagonalizar la representación, se reduce el espacio de representación inicial

$$\mathbf{L}_3 = \mathbf{L}_{(0)} \oplus \mathbf{L}_{(3)}\quad (168)$$

los cuales corresponden justamente a los subespacios bidimensional y unidimensional, respectivamente.

Se necesita entonces un operador adicional que conmute con \hat{C} y reduzca el subespacio bidimensional, $\mathbf{L}_{(0)}$, en dos subespacios unidimensionales.

$$\mathbf{L}_{(0)} = \mathbf{L}_{(0)\alpha} \oplus \mathbf{L}_{(0)\beta} \quad ,\quad (169)$$

donde α y β han de ser los valores propios de los vectores propios del nuevo conjunto completo. Para sugerir tal operador, se debe recordar que \hat{C} conmuta con todos los

elementos del grupo según lo establece la ecuación (107). Además, C_{3v} contiene al subgrupo $C_s^a = \{E; \sigma_v^a\}$

$$C_{3v} \supset C_s^a. \quad (170)$$

La tabla de multiplicación de éste pequeño grupo coincide con su tabla de multiplicación de clases que se presenta en la tabla 35

C_s^a	K_1^{sub}	K_2^{sub}
K_1^{sub}	K_1^{sub}	K_2^{sub}
K_2^{sub}	K_2^{sub}	K_1^{sub}

Cuadro 35: *Tabla de multiplicación de clases del subgrupo C_s^a .*

donde $K_1^{sub} = E$ y $K_2^{sub} = \sigma_v^a$. Su representación natural toma la forma

$$\begin{aligned} \Delta(K_1^{sub}) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \Delta(K_2^{sub}) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (171)$$

con valores y vectores propios dados en la tabla 36

<i>valor propio</i>		<i>vector propio</i>
K_1^{sub}	K_2^{sub}	
1	1	(1,1)
1	-1	(-1,1)

Cuadro 36: *Valores y vectores propios del subgrupo C_s^a .*

Se observa que podemos considerar como conjunto completo de tipo I para este subgrupo, a la clase $K_2^{sub} = \sigma_v^a = \hat{C}(s)$, y a partir de los vectores propios podemos generar la tabla de caracteres que se presenta en la tabla 37.

La subducción de la representación bidimensional $E(\nu = 0)$ es

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{(E)}(C_{3v}) \downarrow \hat{C}(s) \\ E \Rightarrow A \oplus A' \end{aligned}, \quad (172)$$

puesto que

C_s^a	E	σ_v^a
A	1	1
A'	-1	-1

Cuadro 37: *Tabla de caracteres del subgrupo C_s^a .*

$C_{3v} \supset \hat{C}(s)$
$A_1 \rightarrow A$
$A_2 \rightarrow A'$
$E \rightarrow A \oplus A'$

Con todo esto, se tiene un nuevo conjunto de operadores $\{\hat{C}, \hat{C}(s)\}$ que generan un conjunto completo de operadores que conmutan de tipo II, puesto que

$$\begin{aligned}
 CCOC - II &= \hat{C} + \hat{C}(s) \\
 &= K_3 + K_2^{sub} \quad , \quad (173)
 \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
 K_3 &= \sigma_v^a + \sigma_v^b + \sigma_v^c \quad , \\
 K_2^{sub} &= \sigma_v^a \quad . \quad (174)
 \end{aligned}$$

Para comprobar que esta combinación lineal para el CCOC-II nos conviene, empleamos una ecuación [13] que está relacionada de manera muy simple con los caracteres, y mediante la cual se obtienen los eigenvalores λ_i^ν de K_i :

$$\lambda_i^\nu = \chi_i^\nu \frac{g_i}{h_\nu} \quad , \quad (175)$$

donde χ_i^ν , son los caracteres; g_i , indica el número de elementos en la clase y h_ν corresponde a la dimensión asociada a esa representación.

Para este ejemplo, obtenemos que para cada operador del conjunto completo podemos asociar un valor propio diferente como se observa en la siguiente tabla.

<i>R.I.</i>	λ_i^v de K_3	λ_i^v de K_2^{sub}	λ_i^v del CCOC-II
A_1	3	1	4
A_2	-3	-1	-4
E^A	0	1	1
$E^{A'}$	0	-1	-1

Cuadro 38: *Tabla de valores propios del CCOC-II.*

De aquí se observa finalmente que todos los valores propios de la combinación lineal que se ha elegido para el CCOC-II, son diferentes, por lo tanto se considera que esa combinación es adecuada.

Si ahora, sabiendo todo lo anterior, aplicamos $\hat{C}(s)$ sobre el subespacio $\mathbf{L}_{(0)}$, se encuentra que

$$\hat{C}(s)(p_x^{(0)}, p_y^{(0)}) = \hat{\sigma}_v^a(p_x^{(0)}, p_y^{(0)}) = (p_x^{(0)}, p_y^{(0)}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (176)$$

pues

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_v^a(p_x^{(0)}) &= (\hat{\sigma}_v^a)^{-1} p_x^{(0)} = \hat{\sigma}_v^a(p_x^{(0)}) = p_x^{(0)}, \\ \hat{\sigma}_v^a(p_y^{(0)}) &= (\hat{\sigma}_v^a)^{-1} p_y^{(0)} = \hat{\sigma}_v^a(p_y^{(0)}) = -p_y^{(0)}, \\ \Rightarrow \hat{\sigma}_v^a(p_x^{(0)}, p_y^{(0)}) &= (p_x^{(0)}, p_y^{(0)}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (177)$$

lo que indica que el operador $\hat{C}(s)$ reduce el subespacio $\mathbf{L}_{(0)}$ a

$$\mathbf{L}_{(0)} = \mathbf{L}_{(0)+1} \oplus \mathbf{L}_{(0)-1}. \quad (178)$$

Así que ahora las funciones (167) van a tener la siguiente etiqueta extra

$$p_{x,1}^{(0)}, p_{y,-1}^{(0)}, p_{z,1}^{(3)}. \quad (179)$$

Dos

El grupo C_{4v} .

El grupo C_{4v} contiene los siguientes elementos

$$C_{4v} = \{E; C_2; C_4, C_4^3; \sigma_v, \sigma_v'; \sigma_d, \sigma_d'\}.$$

Los efectos de estos operadores sobre una función $f(x, y)$ son

$$\begin{aligned} Ef(x, y) &= f(x, y) , \\ C_2f(x, y) &= f(-x, -y) , \\ C_4f(x, y) &= f(-y, x) , \\ C_4^3f(x, y) &= f(y, -x) , \\ \sigma_v f(x, y) &= f(x, -y) , \\ \sigma_v' f(x, y) &= f(-x, y) , \\ \sigma_d f(x, y) &= f(y, x) , \\ \sigma_d' f(x, y) &= f(-y, -x) . \end{aligned} \tag{180}$$

Los elementos de simetría del grupo puntual C_{4v} (rotaciones y reflexiones) se indican en la siguiente figura.

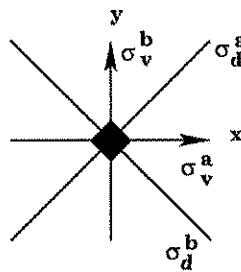
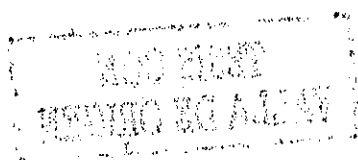


Figura 27: Sistema coordinado para los elementos de simetría del grupo C_{4v} con origen en el centro de la caja.



C_{4v}	E	C_2	C_4	C_4^3	σ_v	$\sigma_{v'}$	σ_d	$\sigma_{d'}$	permutaciones asociadas
	1	2	3	4	5	6	7	8	
E	E	C_2	C_4	C_4^3	σ_v	$\sigma_{v'}$	σ_d	$\sigma_{d'}$	e
C_2	C_2	E	C_4^3	C_4	$\sigma_{v'}$	σ_v	$\sigma_{d'}$	σ_d	(12)(34)(56)(78)
C_4	C_4	C_4^3	C_2	E	σ_d	$\sigma_{d'}$	$\sigma_{v'}$	σ_v	(1324)(5768)
C_4^3	C_4^3	C_4	E	C_2	$\sigma_{d'}$	σ_d	σ_v	$\sigma_{v'}$	(1423)(5867)
σ_v	σ_v	$\sigma_{v'}$	$\sigma_{d'}$	σ_d	E	C_2	C_4^3	C_4	(15)(26)(38)(47)
$\sigma_{v'}$	$\sigma_{v'}$	σ_v	σ_d	$\sigma_{d'}$	C_2	E	C_4	C_4^3	(16)(25)(37)(48)
σ_d	σ_d	$\sigma_{d'}$	σ_v	$\sigma_{v'}$	C_4	C_4^3	E	C_2	(17)(28)(35)(46)
$\sigma_{d'}$	$\sigma_{d'}$	σ_d	$\sigma_{v'}$	σ_v	C_4^3	C_4	C_2	E	(18)(27)(36)(45)

Cuadro 39: *Tabla de multiplicación del grupo C_{4v}*

La tabla de multiplicación de este grupo se presenta en la tabla 39.

