



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

---

FACULTAD DE CIENCIAS

"Efecto Stark en la Punta de un  
Cantilever de un Microscopio de  
Fuerza Atómica"

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

PRESENTA:

Roberto Carlos Fernández Hernández

TUTOR

Dr. Jorge Alejandro Reyes Esqueda

2007





Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

## ***Esta tesis está dedicada:***

*A la memoria de mi Padre, que sin importar que no esté presente en cuerpo, se encuentra muy dentro de mi corazón...*

*A mi Madre, que junto con papá, hicieron de mi, a través de un gran esfuerzo, lo que ahora soy .*

*A mis hermanos, que han creído en mi y han estado conmigo.*

*A todos aquellos, mis amigos, familiares, profesores y demás, que por insignificante que parezca, me han ayudado y han contribuido en mi formación, así como han compartido un poco de su tiempo conmigo.*

*Zu dir gewidmet, meine schöne Appelöwin, dass immer tief in meinem Herzen bleiben wirst.*

## **AGRADECIMIENTOS**

*Después de escribir la última palabra de este trabajo, al fin me doy cuenta que dejo atrás una etapa más de mi vida, la cual, ha sido hasta ahora la más importante de ésta. Todos los sacrificios hechos por fin dan un resultado, no sin haber hecho un gran esfuerzo y sin haber tenido el apoyo de todos aquellos que siempre han estado a mi lado. Así, de esta manera, expreso mi gratitud*

*A Dios, por haberme dado fuerzas cuando las necesité y nunca me dió la espalda.*

*A mis padres, Roberto y Rosa María por haberme dado las armas para poderme defender en este mundo, sacrificando su propio bien.*

*A mis directores de tesis: Dr. Jorge Alejandro Reyes Esqueda y Dr. Carlos Ignacio Mendoza Ruíz, que con su apoyo y amistad logré concluir este trabajo. En especial, gracias Alex por el apoyo económico y moral que me has dado hasta ahora y por no enfadarte ante mis ausencias que retrasaron el fin de esta tesis, gracias por haberme soportado desde las canchas de basquet hasta ahora que concluyo con mi trabajo este ciclo.*

*A mi honorable jurado: M. en C. María Sabia Ruíz Chavarría, Dr. Gerardo Jorge Vázquez Fonseca y Dr. Federico González García, que leyeron cuidadosamente esta tesis y me ayudaron a poner en claro algunas ambigüedades y descubrir algunos errores que no había notado. A ustedes, mil gracias.*

*A mis amigos de la facultad, que siempre estuvieron conmigo en todo momento: Tomás, Rey, Mauricio, Enrique, Luis,... (son muchos por mencionar) y que siempre me apoyaron e impulsaron a seguir adelante. Gracias a todos por tener fe en mí, ah y gracias a René por el título, a ti te lo debo.*

*A ti meine schöne Appelöwin, que siempre me has ayudado en lo moral y has soportado mis tensiones que esta tesis y el trabajo me han dado. Gracias por haber estado y seguir a mi lado.*

*Ich danke meinen Freunden vom CELE, die immer in mir glaubten und bei mir in den besten und schlechten Situationen waren, ich danke ihnen für die schöne Momente in der Uni und aus der Uni und für ihre Zeit, die mir geschenkt hatten.*

*A la UNAM, en especial a la facultad de ciencias, por haberme formado y convertido en lo que ahora soy, y al instituto de física por haberme abrigado en sus instalaciones y permitirme hacer uso de ellas.*

*Al CONACyT, por haberme brindado el apoyo económico con el cual pude realizar este trabajo, en particular al Dr. Marcelo del Castillo, que de su proyecto salió tal apoyo.*

*A todos MIL GRACIAS*

## Hoja de Datos del Jurado

### *1. Alumno*

*Fernández Hernández Roberto Carlos*

*57 89 79 34*

*Universidad Nacional Autónoma de México*

*Facultad de Ciencias*

*Física*

*09712330-7*

### *2. Tutor*

*Dr. Jorge Alejandro Reyes Esqueda*

### *3. Sinodal 1*

*Dr. Carlos ignacio Mendoza Ruíz*

### *4. Sinodal 2*

*M. en C. María Sabina Ruíz Chavarría*

### *5. Sinodal 3*

*Dr. Gerardo Jorge Vázquez Fonseca*

### *6. Sinodal 4*

*Dr. Federico González García*

### *7. Tesis*

*Efecto Stark en la Punta de un Cantilever de un Microscopio de Fuerza Atómica*

*48 Páginas.*

*2007*

# Índice general

<i>0.1. Introducción</i> . . . . .	<i>II</i>
<b>1. Microscopía de Fuerza Atómica y Pozos de Potencial Infinito</b>	<b>1</b>
<i>1.1 El Microscopio de Fuerza Atómica</i> . . . . .	2
<i>1.2 El Pozo Cilíndrico.</i> . . . . .	6
<i>1.3 La Cuña o Rebanada de Pastel</i> . . . . .	9
<i>1.4 El Método Variacional y el Campo Eléctrico.</i> . . . . .	11
<b>2. El Electrón en la Punta de un Cantilever de forma Cónica-Esférica</b>	<b>16</b>
<i>2.1 El Pozo Esférico</i> . . . . .	17
<i>2.2 El Pozo Cónico-Esférico.</i> . . . . .	19
<i>2.3 El Campo Eléctrico y los Corrimientos de Energía (Efecto Stark).</i> . . . . .	23
<b>3. Cálculos y Análisis de los Resultados</b>	<b>25</b>
<i>3.1 Cálculos Preliminares</i> . . . . .	25
<i>3.2 Las Energías dentro del Pozo Cónico.</i> . . . . .	28
<i>3.3 El Campo Eléctrico y sus Efectos</i> . . . . .	29
<b>4. Conclusiones</b>	<b>39</b>
<b>A. Ortogonalización</b>	<b>41</b>
<b>B. Función Hipergeométrica</b>	<b>45</b>

# Resumen y Objetivo

En esta tesis se hizo un estudio sobre la influencia que tiene la aplicación de un campo eléctrico en las energías del estado base de un electrón que se encuentra confinado dentro de un pozo de potencial infinito de forma cónico-esférico, es decir, el resultado de limitar la coordenada angular cenital de un pozo esférico para obtener tal cono. Se calcularon las energías del estado base por medio de los métodos de la mecánica cuántica, para distintos valores del radio del cono, así como para distintos valores de la apertura angular cenital. Posteriormente, se calcularon los corrimientos de energía que sufre el electrón mediante un método variacional, debido a la influencia del campo eléctrico, aplicando éste último en la dirección del eje del pozo cónico-esférico, tanto hacia la parte puntiaguda del pozo como en sentido contrario, es decir, hacia el casquete esférico, para distintas magnitudes del campo.

Este estudio teórico tiene la finalidad de caracterizar una punta de un microscopio de fuerza atómica, para proponer una nueva forma de obtener imágenes mediante el corrimiento de energías que sufren los electrones que se encuentran en su interior al interactuar con la materia. La interacción es de carácter eléctrico, que puede ser tanto atractivo como repulsivo, dependiendo de la distancia a la cual se encuentre la punta del sustrato a observar.

Se concluye que el comportamiento de los corrimientos de las energías del electrón dentro del pozo cónico-esférico, se asemeja a las fuerzas que sufren punta y cantilever al interactuar con la materia en las distintas formas de obtener imágenes por medio de un microscopio de fuerza atómica.



## 0.1. Introducción

En los últimos años, el estudio de las propiedades de sistemas nanoestructurados ha sido de vital importancia en la búsqueda de nuevas aplicaciones tecnológicas. En especial, las propiedades ópticas y electrónicas en presencia de un campo eléctrico externo han sido ampliamente investigadas, tanto en el campo teórico como en el experimental. De tal manera que el estudio de las propiedades de tales estructuras es fundamental en el desarrollo de tecnología cada vez más eficiente, así como en la investigación y desarrollo en áreas de la física tales como el estado sólido y la mecánica cuántica.

Podemos decir que, además de entender los principios físicos asociados que rigen el comportamiento de las propiedades citadas de sistemas nanoestructurados, tales como pozos, alambres y puntos cuánticos, es de particular interés su aplicación tecnológica. Los pozos son estructuras de baja dimensionalidad en los cuales se confina el movimiento de una partícula dentro de una región comparable a la longitud de onda de De Broglie, que es la escala natural que rige los comportamientos cuánticos. Cuando el confinamiento se presenta en una dirección, dando libertad al movimiento en dos direcciones, se tiene un pozo cuántico bidimensional (2D). Ahora bien, si el confinamiento cuántico se presenta en dos direcciones, dejando sólo una dirección libre de movimiento, se trata de un alambre cuántico (1D). Si se restringe el movimiento en las tres direcciones, se genera un punto cuántico, es decir, un sistema cero dimensional (0D).

Como ejemplo de la aplicación tecnológica de estos sistemas, se puede citar el caso de los nanocristales semiconductores, donde un campo eléctrico externo es utilizado para el control de la transferencia de electrones en aparatos basados en puntos cuánticos, lo que permite controlar operaciones elementales con qubits en estos sistemas [1]. Otra aplicación que involucra un campo eléctrico es el mapeo de las funciones de onda electrónicas de puntos cuánticos en experimentos de microscopía de tunelaje [2].

Desde el punto de vista científico y tecnológico, es decir, de la aplicación de la ciencia fundamental y práctica, se ha dado una atención creciente a nuevas técnicas de detección que

emplean haces y puntas de cantilevers<sup>1</sup> micro y nanomecánicas. Sensores basados en cantilevers han llegado a ser comunes en sistemas micro y nanoelectromecánicos para detecciones en la escala picométrica[12]. Se está trabajando también en el desarrollo de modelos electromecánicos para transductores basados en un cantilever de resonancia lateral[13], biosensores basados en microcantileveres hechos de polímeros y una gama más amplia de aparatos de detección[14]. Muy recientemente, Qi Ye ha comenzado a fabricar a gran escala puntas de prueba de nanotubos de carbón para cantileveres de microscopios de fuerza atómica (AFM, atomic force microscope) [3] y Liwei Chen ha obtenido imágenes de nanocúmulos de oro y biomoléculas con este tipo de sondas AFM [4].

En esta tesis se estudia el confinamiento cuántico de un electrón en un pozo de potencial infinito de forma cónico-esférica, es decir, un cono que se extrae de una esfera como se muestra más adelante en esta tesis, específicamente en la sección 2.2, y se lleva a cabo un cálculo variacional para el estudio de la influencia de un campo eléctrico externo sobre la energía de estado base del electrón en la caja cuántica cónica como función de sus parámetros geométricos (radio, abertura angular cenital y azimutal), así como en función de la dirección y magnitud del campo eléctrico. Éste se aplica a lo largo del eje del cono desde la parte angosta hacia la parte ancha y viceversa, además de que se hace la suposición de que la constante dieléctrica es la misma que la del medio en el cual se encuentra inmerso. Esto simula una punta de un AFM en interacción con un sustrato al cual se le desea medir ciertas propiedades y obtener una imagen, suponiendo la interacción de carácter eléctrico y sin tomar en cuenta los efectos sobre el cantilever.

Por tanto, buscando un desarrollo tecnológico a partir de una investigación científica para un microscopio de fuerza atómica, se propone en esta tesis una nueva forma de realizar observaciones y mediciones de acuerdo a distintos efectos que se presentan sobre la punta del microscopio al interactuar con el sustrato a observar. Se propone un nuevo modo de

---

<sup>1</sup>Ante la falta de una traducción adecuada, podemos decir que el **cantilever** es aquella pieza que sobresale de un soporte, con la propiedad de ser flexible. Lleva en un extremo alguna carga, la punta, y puede reflejar un haz de luz en su cara anterior, en el caso de un microscopio de fuerza atómica.

funcionamiento, el cual ya no depende de elementos ópticos, es decir, el nivel óptico de los AFM's usuales que consta de un laser y fotodiodos, sino un método de corrimientos de energías de los electrones dentro de la punta del cantilever, reduciendo con esto los materiales, piezas y costos de fabricación de estos aparatos. La simplificación nos ayuda a obtener sistemas cada vez más sencillos tratando a la vez de aumentar su sensibilidad haciendo más eficientes los aparatos de detección.

La tesis se estructura de la siguiente manera: En el Capítulo 1 se inicia con la explicación del funcionamiento y una descripción de los elementos del AFM, para después plantear el nuevo modo de uso que se propone. Se muestran los conceptos necesarios de la mecánica cuántica que se emplearán para encontrar la solución del problema central de este trabajo. Se hace una breve revisión de confinamientos simples de partículas en pozos de potencial infinitos en sistemas coordenados diversos y con condiciones distintas, los cuales pueden ser usados como modelos de puntas. Se hace especial énfasis en la solución de la *rebanada de pastel ó cuña*, antecesora de este trabajo [5]. Al final de este capítulo, se presenta la teoría del método variacional y se analiza el efecto del campo eléctrico aplicado a la cuña.

En el segundo capítulo se desarrolla el problema fundamental de esta tesis; sin embargo, se inicia con la resolución del pozo esférico como objeto de comparación y como herramienta para pasar a la solución del pozo de potencial infinito de forma cónica y los efectos de la aplicación de un campo eléctrico por medio de la ecuación de Schrödinger. Se encuentran primeramente las eigenfunciones y las energías para una partícula dentro del pozo de paredes rígidas e infinitas. Luego, por medio de un cálculo variacional se calcula el corrimiento de energía del estado base (efecto Stark) debido a la influencia del campo externo.

En el tercer capítulo se presentan los cálculos computacionales y un análisis de los resultados obtenidos en base a los cálculos teóricos del capítulo anterior y finalmente, en el capítulo 4, se presentan las conclusiones obtenidas de este trabajo.

# Capítulo 1

## Microscopía de Fuerza Atómica y Pozos de Potencial Infinito

En este capítulo se explica de manera detallada los modos ó tipos de funcionamiento de un microscopio de fuerza atómica (AFM) y los elementos que lo componen. Se propone también el nuevo modo de funcionamiento del AFM. De igual manera, se recopilan algunos sistemas de confinamiento cuántico de electrones en pozos de potencial de paredes rígidas e infinitas. Las propiedades de los electrones en éstos, ilustran los conceptos necesarios para la resolución del problema fundamental de esta tesis. Una de las razones del uso de estos pozos es que tienen la ventaja de poseer soluciones analíticas, además de que su función de onda es real [6], [7], [10].