Se observa también que este grupo tiene cinco operadores de clase que son:

$$K_1 = E(\text{identidad}), \quad (181)$$

$$K_2 = C_2 = C_4^2, \quad (182)$$

$$K_3 = C_4 + C_4^3, \quad (183)$$

$$K_4 = \sigma_v + \sigma_{v'}, \quad (184)$$

$$K_5 = \sigma_d + \sigma_{d'}. \quad (185)$$

Si ahora utilizamos la tabla 39 para generar la tabla de multiplicación de clases, se obtiene lo siguiente:

C_{4v}	K_1	K_2	K_3	K_4	K_5
K_1	K_1	K_2	K_3	K_4	K_5
K_2	K_2	K_1	K_3	K_4	K_5
K_3	K_3	K_3	$2K_1 + 2K_2$	$2K_5$	$2K_4$
K_4	K_4	K_4	$2K_5$	$2K_1 + 2K_2$	$2K_3$
K_5	K_5	K_5	$2K_4$	$2K_3$	$2K_1 + 2K_2$

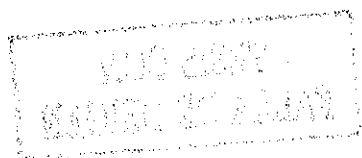
Cuadro 40: *tabla de multiplicación de clases del grupo C_{4v} .*



Ahora, de la tabla de multiplicación se puede obtener la representación natural

$$\begin{aligned}
 \Delta(K_1) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
 \Delta(K_2) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
 \Delta(K_3) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}, \\
 \Delta(K_4) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 \Delta(K_5) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{186}
 \end{aligned}$$

El conjunto completo se podrá encontrar una vez que se conozcan los valores propios para las diferentes clases, sin embargo, se observa que ningún operador de clase forma un conjunto completo por sí mismo, puesto que todos presentan valores propios degenerados. Pero la combinación lineal $3K_2 + 3K_3 + K_4 + 2K_5$ sí puede formar un conjunto completo pues presenta valores propios que no están degenerados como se observa en la tabla 41.



$3K_2 + 3K_3 + K_4 + 2K_5$	valor propio					vector propio
	K_1	K_2	K_3	K_4	K_5	
-5	1	1	-2	2	-2	(-1, -1, 1, -1, 1)
-3	1	-1	0	0	0	(-1, 1, 0, 0, 0)
-1	1	1	-2	-2	2	(1, 1, -1, -1, 1)
3	1	1	2	-2	-2	(-1, -1, -1, 1, 1)
15	1	1	2	2	2	(1, 1, 1, 1, 1)

Cuadro 41: valores y vectores propios del grupo C_{4v} .

Sus cinco eigenvectores son:

$$\begin{aligned}
\lambda = -5, \quad \mathbf{Q}^{(-5)} &= \frac{1}{\sqrt{8}}(-K_1 - K_2 + K_3 - K_4 + K_5) \\
\lambda = -3, \quad \mathbf{Q}^{(-3)} &= \frac{1}{\sqrt{8}}(-K_1 + K_2) \\
\lambda = -1, \quad \mathbf{Q}^{(-1)} &= \frac{1}{\sqrt{8}}(K_1 + K_2 - K_3 - K_4 + K_5) \\
\lambda = 3, \quad \mathbf{Q}^{(3)} &= \frac{1}{\sqrt{8}}(-K_1 - K_2 - K_3 + K_4 + K_5) \\
\lambda = 15, \quad \mathbf{Q}^{(15)} &= \frac{1}{\sqrt{8}}(K_1 + K_2 + K_3 + K_4 + K_5),
\end{aligned} \tag{187}$$

donde ya se tomó en cuenta la normalización de acuerdo con lo que indican las ecuaciones (128)-(130).

En este momento se puede obtener la matriz de transformación que diagonaliza simultáneamente las matrices de la representación natural (186) a partir de los vectores propios,

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \tag{188}$$

y entonces, mediante la matriz del cambio de base representada por (188)

$$\mathbf{S}^{-1}\Delta(K_1)\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}^{-1}\Delta(K_2)\mathbf{S} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
\mathbf{S}^{-1}\Delta(K_3)\mathbf{S} &= \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \\
\mathbf{S}^{-1}\Delta(K_4)\mathbf{S} &= \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \\
\mathbf{S}^{-1}\Delta(K_5)\mathbf{S} &= \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \tag{189}
\end{aligned}$$

se reduce el espacio \mathbf{L}_c a cinco subespacios irreducibles

$$\mathbf{S}^{-1}\Delta(K_i)\mathbf{S} = \mathbf{D}^{(-5)}(K_i) \oplus \mathbf{D}^{(-3)}(K_i) \oplus \mathbf{D}^{(-1)}(K_i) \oplus \mathbf{D}^{(3)}(K_i) \oplus \mathbf{D}^{(15)}(K_i) , \tag{190}$$

en consecuencia

$$\mathbf{L}_c = \mathbf{L}_{(-5)} \oplus \mathbf{L}_{(-3)} \oplus \mathbf{L}_{(-1)} \oplus \mathbf{L}_{(3)} \oplus \mathbf{L}_{(15)} . \tag{191}$$

Por otra parte, a partir de la tabla 41, también es posible obtener la tabla de caracteres mediante los vectores propios. Ahora bien, con base en las relaciones de ortogonalidad (en una tabla de caracteres tanto renglones como columnas son ortogonales) [14], se deriva el hecho de que la suma de los cuadrados de las dimensiones de las representaciones satisface

$$\sum_{\mu=1}^{|K|} n_{\mu}^2 = |G| , \tag{192}$$

donde n es la dimensión y $|G|$ es el orden del grupo. En nuestro caso, el número de elementos en el grupo C_{4v} es de ocho y puesto que son cinco clases, se cumple,

$$1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 + 2^2 = 8, \quad (193)$$

por lo que existe una representación bidimensional, así que la tabla de caracteres finalmente tendrá la forma que se observa en la tabla 42,

C_{4v}	E	C_2	C_4, C_4^3	σ_v^a, σ_v^b	σ_d^a, σ_d^b	funciones base
B₁, -5	1	1	-1	1	-1	
E, -3	2	-2	0	0	0	xy
B₂, -1	1	1	-1	-1	1	$x^2 - y^2$
A₂, 3	1	1	1	-1	-1	R_z
A₁, 15	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2; z^2$

Cuadro 42: Tabla de caracteres del grupo C_{4v} .

donde ya se eligió la fase adecuada, pues los caracteres de la clase K_1 no pueden ser negativos. Además, se incluyen para las representaciones irreducibles, los símbolos tradicionales y los basados en el valor propio de $\hat{C} = 3K_2 + 3K_3 + K_4 + 2K_5$, así como las funciones base que indican las propiedades de transformación de las coordenadas x, y, z y los vectores axiales R_x, R_y, R_z bajo la acción del grupo con respecto al sistema de referencia de la figura 27.

Ya aquí es posible proyectar el espacio de funciones mediante la diagonalización del conjunto completo $\hat{C} = 3K_2 + 3K_3 + K_4 + 2K_5$. Sin embargo, observamos que eso implicaría ejecutar la acción de todos los operadores que se encuentran dentro de esa combinación lineal, es decir, si elegimos proyectar sobre el espacio de funciones $\{p_x, p_y, p_z\}$, entonces tendríamos lo siguiente

$$\begin{aligned} \hat{C}(p_x, p_y, p_z) &= 3\hat{K}_2(p_x, p_y, p_z) + 3\hat{K}_3(p_x, p_y, p_z) + \hat{K}_4(p_x, p_y, p_z) + 2\hat{K}_5(p_x, p_y, p_z) \\ &= 3\hat{C}_2(p_x, p_y, p_z) + 3(\hat{C}_4 + \hat{C}_4^3)(p_x, p_y, p_z) + (\hat{\sigma}_v^a + \hat{\sigma}_v^b)(p_x, p_y, p_z) \\ &\quad + 2(\hat{\sigma}_d^a + \hat{\sigma}_d^b)(p_x, p_y, p_z) \quad (194) \end{aligned}$$

Pero antes de realizar esta laboriosa tarea, convendría recordar que el conjunto completo no es único. Siempre se puede encontrar una combinación lineal de las clases que constituya un conjunto completo. Así por ejemplo, a partir de la tabla 42 de

caracteres, se observa que es posible emplear sólo dos clases para distinguir las R.I. como se observa a continuación:

C_{4v}	$2C_4$	$2\sigma_v$
A ₁	1	1
A ₂	1	-1
B ₁	-1	1
B ₂	-1	-1
E ₁	0	0

Se encuentra que la combinación lineal $K_3 + 2K_4$ también genera valores propios todos distintos junto con los antiguos vectores propios que ya conocíamos. Esto queda expresado en la siguiente tabla

<i>valores propios</i>	<i>vectores propios</i>
$K_3 + 2K_4$	
2	(-1,-1,1,-1,1)
0	(-1,1,0,0,0)
-6	(1,1,-1,-1,1)
-2	(-1,-1,-1,1,1)
6	(1,1,1,1,1)

Así que ahora, al proyectar sobre el espacio de funciones $\{p_x, p_y, p_z\}$ mediante el conjunto completo $\hat{C}' = K_3 + 2K_4$, se encuentra lo siguiente

$$\hat{C}'(p_x, p_y, p_z) = (\hat{C}_4 + \hat{C}_4^3)(p_x, p_y, p_z) + 2(\hat{\sigma}_v^a + \hat{\sigma}_v^b)(p_x, p_y, p_z). \quad (195)$$

Desarrollando la acción de cada operación

$$\begin{aligned} \hat{C}_4 p_x &= (\hat{C}_4)^{-1} p_x = \hat{C}_4^3 p_x = -p_y, \\ \hat{C}_4 p_y &= (\hat{C}_4)^{-1} p_y = \hat{C}_4^3 p_y = p_x, \\ \hat{C}_4 p_z &= (\hat{C}_4)^{-1} p_z = \hat{C}_4^3 p_z = p_z, \\ \Rightarrow \hat{C}_4(p_x, p_y, p_z) &= (p_x, p_y, p_z) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \hat{C}_4^3 p_x &= (\hat{C}_4^3)^{-1} p_x = \hat{C}_4 p_x = p_y, \\ \hat{C}_4^3 p_y &= (\hat{C}_4^3)^{-1} p_y = \hat{C}_4 p_y = -p_x, \\ \hat{C}_4^3 p_z &= (\hat{C}_4^3)^{-1} p_z = \hat{C}_4 p_z = p_z, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \hat{C}_4^3(p_x, p_y, p_z) &= (p_x, p_y, p_z) \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
\hat{\sigma}_v^a p_x &= (\hat{\sigma}_v^a)^{-1} p_x = \hat{\sigma}_v^a p_x = p_x, \\
\hat{\sigma}_v^a p_y &= (\hat{\sigma}_v^a)^{-1} p_y = \hat{\sigma}_v^a p_y = -p_y, \\
\hat{\sigma}_v^a p_z &= (\hat{\sigma}_v^a)^{-1} p_z = \hat{\sigma}_v^a p_z = p_z, \\
\Rightarrow \hat{\sigma}_v^a(p_x, p_y, p_z) &= (p_x, p_y, p_z) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
\hat{\sigma}_v^b p_x &= (\hat{\sigma}_v^b)^{-1} p_x = \hat{\sigma}_v^b p_x = -p_x, \\
\hat{\sigma}_v^b p_y &= (\hat{\sigma}_v^b)^{-1} p_y = \hat{\sigma}_v^b p_y = p_y, \\
\hat{\sigma}_v^b p_z &= (\hat{\sigma}_v^b)^{-1} p_z = \hat{\sigma}_v^b p_z = p_z, \\
\Rightarrow \hat{\sigma}_v^b(p_x, p_y, p_z) &= (p_x, p_y, p_z) \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{196}$$

por lo que finalmente,

$$\hat{C}'(p_x, p_y, p_z) = (p_x, p_y, p_z) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 \end{pmatrix} \tag{197}$$

Efectivamente, al diagonalizar la representación de este conjunto completo, se encuentra que los valores propios que genera están comprendidos dentro del conjunto de valores propios $\{-6, -2, 0, 2, 6\}$, pero ahora los vectores propios son

$$\{p_x^{(0)}, p_y^{(0)}, p_z^{(6)}\} \tag{198}$$

lo que nos conduce a la reducción del espacio

$$\mathbf{L}_3 = \mathbf{L}_{(0)} \oplus \mathbf{L}_{(6)}, \tag{199}$$

donde el subespacio $\mathbf{L}_{(0)}$ es bidimensional y el $\mathbf{L}_{(6)}$ es unidimensional.

Para reducir el espacio bidimensional, $\mathbf{L}_{(0)}$ en dos subespacios unidimensionales, se necesita un operador adicional $\hat{C}(s)$ que conmute con \hat{C}' y nos permita distinguir las componentes de la representación bidimensional E.

Por otra parte, el grupo $C_{4\nu}$ tiene, entre otros, el siguiente subgrupo

$$C_{4\nu} \supset C_s^a \quad (200)$$

del cual, en la sección anterior obtuvimos su tabla de caracteres. Así que de la subducción de la representación bidimensional $E(\nu = 0)$ que está dada por

$C_{4\nu} \supset C(s)$
$A_1 \rightarrow A$
$A_2 \rightarrow A'$
$B_1 \rightarrow A$
$B_2 \rightarrow A'$
$E \rightarrow A \oplus A'$

podemos identificar a $\hat{C}(s) = \hat{\sigma}_\nu^a$ como el operador que nos proveerá de las etiquetas que distinguen las componentes de la representación bidimensional E.

Así, para generar un conjunto completo de tipo II consideramos la combinación lineal

$$\begin{aligned} CCOC - II &= a\hat{C}' + b\hat{C}(s) \\ &= a(\hat{K}_3 + 2\hat{K}_4) + b\hat{K}_2^{sub} \end{aligned} \quad (201)$$

donde

$$\begin{aligned} \hat{K}_3 &= \hat{C}_4 + \hat{C}_4^3 \\ \hat{K}_4 &= \hat{\sigma}_\nu^a + \hat{\sigma}_\nu^b \\ \hat{K}_2^{sub} &= \hat{\sigma}_\nu^a \end{aligned} \quad (202)$$

Ahora es muy importante conocer los coeficientes a y b . Lo anterior se hace usando la ecuación (175) que ya conocíamos. Se tienen que elegir estos coeficientes de tal manera que para cada representación, el CCOC-II tenga asociados distintos eigenvalores.

Para nosotros una combinación adecuada, resultó ser aquella donde $a = b = 1$, es decir

$$CCOC - II = K_3 + 2K_4 + K_2^{sub} \quad (203)$$

<i>R.I</i>	λ_i^ν de K_3	λ_i^ν de $2K_4$	λ_i^ν de K_2^{sub}	λ_i^ν del <i>CCOC-II</i>
A ₁	2	4	1	7
A ₂	2	-4	-1	-3
B ₁	-2	4	1	3
B ₂	-2	-4	-1	-7
E ^A	0	0	1	1
E ^{A'}	0	0	-1	-1

Cuadro 43: *Tabla de valores propios del CCOC-II.*

cuyos valores propios asociados se presentan en la tabla 43. Finalmente, si proyectamos $\hat{C}(s)$ sobre el espacio de funciones $\{p_x^0, p_y^0\}$ para desdoblar el subespacio $L_{(0)}$ bidimensional, de la misma manera que se hizo para el grupo C_{3v} , encontramos

$$L_3 = L_{(0)+1} \oplus L_{(0)-1} \oplus L_{(6)+1} \quad (204)$$

y el espacio de funciones tendrá una etiqueta extra

$$p_{x,+1}^{(0)}, p_{y,-1}^{(0)}, p_{z,+1}^{(6)} \quad (205)$$

Tres

Simetría en el problema de la caja cuadrada

Con la herramienta desarrollada en las secciones anteriores de esta segunda parte, es posible abordar el tema de la caja cuadrada. De la sección anterior ya conocemos el CCOC-II para el grupo C_{4v} , el grupo de simetría de la caja cuadrada. Así que podemos proyectar el espacio de funciones de la caja bidimensional, mediante este conjunto completo.

Con la finalidad de generar una base adaptada por simetría, conviene conocer cómo actúan los operadores del grupo sobre las funciones de la caja cuadrada en la zona donde $V_o = 0$, tanto para las funciones par-par, impar-impar, impar-par ó par-impar.