Se toma un especial interés en el modelo de la rebanada de pastel o cuña, la cual se resuelve en la 3ra. sección de este capítulo, ya que posee propiedades geométricas similares al problema a resolverse en el capítulo 2. Las energías del pozo cilíndrico y de la cuña, tienen expresiones muy semejantes, no obstante, en su interpretación son muy diferentes, ya que un solo parámetro es el que marca la diferencia en sus geometrías como se mostrará más adelante.

## 1.1. El Microscopio de Fuerza Atómica

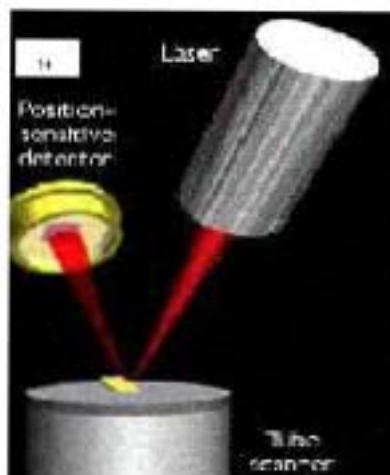


Figura 1.1: Principio del AFM

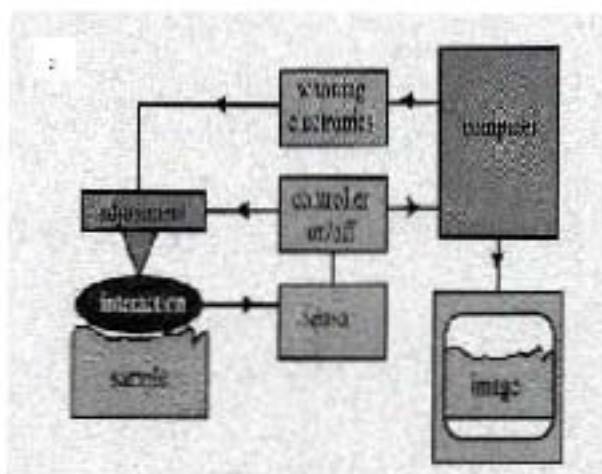


Figura 1.2: Diagrama del AFM

El microscopio de fuerza atómica (atomic force microscope, AFM por sus siglas en inglés) es un tipo de microscopio que proviene de una familia de microscopios de barrido (scanning probe microscopes), los cuales poseen ventajas significativas como herramienta de observación en comparación con otras técnicas tales como la microscopía electrónica, ya que no sólo logran una resolución a nivel molecular, sino que también se pueden emplear en presencia de fluidos, obteniendo imágenes de muestras en condiciones casi originales, es decir, como se encuentran en la naturaleza. El fluido se puede intercambiar mientras se capta la imagen, permitiendo de esta manera la observación en tiempo real de algún sustrato que de otra manera no puede ser posible con el uso de la microscopía electrónica. El instrumento también es capaz de manipular moléculas y medir las fuerzas de interacción entre éstas con una sensibilidad de piconewtons.

El modo de operación de un AFM es el siguiente: una punta que se encuentra unida a un cantilever barre la superficie del sustrato a observar, la deflexión horizontal y vertical que sufre el cantilever por la interacción con el sustrato es del orden de picómetros, distancias que mide por medio de un nivel óptico (Figura 1.1). El nivel óptico posee un laser, el cual, dirige

un haz de luz en la cara anterior del cantilever. Éste último es reflejado y detectado por un fotodetector sensible a la posición de este haz. La deflexión angular del cantilever causa una deflexión angular dos veces mayor del haz reflejado, el cual llega al fotodetector compuesto por un cuadrado de cuatro fotodiodos. La diferencia entre las señales de los fotodiodos indica las deflexiones que sufre el cantilever al barrer el sustrato, con lo que se puede obtener una imagen que representa la forma tridimensional de este último (deflection image).

El barrido se lleva a cabo gracias a la acción de un **caminante** (walker) que se compone de tres piezotubos y la modulación de la distancia entre sustrato y cantilever por medio de otros dos piezotubos (Figura 1.2). Las cerámicas piezoeléctricas son materiales que se expanden o contraen en presencia de un gradiente de voltaje, o de manera inversa, crean un voltaje gradiente cuando se fuerzan a contraerse o expandirse, por lo que se emplean para crear aparatos de posicionamiento de alta precisión. Además, el AFM no sólo puede medir la fuerza sobre el sustrato, sino también regularla, lo que permite la adquisición de imágenes a fuerzas pequeñas. Para esto es necesario un sistema de retroalimentación que trata de mantener la deflexión del cantilever constante, variando el voltaje aplicado a los piezotubos del sistema de barrido, controlando de esta manera las fuerzas entre cantilever y sustrato. Mientras más rápida sea la corrección en deflexión del cantilever, la imagen se obtiene de una manera más rápida, es por esto que un buen sistema de retroalimentación es necesario.

La detección de las fuerzas locales entre cantilever y sustrato tienen que ver con la deflexión de acuerdo a la ley de Hooke:

$$\Delta z = \frac{\Delta F}{K_c}, \quad (1,1,1)$$

en donde la deflexión  $\Delta z$  es determinada por la fuerza actuante  $\Delta F$  y la constante de resorte  $K_c$ . La frecuencia de resonancia de un resorte con constante  $K_c$  y masa efectiva  $m$  está dada por:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{K_c}{m}}. \quad (1,1,2)$$

Para una mejor detección es necesaria una constante de resorte pequeña, que se ve reflejada en un máximo de sensibilidad de las fuerzas. Esto se contradice por los siguientes factores:

la constante debe ser máxima para tener una máxima frecuencia de resonancia, minimizar vibraciones y máximo índice de muestreo. Por otro lado, la sensibilidad al medir la fuerza se limita por la excitación térmica, y si el cantilever está sujeto a fuerzas atractivas de largo alcance (de van der Waals), su posición se desestabiliza si la magnitud del gradiente de la fuerza es igual a la constante de resorte del cantilever, lo que implica que debemos tener una mínima constante de resorte para poder acercarnos al sustrato lo suficiente sin llegar a tocarlo. Los cantilevers comerciales poseen constantes en el rango  $10^{-2}N/m \leq K_c \leq 10^2N/m$ , con frecuencias de resonancia  $1Khz \leq \omega_0 \leq 500KHz$ , los cuales están calibrados para la corrección de estos fenómenos.

La resolución también depende de la fineza de la punta, ya que normalmente tiene una curvatura con un radio de unos pocos nanómetros. Así que en la combinación de interacción punta-muestra, este radio limita generalmente la resolución del AFM, por lo que el desarrollo de puntas más finas es de gran importancia.

Como hemos visto anteriormente, al barrer la muestra con la punta, el cantilever sufre deflexiones que se traducen en la definición de la forma superficial de la muestra. Esto se hace, en general, de dos maneras distintas: el barrido en el régimen de contacto con el sustrato y en el régimen de no contacto. Las siguientes gráficas muestran las fuerzas que sufre el cantilever a distintas distancias entre éste y la muestra.

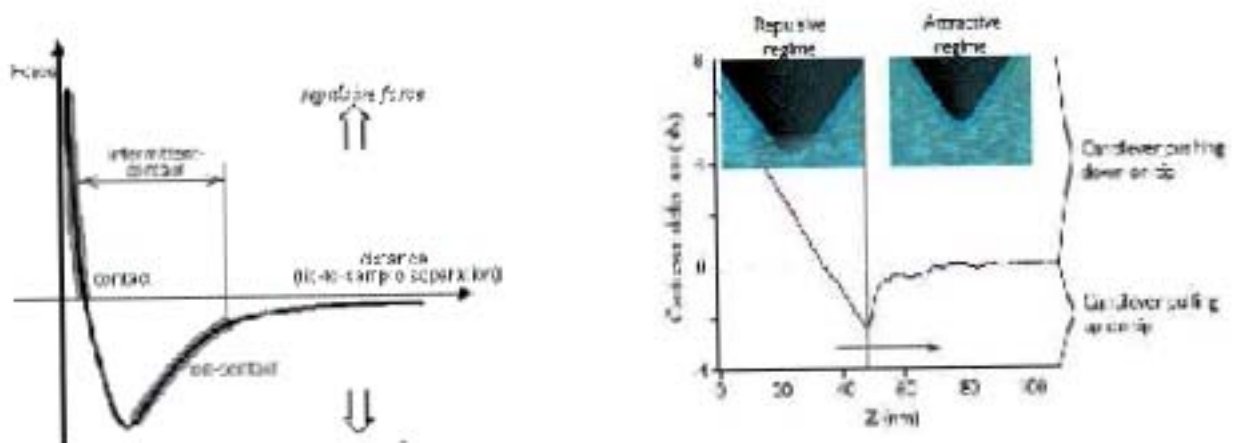


Figura 1.3: Fuerzas en el AFM

En el lado derecho de la curva, los átomos de la muestra y de la punta se encuentran bastante separados. Al irse acercando, se presenta una fuerza de atracción debida a fuerzas de van der Waals de largo alcance. Aquí es donde funciona el régimen de no contacto. Esta atracción se incrementa hasta que las nubes electrónicas de los átomos comienzan a repelerse electrostáticamente. La fuerza se hace cero a una distancia de unos pocos angstroms. Cuando la fuerza de interacción es positiva (repulsiva), los átomos están en contacto, lo que ocasiona las deflexiones del cantilever en el régimen de contacto (lado izquierdo de la curva). En el régimen de contacto, la punta toca suavemente al sustrato, causando la deflexión del cantilever al ajustarse a los cambios de la topografía del sustrato. Si este es demasiado suave, puede ocurrir que las fuerzas ejercidas por la punta lo deformen. La solución a este problema es el modo **tapping** (repique) del AFM. En el régimen de no contacto, la punta se mantiene a una distancia de unos pocos angstroms de la superficie y la interacción entre punta y sustrato es atractiva, debido a las fuerzas de van der Waals de largo alcance. El modo tapping combina estos dos tipos de barrido al hacer vibrar el cantilever mediante una señal oscilatoria. La ventaja radica en que se entra en contacto periódicamente con la muestra, evitando errores de medición debidos a la presencia de agua condensada, que en el modo de no contacto se presentarían dando una imagen errónea, y evitando dañar la topografía de la muestra, como suele suceder al usar puramente el modo de contacto.

Lo que se propone en esta tesis es estudiar el efecto de las fuerzas eléctricas que se presentan entre sustrato y punta, suponiendo que la interacción entre estos es de carácter puramente eléctrico, es decir, no se toman en cuenta otro tipo de interacciones. Estas fuerzas provocarían corrimientos en los niveles de energía de los electrones que se encuentran dentro de la punta, los cuales pueden provocar corrientes eléctricas que, por medio de amplificadores operacionales conectados directamente al cantilever y la punta, podrían proporcionar la misma información que el nivel óptico sobre la topografía de la muestra. De esta manera se tendría un modo alternativo de funcionamiento del AFM, lo que reduciría el número de piezas necesarias y su complejidad.



## 1.2. El Pozo Cilíndrico

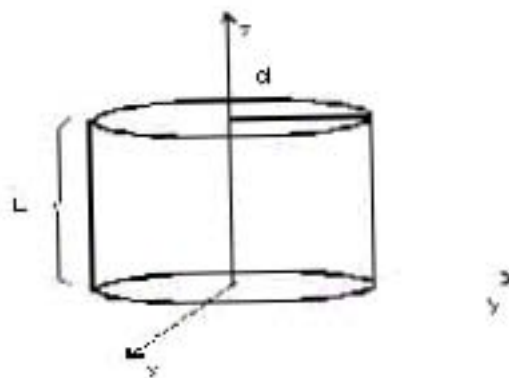


Figura 1.4: El Pozo Cilíndrico

Consideremos una partícula de masa  $\mathbf{m}$  confinada a moverse dentro de un cilindro circular recto de radio  $\mathbf{d}$  y altura  $\mathbf{L}$  (Figura 1.4). El potencial para este caso, expresado en coordenadas cilíndricas es el siguiente:

$$V(r, \theta, z) = \begin{cases} 0, & r < d, 0 < z < L, \\ \infty, & \text{en cualquier otra parte.} \end{cases} \quad (1,2,1)$$

El movimiento de la partícula queda descrito por una función de onda que satisface la ecuación de Schrödinger estacionaria:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi = -\frac{\hbar^2}{2\mathbf{m}}\nabla^2\Psi, \quad (1,2,2)$$

Por lo que dentro del pozo, expresando el hamiltoniano en coordenadas cilíndricas, se tiene la ecuación de Schrödinger siguiente:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} + K^2\Psi = 0; \quad (1,2,3)$$

en donde

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2\mathbf{m}}, \quad (1,2,4)$$

Para la resolución de esta ecuación, utilizamos el método de separación de variables, de donde se propone que  $\Psi(r, \theta, z) = R(r)\Theta(\theta)Z(z)$ . Por lo que la ecuación (1.2.3) se convierte en

$$\frac{1}{R} \left( \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \Theta(\theta)} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \theta^2} + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + K^2 = 0; \quad (1,2,5)$$

De aquí se sigue que

$$\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -k_z^2, \quad (1,2,6)$$

$$\frac{1}{\Theta} \frac{d^2 \Theta}{d\theta^2} = -m'^2, \quad (1,2,7)$$

$$r \frac{d}{dr} \left( r \frac{dR(r)}{dr} \right) + (\gamma^2 r^2 - m'^2) R(r) = 0, \quad (1,2,8)$$

en donde  $\gamma^2 = K^2 - k_z^2$ ,  $k_z^2$  y  $m'^2$  son constantes de separación y  $K^2$  viene de la ecuación (1.2.4).