Basta con tomar sólo un operador por clase para darnos cuenta de que bajo la acción de estos operadores se generan dos tipos de funciones, a saber

$$\aleph = \Psi_{k_1, k_2}(x, y) \quad (206)$$

y

$$\wp = \Psi_{k_2, k_1}(x, y), \quad (207)$$

pues la acción de los operadores del CCOC-II sobre la base es

$$\begin{aligned} C_4 \aleph &= (C_4)^{-1} \aleph = (C_4^3(x, y)) \Psi_{k_1, k_2} = \Psi_{k_1, k_2}(-y, x) = (-)^{n_1} \wp \\ C_4 \wp &= (C_4)^{-1} \wp = (C_4^3(x, y)) \Psi_{k_2, k_1} = \Psi_{k_2, k_1}(-y, x) = (-)^{n_2} \aleph \\ C_4^3 \aleph &= (C_4^3)^{-1} \aleph = (C_4(x, y)) \Psi_{k_1, k_2} = \Psi_{k_1, k_2}(y, -x) = (-)^{n_2} \wp \\ C_4^3 \wp &= (C_4^3)^{-1} \wp = (C_4(x, y)) \Psi_{k_2, k_1} = \Psi_{k_2, k_1}(y, -x) = (-)^{n_1} \aleph \\ \sigma_v^a \aleph &= (\sigma_v^a)^{-1} \aleph = (\sigma_v^a(x, y)) \Psi_{k_1, k_2} = \Psi_{k_1, k_2}(x, -y) = (-)^{n_2} \aleph \\ \sigma_v^a \wp &= (\sigma_v^a)^{-1} \wp = (\sigma_v^a(x, y)) \Psi_{k_2, k_1} = \Psi_{k_2, k_1}(x, -y) = (-)^{n_1} \wp \\ \sigma_v^b \aleph &= (\sigma_v^b)^{-1} \aleph = (\sigma_v^b(x, y)) \Psi_{k_1, k_2} = \Psi_{k_1, k_2}(-x, y) = (-)^{n_1} \aleph \\ \sigma_v^b \wp &= (\sigma_v^b)^{-1} \wp = (\sigma_v^b(x, y)) \Psi_{k_2, k_1} = \Psi_{k_2, k_1}(-x, y) = (-)^{n_2} \wp \end{aligned} \quad (208)$$

ya que

$$\begin{aligned} \hat{I} \aleph &= \hat{I} \Psi_{k_1, k_2} = \hat{I} \Psi_{k_1} \hat{I} \Psi_{k_2} = (-)^{n_1} \Psi_{k_1} (-)^{n_2} \Psi_{k_2}, \\ \hat{I} \wp &= \hat{I} \Psi_{k_2, k_1} = \hat{I} \Psi_{k_2} \hat{I} \Psi_{k_1} = (-)^{n_2} \Psi_{k_2} (-)^{n_1} \Psi_{k_1}, \end{aligned} \quad (209)$$

donde $(-)^{n_i}$ indica la paridad relacionada con k_i .

Si ahora hacemos operar el CCOC-II sobre este subespacio (\aleph, \wp) encontramos de manera general, lo siguiente:

$$\begin{aligned} \|\langle \aleph | \hat{K}_3 + 2\hat{K}_4 + \hat{K}_2^{sub} | \wp \rangle\| &= \begin{pmatrix} 0 & (-)^{n_2} \\ (-)^{n_1} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & (-)^{n_1} \\ (-)^{n_2} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2(-)^{n_2} & 0 \\ 0 & 2(-)^{n_1} \end{pmatrix} + \\ &\quad \begin{pmatrix} 2(-)^{n_1} & 0 \\ 0 & 2(-)^{n_2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} (-)^{n_2} & 0 \\ 0 & (-)^{n_1} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (210)$$

que de manera más compacta se observa como

$$\|\langle \aleph | \hat{K}_3 + 2\hat{K}_4 + \hat{K}_2^{sub} | \wp \rangle\| = \begin{pmatrix} 3(-)^{n_2} + 2(-)^{n_1} & (-)^{n_2} + (-)^{n_1} \\ (-)^{n_1} + (-)^{n_2} & 3(-)^{n_1} + 2(-)^{n_2} \end{pmatrix}. \quad (211)$$

Así, para las funciones par-par, $\Psi_{k_1, k_2}(x, y) = N \cos(k_1 x) \cos(k_2 y)$ con $k = 1, 3, \dots$ y $k_1 \neq k_2$, se obtiene:

$$\|\langle \aleph | \hat{K}_3 + 2\hat{K}_4 + \hat{K}_2^{sub} | \wp \rangle\| = \begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 2 & 5 \end{bmatrix}, \quad (212)$$

donde los eigenvalores de ésta matriz son $\lambda_1 = 3$ y $\lambda_2 = 7$, los cuales corresponden justamente a las representaciones B_1 y A_1 según se observa en la tabla 43.

Como consecuencia de lo anterior, y tomando en cuenta las transformaciones en (208) y la tabla de caracteres del grupo (tabla 42), se generan las combinaciones lineales $\Phi^+ = N(\aleph + \wp)$ (que en este caso se transforma de acuerdo con la representación irreducible A_1) y $\Phi^- = N(\aleph - \wp)$ (que se transforma de acuerdo con B_1 .) Finalmente obtenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned} \Phi^{A_1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{k_1, k_2}(x, y) + \Psi_{k_2, k_1}(x, y)) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\aleph + \wp), \\ \Phi^{B_1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{k_1, k_2}(x, y) - \Psi_{k_2, k_1}(x, y)) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\aleph - \wp). \end{aligned} \quad (213)$$

donde ya hemos incluido la constante de normalización según se observa en (187).

Una vez hecho esto es directa la obtención de los eigenvalores para los estados impar-impar, par-impar y sus respectivas representaciones. Al final se obtiene que

para los estados **impar-impar** ($\Psi_{k_1, k_2}(x, y) = N \text{sen}(k_1 x) \text{sen}(k_2 y)$ con $k = 2, 4, \dots$ y $k_1 \neq k_2$):

$$\|\langle N | \hat{K}_3 + 2\hat{K}_4 + \hat{K}_2^{sub} | \wp \rangle\| = \begin{bmatrix} -5 & -2 \\ -2 & -5 \end{bmatrix}, \quad (214)$$

cuyos eigenvalores, $\lambda_3 = -3$ y $\lambda_4 = -7$ corresponden a las representaciones A_2 y B_2 . Cuando se toma en cuenta (208) y la tabla de caracteres del grupo, para estas funciones se obtiene,

$$\begin{aligned} \Phi^{B_2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{k_1, k_2}(x, y) + \Psi_{k_2, k_1}(x, y)) = \frac{1}{\sqrt{2}}(N + \wp) \\ \Phi^{A_2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{k_1, k_2}(x, y) - \Psi_{k_2, k_1}(x, y)) = \frac{1}{\sqrt{2}}(N - \wp) \end{aligned} \quad (215)$$

donde $k_1 \neq k_2$ y $k_i = 2, 4, \dots$

Para los estados **par-impar** ($\Psi_{k_1, k_2}(x, y) = N \cos(k_1 x) \text{sen}(k_2 y)$), obtenemos:

$$\|\langle N | \hat{K}_3 + 2\hat{K}_4 + \hat{K}_2^{sub} | \wp \rangle\| = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (216)$$

y para aquellos **impar,par** ($\Psi_{k_1, k_2}(x, y) = N \text{sen}(k_1 x) \cos(k_2 y)$),

$$\|\langle N | \hat{K}_3 + 2\hat{K}_4 + \hat{K}_2^{sub} | \wp \rangle\| = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (217)$$

A los dos últimos estados les corresponde la representación E como puede comprobarse de la tabla de valores propios del CCOC-II (tabla 43).

Para aquellos estados en los que $k_1 = k_2 = k$, se tiene

$$\langle \Psi_{k, k} | \hat{K}_3 + 2\hat{K}_4 + \hat{K}_2^{sub} | \Psi_{k, k} \rangle = 2(-)^n + 4(-)^n + (-)^n = 7(-)^n, \quad (218)$$

donde $n = n_1 = n_2$.

Para el caso (par,par) generan el eigenvalor 7 que corresponde a la representación A_1 , mientras que los estados (impar,impar) generan el eigenvalor -7 que corresponde

a la representación B_2 . Así,

$$\begin{aligned}\Phi^{A_1} &= \frac{1}{\sqrt{2(1 + \delta_{k_1 k_2})}} (\Psi_{k_1, k_2}(x, y) + \Psi_{k_2, k_1}(x, y)) = \frac{1}{\sqrt{2(1 + \delta_{k_1 k_2})}} (N + \varrho), \\ \Phi^{B_2} &= \frac{1}{\sqrt{2(1 + \delta_{k_1 k_2})}} (\Psi_{k_1, k_2}(x, y) - \Psi_{k_2, k_1}(x, y)) = \frac{1}{\sqrt{2(1 + \delta_{k_1 k_2})}} (N - \varrho) \quad (219)\end{aligned}$$

En lo que se refiere a la obtención de la caja bidimensional para nuestro modelo de heteroestructura usando el método variacional, todo lo que se desarrolló en lo que va de este capítulo, nos permitirá diagonalizar la interacción de la figura 18, de tal forma que en una sola matriz se encuentren sólo aquellos elementos que poseen una misma representación irreducible, lo cual es muy útil porque las matrices que se generarán son más pequeñas y por lo tanto más prácticas al diagonalizar. Por ejemplo, tomemos el caso de las funciones par-par del sistema con más estados ligados (el de los huecos pesados con área $100 \times 100 \text{Å}^2$). La base adaptada por simetría que le corresponde, después de todo lo que ya se ha mencionado, es

$$\begin{aligned}|\Phi_1^{A_1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|1, 3\rangle + |3, 1\rangle], \\ |\Phi_2^{A_1}\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}}[|1, 5\rangle + |5, 1\rangle], \\ |\Phi_3^{A_1}\rangle &= |1, 1\rangle, \\ |\Phi_4^{A_1}\rangle &= |3, 3\rangle, \\ |\Phi_1^{B_1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|3, 1\rangle - |1, 3\rangle], \\ |\Phi_2^{B_1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|5, 1\rangle - |1, 5\rangle], \quad (220)\end{aligned}$$

donde $\Psi_{n_1, n_2} \rightarrow |n_1, n_2\rangle$.