De acuerdo a las condiciones a la frontera  $\Psi(r, \theta, z = 0) = \Psi(r, \theta, z = L) = 0$  y  $\Psi(r, \theta, z) = \Psi(r, \theta + 2\pi, z)$ , es necesario que las soluciones de las ecuaciones (1.2.6) y (1.2.7) sean de la forma  $Z(z) = A \sin k_z z$ ,  $k_z = n_z \frac{\pi}{L}$ ,  $n_z = 1, 2, \dots$  y  $\Theta(\theta) = B \exp im'\theta$ , respectivamente, donde  $m' = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , con  $A$  y  $B$  constantes. En la ecuación (1.2.8), haciendo el cambio de variable  $\rho = \gamma r$  obtenemos la ecuación de **Bessel**:

$$\rho^2 R'' + \rho R' + (\rho^2 - m'^2) R = 0, \quad (1,2,9)$$

cuyas soluciones son  $R(\rho) = C_1 J_{m'}(\rho) + C_2 N_{m'}(\rho)$ , con  $C_1$  y  $C_2$  constantes. Las funciones  $J_{m'}(\rho)$  y  $N_{m'}(\rho)$  son llamadas funciones de Bessel y de Neumann de primera clase, respectivamente. Debido a que las funciones de Neumann divergen en  $\rho = 0$ ,  $C_2$  debe ser igual a cero para satisfacer las condiciones a la frontera. Por lo tanto, las soluciones físicamente aceptables son las funciones  $J_{m'}(\rho)$ .

De acuerdo a la condición a la frontera  $R(r = d) = 0 = C_1 J_{m'}(d\gamma)$ , la función  $J_{m'}(d\gamma)$  debe ser igual a cero. Sea  $\nu_{m'n}$  el n-ésimo cero finito de la función de Bessel de orden  $m'$ ,

de tal forma que  $J_{m'}(d\gamma_{m'n}) = J_{m'}(\nu_{m'n}) = 0$ , satisface la última condición a la frontera con  $d\gamma_{m'n} = \nu_{m'n}$ .

La ecuación de las energías propias del sistema, de acuerdo a las condiciones anteriormente dadas, queda como sigue:

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2\mathbf{m}} = \frac{\hbar^2}{2\mathbf{m}}(\gamma^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2\mathbf{m}}\left[\gamma^2 + \left(\frac{n_z\pi}{L}\right)^2\right]. \quad (1,2,10)$$

Insertando en la ecuación anterior la condición  $d\gamma_{m'n} = \nu_{m'n}$ , ésta finalmente se reescribe como:

$$E_{m'nn_z} = \frac{\hbar^2}{2\mathbf{m}}\left[\left(\frac{\nu_{m'n}}{d}\right)^2 + \left(\frac{n_z\pi}{L}\right)^2\right]. \quad (1,2,11)$$

Las funciones propias de este sistema cuántico están dadas por:

$$\Psi_{m'nn_z}(r, \theta, z) = N J_{m'}\left(\frac{r\nu_{m'n}}{d}\right) \sin\left(\frac{\pi n_z z}{L}\right) \exp im'\theta, \quad (1,2,12)$$

en donde  $N$  es una constante de normalización de la función propia y los parámetros de cuantización son números enteros tales que  $m' \geq 0$ ,  $n > 0$  y  $n_z \geq 1$ . Cabe destacar esta propiedad de los parámetros de cuantización, ya que el hecho de ser enteros indican ciertas propiedades geométricas del pozo cuántico.

Para el estado base de este sistema, la energía y la eigenfunción están dadas por:

$$E_B = \frac{\hbar^2}{2\mathbf{m}}\left[\frac{(2,40)^2}{d^2} + \frac{\pi^2}{L^2}\right], \quad (1,2,13)$$

$$\Psi_B(r, \theta, z) = N J_0\left(\frac{(2,40)r}{d}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right), \quad (1,2,14)$$

respectivamente, donde  $\nu_{0,1} = 2,40$  es el primer cero de la función de Bessel  $J_0$ . Como se observa, el estado base tiene energía positiva dentro de la caja cilíndrica o pozo de potencial cilíndrico de paredes infinitas.

Las condiciones de ortogonalidad que deben cumplir las componentes de la función de onda encontrada en esta sección, se dan en el apéndice A.

### 1.3. La Cuña o Rebanada de Pastel

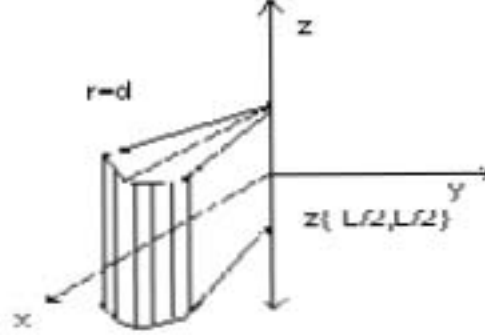


Figura 1.5: El Pozo en forma de Cuña

Para el pozo cuántico en forma de cuña o de rebanada de pastel, se utiliza un sistema coordenado polar cilíndrico al igual que para el primer pozo de esta sección, solamente que ahora hay una restricción en la parte angular por un ángulo  $\theta_0$  que nos da la abertura de la cuña o rebanada (figura 1.5), por lo que el potencial se transforma de la siguiente manera

$$V(r, \theta, z) = \begin{cases} 0, & r < d, -\frac{\theta_0}{2} \leq \theta \leq \frac{\theta_0}{2}, \frac{L}{2} < z < \frac{L}{2}, \\ \infty, & \text{en cualquier otra parte.} \end{cases} \quad (1,3,1)$$

Al solucionar este problema hacemos uso de las ecuaciones (1.2.2) a (1.2.9), sólo que ahora la restricción de movimiento de la partícula  $-\frac{\theta_0}{2} \leq \theta \leq \frac{\theta_0}{2}$ , cambia la condición a la frontera en la ecuación (1.2.7). En este caso se tiene que  $\Psi(r, \theta = \theta_0, z) = 0$ , por lo que la solución es ahora

$$A \cos\left(\frac{m' \pi}{\theta_0} \theta\right), \quad (1,3,2)$$

con  $m' = m\left(\frac{\pi}{\theta_0}\right) = (2n_\theta + 1)\left(\frac{\pi}{\theta_0}\right)$ , en donde  $n_\theta = 0, 1, 2, \dots$ . De aquí se puede observar la diferencia entre el pozo de la sección 1.2 y éste. En el pozo inicial la  $m'$  acepta valores enteros, a diferencia de este caso, ya que ahora  $m'$  acepta valores reales debido a su relación con la abertura angular  $\theta_0$ , que puede tener cualquier valor real entre 0 y  $2\pi$ .

De acuerdo a la condición a la frontera  $\Psi(r, \theta, z = \frac{-L}{2}) = \Psi(r, \theta, z = \frac{L}{2}) = 0$ , la solución de la ecuación (1.2.6) toma la forma

$$B \cos(k_z z), \quad (1,3,3)$$

donde  $k_z = \frac{l\pi}{L}$ , con  $l = 2n_z + 1$  y  $n_z = 0, 1, 2, \dots$ . Se puede observar que el carácter entero de  $l$  se conserva en comparación con  $m'$  de la solución anterior.

La solución radial la obtenemos a partir de la ecuación (1.2.9) retomando el cambio de variable, cuyas soluciones son  $R(\rho) = C_1 J_{m'}(\rho) + C_2 N_{m'}(\rho)$ . Debido al carácter no entero de  $m'$ , denotamos ésta por  $\mu$  para evitar confusiones, por lo que nuestra solución es  $R(\rho) = C_1 J_\mu(\rho)$ , en donde hemos desechado la función de Neumann por su carácter divergente en  $\rho = 0$ . Por la condición a la frontera  $R(\rho = d) = 0 = C_1 J_\mu(dK)$ , se tiene que  $J_\mu(dK_{\mu n}) = J_\mu(\nu_{\mu n}) = 0$ , siendo  $\nu_{\mu n}$  el cero de la función de Bessel, por lo que la solución radial es  $R(kr) = C_1 J_\mu(\frac{\nu_{\mu n}}{d} r)$ .

Las eigenfunciones y eigenenergías de la rebanada de pastel quedan entonces como

$$\Psi_{mnl}(r, \theta, z) = \mathbf{N} J_\mu(\frac{\nu_{\mu n}}{d} r) \cos(\mu\theta) \cos(\frac{l\pi}{L} z), \quad (1,3,4)$$

$$E_{mnl} = \frac{\hbar^2}{2\mathbf{m}} \left[ \left( \frac{\nu_{\mu n}}{d} \right)^2 + \left( \frac{l\pi}{L} \right)^2 \right], \quad (1,3,5)$$

con  $\mu = m \frac{\pi}{\theta_0}$  y  $\mathbf{N}$  una constante de normalización. En el estado base, los subíndices toman los siguientes valores:  $n=m=l=1$ , entonces la energía del estado base tiene la siguiente expresión

$$E_{111} = \frac{\hbar^2}{2\mathbf{m}} \left[ \left( \frac{\nu_{\mu_0 1}}{d} \right)^2 + \left( \frac{\pi}{L} \right)^2 \right], \quad (1,3,6)$$

en donde  $\mu_0 = \frac{\pi}{\theta_0}$ , y la eigenfunción del estado base queda como

$$\Psi_0(r, \theta, z) = \mathbf{N}_0 J_{\mu_0}(\frac{\nu_{\mu_0 1}}{d} r) \cos\left(\frac{\pi}{\theta_0} \theta\right) \cos\left(\frac{\pi}{L} z\right), \quad (1,3,7)$$

Evidentemente,  $\Psi_0(r, \theta, z) = 0$  fuera de la rebanada y  $\mathbf{N}_0$  es la constante de normalización del estado base. Comparando con la sección 1.2, podemos ver la diferencia entre poseer parámetros enteros y parámetros reales. El parámetro real indica en este caso la abertura

de la cuña. Al aumentar éste, la cuña se vuelve más angosta, en tanto que al disminuir, la rebanada tiende al cilindro a medida que  $\mu \rightarrow \frac{m}{2} = \frac{(2n_0+1)}{2}$ .

Este pozo puede simular la punta del cantilever de un AFM como primera aproximación, suponiendo que se trata de un pozo de potencial infinito y constantes dieléctricas iguales dentro y fuera de la punta, y que la interacción con la materia a analizar es de carácter eléctrico (figura 1.6). Debido a esta última suposición, se debe calcular la influencia de un campo eléctrico sobre las energías encontradas, es decir, el efecto Stark [6], [7]. Esto se puede hacer por medio de un **Método Variacional**, cuya descripción se encuentra en la siguiente sección.

## 1.4. El Método Variacional y el Campo Eléctrico

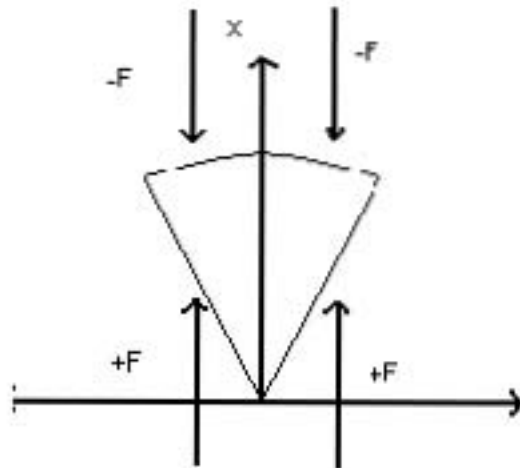


Figura 1.6: El Campo Eléctrico Aplicado

Al suponer que la interacción entre la punta y el sustrato a analizar es de tipo puramente eléctrico, es necesario estudiar los efectos que produce el campo eléctrico a los niveles de energías de los electrones en la cuña. En 1913, Johannes Stark observó que las líneas de la

serie de Balmer en el átomo de hidrógeno se separan en varias componentes en presencia de un campo eléctrico uniforme, es decir, experimentan un corrimiento en energía. Sus experimentos probaron que el efecto del campo eléctrico aplicado al átomo de Hidrógeno y a otros átomos, depende de la magnitud de éste. Desde entonces este fenómeno se conoce como **efecto Stark**.

Para estudiar este efecto en la punta del cantilever, hacemos uso de un **método variacional**. Lord Rayleigh demostró mediante un principio variacional que la frecuencia fundamental de oscilación de un sistema clásico es un mínimo, donde pequeñas variaciones de las amplitudes de oscilación respecto de sus valores para el modo fundamental producen cambios en la frecuencia dada una energía. Este principio fue generalizado más tarde por W. Ritz, quien propuso un método variacional para resolver aproximadamente una ecuación de eigenvalores. El método es el siguiente:

Sean  $\hat{H}$  el hamiltoniano a estudiar y  $\Psi_k$  la eigenfunción que corresponde al eigenvalor  $E_k$

$$\hat{H}\Psi_k = E_k\Psi_k, \quad (1,4,1)$$

donde  $k$  es tal que la energía crece con él, es decir,  $E_k > E_{k'}$  para  $k > k'$ , donde  $k = 0$  corresponde al estado base con energía  $E_0$ . Sea  $\Phi$  una función arbitraria normalizada a la unidad tal que

$$\Phi = \sum_k a_k \psi_k, \quad (1,4,2)$$

donde, de acuerdo a la normalización de  $\Phi$ , se cumple

$$\sum_k |a_k|^2 = 1. \quad (1,4,3)$$

Del valor esperado de  $\hat{H}$  calculado con la función arbitraria  $\Phi$ , obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle &= \sum_{m,n} a_m^* a_n \int \Psi_m^* \hat{H} \Psi_n dx = \sum_{m,n} a_m^* a_n E_n \delta_{mn} \\ &= \sum_n |a_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |a_n|^2, \end{aligned} \quad (1,4,4)$$

en donde se toma en cuenta que  $E_k \geq E_0$ , por lo que se tiene que

$$\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle \geq E_0. \quad (1,4,5)$$

Esto significa que cualquier estado  $\Psi$ , el cual difiere del estado base  $\Psi_0$ , tiene una energía mayor que  $\Psi_0$ . Este resultado puede ser escrito en la forma

$$E_0 = \min_{\Psi \in H} \left[ \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right]. \quad (1,4,6)$$

La expresión entre *brackets* es estacionaria, y del cálculo de variaciones sabemos que ésta es una condición necesaria para encontrar un extremo(mínimo)

$$\delta E \equiv \delta \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0, \quad (1,4,7)$$

Usando la regla de diferenciación del cociente de dos funciones, se sigue que

$$\frac{(\delta \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle) \langle \Psi | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle (\delta \langle \Psi | \Psi \rangle)}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} = 0, \quad (1,4,8)$$

en donde es suficiente que el numerador se anule. Como  $\Psi$  es una función compleja en general, podemos tomar a  $\Psi$  y  $\Psi^*$  como dos funciones independientes. Y como en el caso del principio de Hamilton en mecánica, se encuentra

$$\frac{\delta}{\delta \Psi^*(r)} \int d^3r \Psi^* (\hat{H} \Psi) = \hat{H} \Psi(r), \quad (1,4,9a)$$

$$\frac{\delta}{\delta \Psi^*(r)} \int d^3r \Psi^* \Psi = \Psi(r). \quad (1,4,9b)$$

Con ayuda de la ecuación (1.4.8), obtenemos entonces una ecuación de eigenvalores para  $\Psi$

$$\langle \Psi | \Psi \rangle \hat{H} \Psi(r) - \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \Psi(r) = 0$$

ó

$$\hat{H} \psi(r) = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \Psi(r) \equiv E \Psi(r), \quad (1,4,10)$$

la cual es exáctamente la ecuación de Schrödinger.