Ya con ésto, observamos que los elementos de matriz para las funciones par-par con representación A_1 en la diagonalización son:

$$\begin{array}{cccc} \langle(1, 1)|H|(1, 1)\rangle & \langle(1, 1)|H|(3, 3)\rangle & \frac{1}{\sqrt{2}}\langle(1, 1)|H|(1, 3) + (3, 1)\rangle & \frac{1}{\sqrt{2}}\langle(1, 1)|H|(1, 5) + (5, 1)\rangle \\ \langle(3, 3)|H|(1, 1)\rangle & \langle(3, 3)|H|(3, 3)\rangle & \frac{1}{\sqrt{2}}\langle(3, 3)|H|(1, 3) + (3, 1)\rangle & \frac{1}{\sqrt{2}}\langle(3, 3)|H|(1, 5) + (5, 1)\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\langle(1, 3) + (3, 1)|H|(1, 1)\rangle & \frac{1}{\sqrt{2}}\langle(1, 3) + (3, 1)|H|(3, 3)\rangle & \frac{1}{2}\langle(1, 3) + (3, 1)|H|(1, 3) + (3, 1)\rangle & \frac{1}{2}\langle(1, 3) + (3, 1)|H|(1, 5) + (5, 1)\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\langle(1, 5) + (5, 1)|H|(1, 1)\rangle & \frac{1}{\sqrt{2}}\langle(1, 5) + (5, 1)|H|(3, 3)\rangle & \frac{1}{2}\langle(1, 5) + (5, 1)|H|(1, 3) + (3, 1)\rangle & \frac{1}{2}\langle(1, 5) + (5, 1)|H|(1, 5) + (5, 1)\rangle, \end{array} \quad (221)$$

mientras que los que corresponden a la representación B_1 son:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\langle(3, 1) - (1, 3)|H|(3, 1) - (1, 3)\rangle & \quad \frac{1}{2}\langle(3, 1) - (1, 3)|H|(5, 1) - (1, 5)\rangle \\ \frac{1}{2}\langle(5, 1) - (1, 5)|H|(3, 1) - (1, 3)\rangle & \quad \frac{1}{2}\langle(5, 1) - (1, 5)|H|(5, 1) - (1, 5)\rangle.\end{aligned} \quad (222)$$

Se procede de la misma manera para las funciones impar-impar y par-impar, lo que finalmente genera matrices más pequeñas y los mismos eigenvalores que se presentan en la tabla 25 de la primera parte de este trabajo.

Ahora bien, en la primera parte de todo este trabajo, se abordó el problema de la caja sin tomar en cuenta estas consideraciones de simetría. Es posible, sin embargo, convertir las matrices que se generaron en la primera parte, en matrices diagonales por bloques, usando la herramienta mediante una transformación de semejanza.

Por ejemplo, en (57) se muestra la matriz de los estados par-par del sistema de huecos pesados para la caja cuadrada que posee más estados ligados. Para generarla, no se ha empleado base adaptada por simetría alguna. Sin embargo, es posible obtener esa misma matriz, pero ahora diagonal por bloques mediante el cambio de base

$$\begin{pmatrix} \Phi_1^{A_1} \\ \Phi_2^{A_1} \\ \Phi_3^{A_1} \\ \Phi_4^{A_1} \\ \Phi_1^{B_1} \\ \Phi_2^{B_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |1, 1\rangle \\ |1, 3\rangle \\ |1, 5\rangle \\ |3, 1\rangle \\ |3, 3\rangle \\ |5, 1\rangle \end{pmatrix} \quad (223)$$

de acuerdo con la tabla 17 y donde la última columna representa los estados que se observan en la matriz (57). Tenemos que recordar que se omitieron de esa última matriz los estados que generan energías superiores al potencial, por eso ya sólo se reduce a una matriz de 6x6, pues sólo se diagonalizan estados ligados.

Llamaremos

$$Z = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (224)$$

por lo que

$$Z^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (225)$$

El Hamiltoniano en la base original tiene la forma

$$H = \begin{pmatrix} E_{1,1}^o - V_{11,11} & -V_{11,13} & -V_{11,15} & -V_{11,31} & -V_{11,33} & -V_{11,51} \\ -V_{13,11} & E_{1,3}^o - V_{13,13} & -V_{13,15} & -V_{13,31} & -V_{13,33} & -V_{13,51} \\ -V_{15,11} & -V_{15,13} & E_{1,5}^o - V_{15,15} & -V_{15,31} & -V_{15,33} & -V_{15,51} \\ -V_{31,11} & -V_{31,13} & -V_{31,15} & E_{3,1}^o - V_{31,31} & -V_{31,33} & -V_{31,51} \\ -V_{33,11} & -V_{33,13} & -V_{33,15} & -V_{33,31} & E_{3,3}^o - V_{33,33} & -V_{33,51} \\ -V_{51,11} & -V_{51,13} & -V_{51,15} & -V_{51,31} & -V_{51,33} & E_{5,1}^o - V_{51,51} \end{pmatrix} \quad (226)$$

por lo que el siguiente paso es obtener

$$ZHZ^\dagger \quad (227)$$

para generar la matriz en bloques.

La matriz a diagonalizar cuando se trabaja en una base no adaptada por simetría para el sistema de huecos pesados de la caja cuadrada con más estados ligados es (57)

$$H = \begin{pmatrix} 15,0338 & 0,01739 & -0,0347 & 0,01739 & -0,05599 & -0,03476 \\ 0,01739 & 74,0419 & 0,11904 & -0,05599 & 0,18215 & 0,111927 \\ -0,0347 & 0,11904 & 179,539 & 0,111927 & -0,3833 & -0,22371 \\ 0,01739 & -0,05599 & 0,111927 & 74,0419 & 0,18215 & 0,11904 \\ -0,05599 & 0,18215 & -0,3833 & 0,18215 & 132,5653 & -0,3833 \\ -0,03476 & 0,111927 & -0,2237 & 0,11904 & -0,3833 & 179,5393 \end{pmatrix} \quad (228)$$

y

$$[ZHZ^\dagger] = \begin{pmatrix} 73,9845 & 0,2309 & 0,02459 & 0,2576 & 0 & 0 \\ 0,2309 & 179,312 & -0,04916 & -0,5420 & 0 & 0 \\ 0,02459 & -0,04916 & 15,0338 & -0,05599 & 0 & 0 \\ 0,2576 & -0,5420 & -0,05599 & 132,565 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 74,0965 & 0,00711 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0,00711 & 179,76 \end{pmatrix} \quad (229)$$

Los valores propios que se obtienen de (229) corresponden exactamente a aquellos que se generaron bajo el método variacional durante el paso de la diagonalización en la primera parte de este trabajo. Lo mismo sucede para los estados **impar-impar**, donde el cambio de base está dado por

$$\begin{pmatrix} \Phi_1^{B_2} \\ \Phi_2^{B_2} \\ \Phi_1^{A_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |2, 2\rangle \\ |2, 4\rangle \\ |4, 2\rangle \end{pmatrix} \quad (230)$$

donde se observa que

$$\begin{aligned} |\Phi_1^{B_2}\rangle &= |2, 2\rangle, \\ |\Phi_2^{B_2}\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}}[|2, 4\rangle + |4, 2\rangle], \\ |\Phi_1^{A_2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|4, 2\rangle - |2, 4\rangle]. \end{aligned} \quad (231)$$

El hamiltoniano, para estos estados es

$$H = \begin{pmatrix} 59,729 & 0,218 & 0,218 \\ 0,218 & 145,375 & -0,496 \\ 0,218 & -0,496 & 145,375 \end{pmatrix}. \quad (232)$$

Finalmente, usando (230), la matriz diagonal en bloques que se genera tiene la forma

$$[ZHZ^\dagger] = \begin{pmatrix} 59,729 & -0,308 & 0 \\ -0,308 & 144,877 & 0 \\ 0 & 0 & 145,868 \end{pmatrix}, \quad (233)$$

cuyos eigenvalores corresponden exactamente a los que se indican en la tabla 25 de la primera parte.