El método de Ritz se utiliza para muchos propósitos procediendo de la siguiente manera: la función de *prueba*  $\Psi(r, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$  se construye tal que dependa de los parámetros  $\alpha_i$ . Entonces buscamos el mínimo de  $E(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$  de acuerdo a la ecuación (1.4.7)

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_i} (E(\alpha_1, \dots, \alpha_n)) = 0. \quad (1,4,11)$$



De esta manera, tenemos una aproximación para las energías en el estado base para un sistema que cumple con una ecuación de eigenvalores como la ecuación (1.4.1).

En el caso de la cuña y el cono de la siguiente sección, el hamiltoniano se transforma de acuerdo al sistema coordenado y dirección en que se aplica el campo eléctrico. En el caso de coordenadas cilíndricas quedaría de la siguiente manera

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2\mathbf{m}} \pm |e|Frcos\theta + V_c, \quad (1,4,12)$$

donde  $F$  es la magnitud del campo eléctrico,  $\mathbf{m}$  y  $|e|$  la masa y carga efectivas del electrón, respectivamente;  $rcos\theta$  la dirección en que se aplica el campo y  $V_c$  el potencial de confinamiento usando el modelo del pozo infinito. Al aplicarse el campo, usamos como función de prueba variacional la función de estado base del sistema sin campo en el caso respectivo. Para la cuña, usamos la función de la ecuación (1.3.7), multiplicada por un factor exponencial, el cual posee el parámetro variacional para el estudio del efecto Stark, por lo que nuestra función queda como

$$\Psi(r, \theta, z) = \Psi_0 exp(\mp\beta rcos\theta), \quad (1,4,13)$$

y  $\beta$  es el parámetro variacional que depende del campo  $F$ . Para el caso de electrones, el signo  $-$  corresponde a un campo eléctrico en la dirección positiva del eje  $x$ , de acuerdo a la figura 1.6 y el signo  $+$  corresponde a la dirección opuesta. El cálculo de la energía de estado base se hace por medio de las ecuaciones (1.4.6) y (1.4.7) minimizando

$$E(\beta) = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_{-\frac{\theta_0}{2}}^{\frac{\theta_0}{2}} \int_0^d \Psi^* \hat{H} \Psi r dr d\theta dz, \quad (1,4,14)$$

con respecto a  $\beta$ , y entonces definimos el corrimiento Stark como

$$\Delta E = E(\beta) - E_{111}, \quad (1,4,15)$$

donde  $E_{111}$  viene de la ecuación (1.3.6). Los cálculos numéricos y resultados de este problema se encuentran con detalle en la referencia [5]. Lo que nos concierne en esta tesis es el uso de este método para analizar los efectos de la aplicación del campo eléctrico en los niveles de

energía de los electrones que se encuentran dentro de la punta de forma cónica-esférica, la cual es una aproximación más real de la punta de un cantilever de un microscopio de fuerza atómica (AFM). El estudio y análisis correspondientes se mostrarán en el siguiente capítulo, específicamente en la sección 2.2 y los cálculos y resultados de tal análisis se presentarán a lo largo del capítulo 3.

## Capítulo 2

# El Electrón en la Punta de un Cantilever de forma Cónica-Esférica

Este capítulo se inicia con la resolución y el cálculo de las energías de un electrón dentro de un pozo esférico infinito, sólo como medio de comparación de los parámetros, como se efectuó con el pozo cilíndrico y la rebanada de pastel. Lo que nos concierne es la resolución y cálculo de las energías del electrón dentro del pozo cónico-esférico, el cual se utiliza como la simulación de la punta.

Para este estudio se considera un electrón en un pozo infinito de potencial de forma cónico-esférico, con  $\varepsilon = \varepsilon_0$ , la misma constante dieléctrica dentro y fuera de la punta, suponiendo que la punta del cantilever posee esta geometría, además de que los efectos de atracción y repulsión sobre la punta se deben a fuerzas electrostáticas entre ésta y el sustrato a analizar. Se supone por último un campo eléctrico homogéneo aplicado a lo largo del eje  $Z$  del cono. El estudio de los efectos de la aplicación del campo eléctrico se hace por medio del Método Variacional visto al final del capítulo anterior. Cualquier otro tipo de interacción queda descartado, como las fuerzas de capilaridad, por ejemplo. No obstante se deja el problema abierto para el análisis de los efectos aquí no tomados en cuenta y que, sin embargo, son de gran importancia debido a su influencia durante una medición real.

## 2.1. El Pozo Esférico

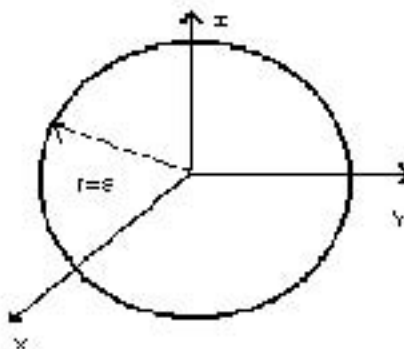


Figura 2.1: El Pozo Esférico

Al igual que en el capítulo anterior, confinamos la partícula en un pozo infinito, sólo que en esta ocasión es de forma esférica de radio  $a$ , por lo que el potencial se escribe como:

$$V(r, \theta, \phi) = \begin{cases} 0, & r < a, \\ \infty, & \text{en cualquier otra parte.} \end{cases} \quad (2,1,1)$$

El comportamiento de la partícula descrito por la función de onda  $\Psi(r, \theta, \phi)$  cumple con la ecuación (1.2.1). Dentro del pozo, expresando el gradiente en coordenadas esféricas se obtiene la ecuación de Schödinger:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r^2} \left( \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} + \alpha^2 \Psi = 0, \quad (2,1,2)$$

en donde  $\alpha$  se relaciona con la energía por medio de

$$E = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}. \quad (2,1,3)$$

Esta ecuación es resuelta una vez más por el método de separación de variables, en donde la función de onda será  $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ . Introduciéndola en (2.1.2) y desarrollando obtenemos las ecuaciones:

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + k^2 \Phi = 0, \quad (2,1,4)$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left( l(l+1) - \frac{k^2}{\sin^2\theta} \right) \Theta = 0, \quad (2,1,5)$$

$$r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + 2r \frac{dR}{dr} + \left( \alpha^2 r^2 - l(l+1) \right) R = 0. \quad (2,1,6)$$