La tabla que se observa a continuación indica los eigenvalores de la energía para el sistema de huecos pesados bajo la aproximación de paredes finitas (usando el método variacional) y la aproximación de paredes infinitas sólo que ahora se anexan sus representaciones irreducibles correspondientes.

Cuadro 44: Niveles de energía en meV y representaciones irreducibles del sistema de huecos pesados en $GaAs/Ga_{0,63}Al_{0,37}As$ con área de $100 \times 100 \text{Å}^2$, $V_o = 184 \text{meV}$, $m_w = 0,3774 m_o$ y $m_b = 0,3865 m_o$.

Aproximación de paredes finitas			Aproximación de paredes infinitas		
RI	(n_x, n_y)	Energía (meV)	RI	n_x, n_y	Energía (meV) $V_o \rightarrow \infty$
A_1	$ 1, 1\rangle$	15.034	A_1	$ 1, 1\rangle$	19.9
E	$ 1, 2\rangle, 2, 1\rangle$	37.41	E	$ 1, 2\rangle, 2, 1\rangle$	49.8
B_2	$ 2, 2\rangle$	59.73	B_2	$ 2, 2\rangle$	79.7
A_1	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 3\rangle + 3, 1\rangle)$	73.98	A_1	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 3\rangle + 3, 1\rangle)$	99.6
B_1	$\frac{1}{\sqrt{2}}(3, 1\rangle - 1, 3\rangle)$	74.1	B_1	$\frac{1}{\sqrt{2}}(3, 1\rangle - 1, 3\rangle)$	99.6
E	$ 2, 3\rangle, 3, 2\rangle$	96.25	E	$ 2, 3\rangle, 3, 2\rangle$	129.5
E	$ 1, 4\rangle, 4, 1\rangle$	123.37	E	$ 1, 4\rangle, 4, 1\rangle$	169.4
A_1	$ 3, 3\rangle$	132.56	A_1	$ 3, 3\rangle$	179.4
B_2	$\frac{1}{\sqrt{2}}(2, 4\rangle + 4, 2\rangle)$	144.88	B_2	$\frac{1}{\sqrt{2}}(2, 4\rangle + 4, 2\rangle)$	199.3
A_2	$\frac{1}{\sqrt{2}}(4, 2\rangle - 2, 4\rangle)$	145.87	A_2	$\frac{1}{\sqrt{2}}(4, 2\rangle - 2, 4\rangle)$	199.3
E	$ 3, 4\rangle, 4, 3\rangle$	181.28	E	$ 3, 4\rangle, 4, 3\rangle$	249.1
A_1	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 5\rangle + 5, 1\rangle)$	179.32	A_1	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 5\rangle + 5, 1\rangle)$	259.1
B_1	$\frac{1}{\sqrt{2}}(5, 1\rangle - 1, 5\rangle)$	179.76	B_1	$\frac{1}{\sqrt{2}}(5, 1\rangle - 1, 5\rangle)$	259.1

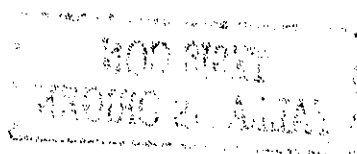
Discusión

El método que se siguió para resolver la ecuación de Schrödinger bidimensional consistió en considerar a orden cero un potencial separable (así surgen las energías sin corrección alguna que se miran en las tablas 10, 11 y 12). Posteriormente se hizo una corrección a primer orden a través de un tratamiento perturbativo. Luego se empleó el método variacional, tomando como base los estados obtenidos a orden cero. Sin embargo, al hacer la comparación que se presenta en las tablas 22,23 y 24, no se observan diferencias significativas en cuanto a estos dos métodos para el primer y el segundo sistema, puesto que son muy pocos los estados ligados que se encuentran en esas cajas poco profundas. Además, la diagonalización contempla exclusivamente a los estados ligados, es decir, se omiten de las matrices aquellos elementos con energías que sobrepasan las paredes de las cajas, y que surgen de manera natural. Tal es el caso de los estados digamos (1,3), (3,2) o (3,3) del tercer sistema con área de $50 \times 50 \text{Å}^2$, que es de esperarse que existan, puesto que si en una dimensión tal sistema presenta 3 estados ligados, en dos dimensiones se esperan 9 estados, pero resulta que sus energías se encuentran por arriba de las paredes de la caja (184 meV, que es justo el valor del δE_v , ver la figura 6) por lo que no se incluyen en la base, de modo que los resultados que surgen de la diagonalización se reducen a la corrección a primer orden y de esa manera las energías que surgen de ambos métodos, son las mismas.

De hecho esos estados resonantes que poseen energías mayores que las paredes de las cajas, pertenecen al continuo. Y ya se observa en la tabla 16 (que compara las energías que surgen de diagonalizar sólo estados ligados (matriz de 6×6) y estados ligados más estados de energía positiva (matriz de 9×9)), que existe una evidencia que indica que si se incluyeran los estados del continuo podríamos reproducir las soluciones exactas.

En general se observa que todos los niveles de energía se calculan más bajos usando la aproximación con paredes finitas cuando se los compara con aquellos que surgen de la aproximación de paredes infinitas. Los casos en los que esta diferencia se hace más evidente, corresponden a los sistemas con dimensiones pequeñas.

También se observa que usando el método variacional en el sistema de paredes finitas, desaparecen algunas degeneraciones que se presentan bajo la aproximación de las paredes infinitas. Como ocurre, por ejemplo, en la caja de $50 \times 100 \text{Å}^2$ (sólo en la primera parte obtenemos los resultados para cajas rectangulares) de los huecos pesados ($V_0=184 \text{meV}$, $m_w=0.3774m_0$ y $m_b=0.3865m_0$) entre los estados (2,2) y (1,4) (pero este tipo de degeneración ocurre debido a una relación digamos "pitagórica", donde $n_1^2 + n_2^2 = n_3^2 + n_4^2$. Ver ecuación 16 y la tabla 25).



A esa misma aproximación de la caja bidimensional de paredes infinitas, también se la puede mirar desde la perspectiva de la simetría (el grupo puntual que le corresponde también es el C_{4v} , así que se valen las mismas etiquetas que se observaron en el último capítulo de este trabajo para el caso de la caja de paredes finitas, sólo que ahora las funciones dentro de las combinaciones lineales son de la forma que indica la ecuación 15) para observar que existen estados con la misma paridad $\Phi_{2l+1,2k+1}^+$, $\Phi_{2l+1,2k+1}^-$ ó $\Phi_{2l,2k}^+$ y $\Phi_{2l,2k}^-$ (en los que $k \neq l$) que presentan otro tipo de degeneración, a pesar de que portan una representación irreducible unidimensional. Y es en este sentido que esa degeneración *no* se puede explicar como consecuencia directa de la simetría del grupo C_{4v} , pues no existe una razón desde el punto de vista de este grupo, por la cual esos estados se encuentren degenerados, por eso, se los considera *accidentalmente degenerados* [18] en la caja infinita debido a la separabilidad del potencial. Ver la tabla 44.

Así, una vez que se aborda el sistema de la caja con barreras finitas, donde el potencial ya *no* se puede considerar separable, se puede prever que esas degeneraciones accidentales presentes en la aproximación de paredes infinitas, desaparecerán, puesto que ahora al diagonalizar la interacción de la figura 18 en una base adaptada por simetría, se rompe la degeneración accidental (observe la tabla 44). En las figuras 30 y 31 se muestran las gráficas de contorno para el sistema de huecos pesados con más estados ligados, en especial, para estos ejemplos se puede observar que no existe una operación que pueda transformar el estado $\Phi_{1,3}^+$ en el estado $\Phi_{3,1}^-$ una vez rota la degeneración. También se incluyen en las figuras 32 y 33, las gráficas en tres dimensiones para los estados $\Phi_{1,3}^+$ y $\Phi_{3,1}^-$.

Ahora bien, el par de estados $\Phi_{2l,2k+1}$ y $\Phi_{2l+1,2k}$ (con $k \neq l$) portan la representación irreducible \mathbf{E} (igual que en la aproximación de paredes infinitas) y es por ésto, que para estos estados la degeneración sí la explica el mismo grupo de simetría C_{4v} puesto que \mathbf{E} es una representación bidimensional. En las figuras 23 y 24 se observan en particular, las funciones de onda $\Phi_{2,3}$ y $\Phi_{3,2}$ asociadas con esta simetría, en el sistema de huecos pesados con más estados ligados. Las gráficas de contorno para estas mismas funciones se presentan en las figuras 28 y 29 y ya se observa que una sola operación de rotación transforma $\Phi_{2,3}$ en $\Phi_{3,2}$ puesto que están degenerados.

Sobre ésto, se puede concluir que si se estudian las propiedades de simetría del potencial de confinamiento, es posible predecir cuáles de las degeneraciones presentes en el sistema bajo la aproximación de las paredes infinitas se deben a la separabilidad del potencial y son por ésto accidentales por lo que desaparecerán en la presencia de barreras finitas.

Finalmente se observa que las energías que se obtienen a través del método varia-

cional no difieren significativamente de las que tomamos como referencia[11] y que también se incluyeron en las tablas respectivas. Allí, los autores emplean el método del elemento finito para resolver la ecuación del sistema que ya desde un principio contempla el hecho de que el potencial *no* es separable.

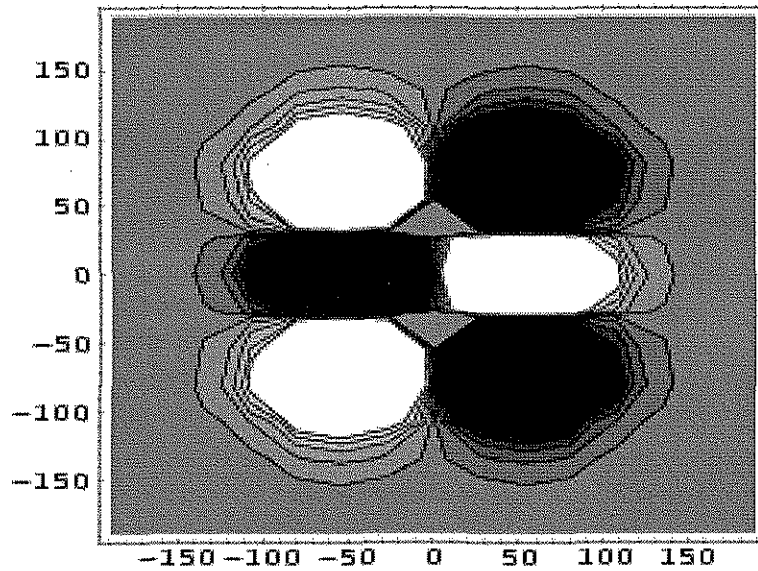
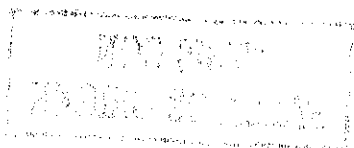


Figura 28: Gráfica de contorno para la función $\Phi_{2,3}$ del sistema de huecos pesados con área de $100 \times 100 \text{Å}^2$ en la aproximación de paredes finitas.



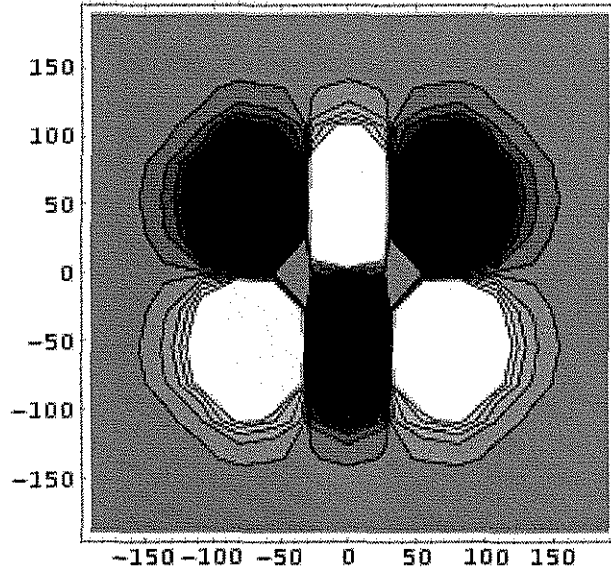


Figura 29: Gráfica de contorno para la función $\Phi_{3,2}$ del sistema de huecos pesados con área de $100 \times 100 \text{Å}^2$ en la aproximación de paredes finitas.

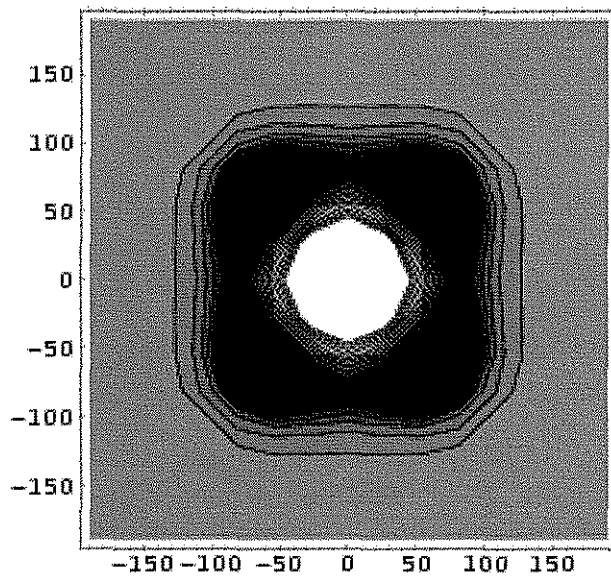


Figura 30: Gráfica de contorno para la función de onda $\Phi_{3,1}^+ = \Phi_1^{A1}$ del sistema de huecos pesados con área de $100 \times 100 \text{Å}^2$ en la aproximación de paredes finitas.

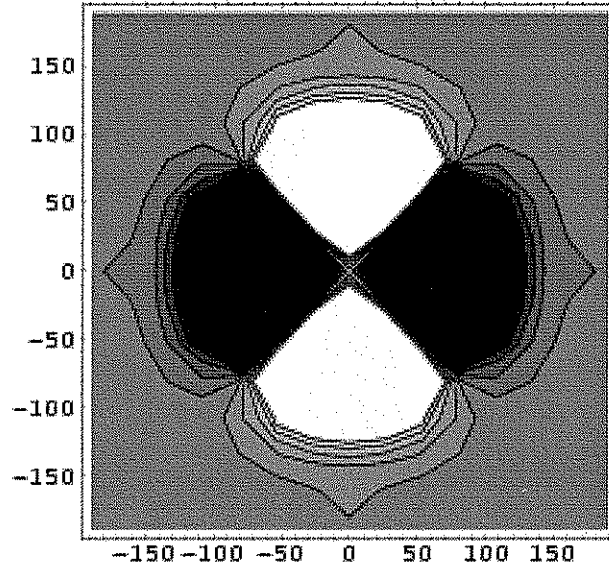


Figura 31: Gráfica de contorno para la función de onda $\Phi_{3,1}^- = \Phi_1^{B_1}$ del sistema de huecos pesados con área de $100 \times 100 \text{Å}^2$ en la aproximación de paredes finitas.

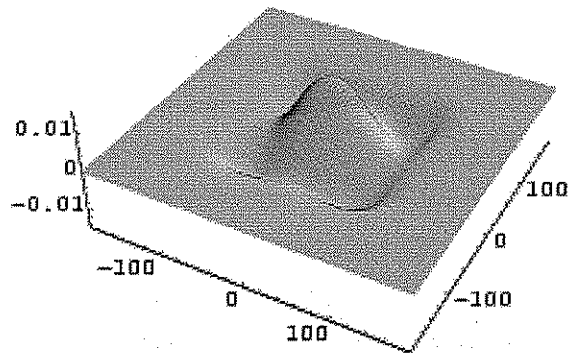


Figura 32: Gráfica para la función de onda $\Phi_{3,1}^+ = (3,1) + (1,3)$ en la caja de $100 \times 100 \text{Å}^2$ para el sistema de huecos pesados.

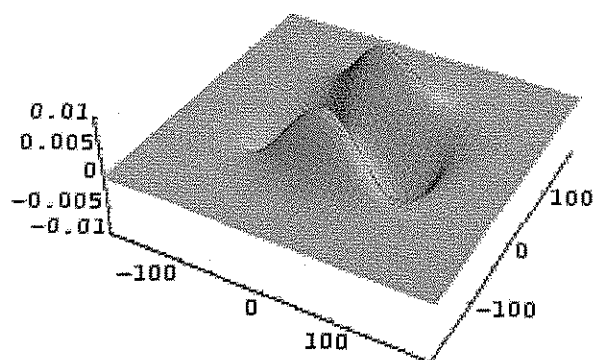


Figura 33: Gráfica para la función de onda $\Phi_{3,1}^- = (3,1)-(1,3)$ en la caja de $100 \times 100 \text{ \AA}^2$ para el sistema de huecos pesados.

Conclusiones generales

Con este trabajo logramos crear un modelo aproximado para describir un pozo cuadrado cuántico bidimensional de paredes rectas y finitas desde varios puntos de vista.

De las perspectivas desde las cuales se abordó el problema, merece especial atención aquella en la que el método de vectores propios desarrollado por Chen[13] constituye una poderosa y a un tiempo elegante herramienta de trabajo. Y es que una vez que se cuenta con la representación natural, la generación del conjunto completo de operadores que conmutan ya sea de tipo I y tipo II, es casi directa. Esto es muy importante, porque posteriormente podemos proyectar mediante la diagonalización de ese conjunto completo, lo que finalmente nos permitirá crear una base adaptada por simetría. Y ya con ella se hace menos laborioso el paso de la diagonalización de los estados ligados en la caja, pues las matrices que resultan son más pequeñas y ya no es tan difícil manejarlas, puesto que en una sola matriz se encuentran únicamente los estados que poseen la misma representación. O en todo caso, es posible generar matrices diagonales en bloques como aquí se hizo.

De esta manera y con ésta herramienta, se abre una gama enorme de posibilidades, que van desde la obtención de las tablas de caracteres hasta la generación de bases adaptadas por simetría, lo que simplifica de manera significativa el trabajo en sistemas físicos que sean invariantes ante las operaciones de un grupo puntual de simetría. También se puede aplicar éste formalismo a problemas moleculares, lo que resulta en un acercamiento muy eficiente [16, 17].

Finalmente, el problema del tratamiento del continuo para el pozo cuadrado bidimensional sigue abierto. Aquí sólo se mencionó como una posibilidad para reproducir los resultados que tomamos como referencia sólo si se cuenta con una base completa.

Apéndice

Sobre el flujo y las condiciones de continuidad

La conservación de la probabilidad se garantiza debido al teorema integral de Gauss cuando es posible definir una probabilidad de densidad de corriente (o probabilidad de flujo) \mathbf{j} , que junto con la densidad de probabilidad ($\rho = \Psi^*\Psi = |\Psi|^2$) satisfaga la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (234)$$

con

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*]. \quad (235)$$

Para generar las condiciones de continuidad, tomemos el caso de un escalón de potencial unidimensional como el que se observa en la figura 34.

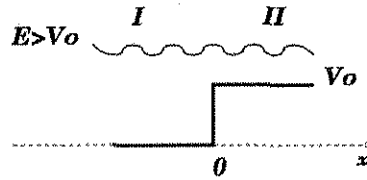


Figura 34: Escalón de potencial unidimensional para $E > V_0$.

Las funciones de onda están dadas por

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & -\infty < x \leq 0 \\ Ce^{ik'x} & 0 \leq x < \infty \end{cases} \quad (236)$$

donde A, B y C son constantes y k y k' son los números de onda para cada región permitida clásicamente.

Así que la densidad de probabilidad de cada zona evaluada en $x = 0$ es

$$\begin{aligned} \rho^I(0) &= |A + B|^2, \\ \rho^{II}(0) &= |C|^2 \end{aligned} \quad (237)$$

y si suponemos que la densidad de probabilidad se conserva en ambas zonas, es decir, $\rho^I(0) = \rho^{II}(0)$, entonces al final

$$|A + B| = |C|, \quad (238)$$

que es lo mismo que

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0), \quad (239)$$

y ésta es una de las condiciones de continuidad. Para obtener la otra, se calculan los flujos en ambas zonas. Para el caso unidimensional la ecuación de probabilidad de flujo se reduce a

$$j = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \Psi \frac{d\Psi^*}{dx}], \quad (240)$$

y en cada zona se encuentra lo siguiente:

$$\begin{aligned} j^I &= \frac{\hbar k}{m^I} [A^2 - B^2], \\ j^{II} &= \frac{\hbar k'}{m^{II}} [C^2], \end{aligned} \quad (241)$$

donde m^I y m^{II} son las masas efectivas en ambas zonas. Si ahora con ésto, suponemos que el flujo se debe conservar, es decir,

$$j^I(0) = j^{II}(0), \quad (242)$$

y usamos la ecuación (238), entonces

$$\begin{aligned} \frac{\hbar k}{m^I} [A^2 - B^2] &= \frac{\hbar k'}{m^{II}} [C^2], \\ (A + B)(A - B) \frac{\hbar k}{m^I} &= (A + B)^2 \frac{\hbar k'}{m^{II}}, \\ (A - B) \frac{k}{m^I} &= C \frac{k'}{m^{II}}, \end{aligned} \quad (243)$$

y esta última es la segunda condición de continuidad, pues es lo mismo que

$$\frac{1}{m_I} \frac{d\Psi_I(x)}{dx} \Big|_{x=0} = \frac{1}{m_{II}} \frac{d\Psi_{II}(x)}{dx} \Big|_{x=0}. \quad (244)$$

Sobre las unidades atómicas

En unidades atómicas las siguientes cantidades de manera arbitraria se consideran igual a 1.0 : m_e (la masa en reposo del electrón), \hbar (que es la constante de Plank dividida por 2π), e (la carga elemental del electrón), y a_o (el primer radio de Bohr del átomo de hidrógeno). Cuando se hace todo ésto, la unidad de energía que resulta es el Hartree E_h :

$$E_h = \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = 27,211 eV = 4,359748 \times 10^{-18} J$$

Cuadro 45: *Algunas cantidades físicas fundamentales en unidades atómicas y su valor en unidades del SI.*

<i>unidad y significado</i>	<i>símbolo</i>	<i>valor</i>
carga (carga del electrón)	e	$1,60218 \times 10^{-19} C$
masa (masa en reposo del electrón)	m_e	$9010939 \times 10^{-31} Kg$
constante de Plank	\hbar	$1,05457 \times 10^{-34} J.s$
longitud (primer radio de Bohr en H)	$a_o = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$	$0,52918 \times 10^{-10} m$
energía	$E_h = \frac{m_e e^4}{\hbar^2}$	$27.2116 eV = 4,35975 \times 10^{-18} J$
número de onda	$\lambda_e = a_o^{-1}$	$1,88973 \times 10^{10} m^{-1}$
masa del electrón	m_e	1
masa del protón	m_p	1835.15152
masa del neutrón	m_n	1838.6827

Referencias

- [1] Chuang, Shun Lien. *Physics of optoelectronic devices*. Jonh Wiley and Sons, Inc. 1995
- [2] W.T. Sang, Volume Ed., *Lightwave Communications Technology*,. Vol.22, Parts A-E, in R.K. Willardson and A.C. Beer, Eds., *Semiconductor and Semimetals*, Academic, New York, 1985
- [3] D.S. Chemla, and A.Pinzuk, Guest Ed., Special issues on Semiconductor Quantum Wells and Superlattices: Physics and Applications, *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-22** (September 1986).
- [4] P.S. Zory, Ed., *Quantum Well Lasers*, academic, San Diego, 1993.
- [5] T.P. Pearsall, Volume Ed., *Strained Layer Supperlattices: Physics*, Vol. 32, 1990; and *Strained Layer Superlattices: Materials Science and Technology*, Vol.33, 1991, in R. K. Willardson and A. C. Beer, Eds., *Semiconductor and Semimetals*, Academic, New York.
- [6] Carini, J.P., Londergan, J.T., Murdock, D.P., 1997 *Phys. Rev.* **B55** 9842
- [7] Carini, J.P., Londergan, J.T., Murdock, D.P., 1997 *Phys. Rev.* **B46** 15539
- [8] Reinecke, T.L. and Knipp, P.A. *Optical Properties of Quantum Wires and Quantum Dots*. Advances in solid state Physics, Vol.36, ed. by R. Helbing (Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, 1997) pg. 105
- [9] Reinecke, T.L., Knipp, P.A., 1996 *Phys. Rev.* **B54** 1880
- [10] H. Sakaki, *Jpn. J. Appl. Phys. Lett.*,**41**, 635 (1982).
- [11] Shertzer, *Phys. Rev. B* **41**, 9994 (1990).
- [12] M. Morrison. *Understanding Quantum Physics*. Cap.8 pg.326 Prentice Hall,New Jersey, 1990
- [13] Chen, Jin-Quan. *Group Representation Theory for Physicists*. World Scientific, England 1989
- [14] Lemus Casillas, Renato. *Introducción a la Teoría de Grupos y sus Aplicaciones a Sistemas Cristalinos*. Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México 2002

- [15] Merzbacher, Eugen. *Quantum Mechanics*. Third Edition. John Wiley and Sons, Inc. 1998
- [16] R. Lemus and A. Frank, 2000 *J. Mol. Spectrosc.* **201** 198-217
- [17] R. Lemus and A. Frank, 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 8321-8332
- [18] A. Frank and P.V Isacker *Algebraic Methods in molecular and nuclear structure physics*, 1994, Wiley, New York.