La ecuación (2.1.4) corresponde a la ecuación de eigenvalores del cuadrado de la componente  $z$  del momento angular orbital del electrón, cuyos eigenvalores están cuantizados a causa de la condición de unicidad de los valores de la eigenfunción

$$\Phi(\phi) = \frac{\exp ik\phi}{\sqrt{2\pi}}, \quad (2,1,7)$$

con  $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , cuando la variable angular azimutal,  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ , cambia por un entero múltiplo de  $2\pi$ . La ecuación (2.1.5) corresponde a la ecuación de eigenvalores del cuadrado del momento angular orbital del electrón. Cambiando de variable en esta ecuación por  $x = \cos\theta$ , al desarrollar se obtiene la ecuación

$$(1-x^2) \frac{d^2 P}{dx^2} - 2x \frac{dP}{dx} + \left( l(l+1) - \frac{k^2}{(1-x^2)} \right) P = 0, \quad (2,1,8)$$

la cual es la llamada ecuación asociada de Legendre, cuyas soluciones son los polinomios  $P_l^k(x) = (1-x^2)^{\frac{k}{2}} \frac{d^k P_l(x)}{dx^k}$ , en donde  $P_l(x)$  es un *polinomio asociado de Legendre* y  $l$  acepta valores  $l = 0, 1, 2, \dots$ . En conjunto, las soluciones de las ecuaciones (2.1.4) y (2.1.8) son muy comunes en muchas ramas de la física y son llamadas **armónicos esféricos**, cuya notación universal es  $Y_l^k(\theta, \phi) = \frac{\exp ik\phi}{\sqrt{2\pi}} P_l^k(\cos\theta)$ . Cabe destacar que tanto el subíndice como el superíndice son enteros.

Si en la ecuación (2.1.6) hacemos el cambio  $R(\alpha r) = \frac{j(\alpha r)}{\sqrt{\alpha r}}$ , ésta se transforma en

$$r^2 \frac{d^2 j}{dr^2} + r \frac{dj}{dr} + \left( \alpha^2 r^2 - \left( l + \frac{1}{2} \right)^2 \right) j = 0, \quad (2,1,9)$$

que se conoce como ecuación esférica de Bessel con soluciones  $D_1 j_l(\alpha r) + D_2 n_l(\alpha r)$ . Las funciones esféricas de Bessel se relacionan con las funciones cilíndricas por  $j_l(\alpha r) = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha r}} J_{l+\frac{1}{2}}(\alpha r)$ , con  $l$  entero. Al igual que las soluciones  $N_l(\rho)$  de la sección anterior divergen, las soluciones

esféricas  $n_l(\alpha r)$  también divergen en  $r = 0$ , por lo que las soluciones físicamente aceptables son las funciones  $j_l(\alpha r)$ . De acuerdo a la condición a la frontera  $\Psi(r = a, \theta, \phi) = 0$ , la solución en la parte radial toma la forma  $R(\alpha a) = j_l(\alpha a) = 0$ , donde  $\alpha a = \nu_{ln}$ , es el  $n$ -ésimo cero de la función de Bessel esférica. Entonces la solución es  $R(\alpha r) = D_1 j_l(\frac{\nu_{ln}}{a} r)$ , siendo  $D_1$  una constante real,  $l \geq 0$  y  $n \geq 1$ .

Por tanto, las soluciones de (2.1.2) toman la forma de acuerdo a las soluciones de las ecuaciones (2.1.4) a (2.1.6)

$$\Psi(r, \theta, \phi) = N j_l\left(\frac{\nu_{ln}}{a} r\right) P_l^k(\cos\theta) \frac{\exp ik\phi}{\sqrt{2\pi}} = N j_l\left(\frac{\nu_{ln}}{a} r\right) Y_l^k(\theta, \phi), \quad (2,1,10)$$

y las energías se escriben como

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 \nu_{ln}^2}{2ma^2}. \quad (2,1,11)$$

El estado base de este problema se describe por las siguientes ecuaciones

$$\Psi_B(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} j_0\left(\frac{\pi r}{a}\right), \quad (2,1,12)$$

$$E_B = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}. \quad (2,1,13)$$

Cabe notar que el estado base es **no degenerado**. En el Apéndice A, se muestra la ortogonalización de funciones especiales de los pozos cilíndrico y esférico.

## 2.2. El Pozo Cónico-Esférico

En la resolución de este pozo, un pozo de forma cónica con un casquete esférico como se muestra en la figura 2.2, hacemos uso de las ecuaciones de la sección 2.1 de la misma manera que se hizo en la resolución de la cuña, añadiendo la restricción  $0 \leq \theta \leq \theta_0$  en la ecuación (2.1.1). Por tal motivo, el potencial se transforma en

$$V(r, \theta, \phi) = \begin{cases} 0, & r < a, 0 \leq \theta \leq \theta_0, \\ \infty, & \text{en cualquier otra parte.} \end{cases} \quad (2,2,1)$$

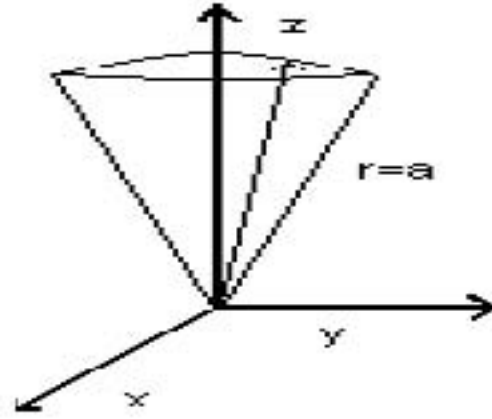


Figura 2.2: El Pozo Cónico-Esférico

Las eigenfunciones y energías deben de cumplir con las ecuaciones (2.1.2) y (2.1.3), respectivamente. Además, las soluciones cumplen con las ecuaciones (2.1.4) a (2.1.6) al resolverse por el método de separación de variables.

En este caso, la solución de la ecuación (2.1.4) aparece inalterada, debido a la simetría alrededor del eje  $Z$ , ya que en la variable azimutal se tiene la condición  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ .

$$\Phi(\phi) = \frac{\exp ik\phi}{\sqrt{2\pi}}, \quad (2,2,2)$$

Sin embargo, al tratar de resolver la ecuación (2.1.5) con la condición  $0 \leq \theta \leq \theta_0$ , transformándola por medio del cambio de variable  $x = \cos\theta$  en la ecuación (2.1.8),

$$(1 - x^2) \frac{d^2 P}{dx^2} - 2x \frac{dP}{dx} + \left( l(l+1) - \frac{k^2}{(1-x^2)} \right) = 0,$$

la solución obtenida por el método de **Frobenius** ya no puede desarrollarse alrededor del cero, debido a que el dominio se encuentra restringido. Por este motivo, el desarrollo en serie se hace alrededor de  $x = 1$ , ya que en este punto debe de haber regularidad. Se propone el cambio de variable  $\xi = \frac{1}{2}(1-x)$  [8], insertando en (2.1.8) y desarrollando se tiene la ecuación

$$\xi(1-\xi) \frac{d^2 P}{d\xi^2} + (1-2\xi) \frac{dP}{d\xi} + \left( l(l+1) - \frac{k^2}{4\xi(1-\xi)} \right) P = 0, \quad (2,2,3)$$

la cual es conocida como ecuación **hipergeométrica**, cuya solución (ver Apéndice B) está dada por

$$P_l^k(x) = \frac{(l+k)!}{(l-k)!} \frac{(1-x^2)^{\frac{k}{2}}}{2^k k!} {}_2F_1(k-l, k+l+1; k+1; \frac{1-x}{2}). \quad (2,2,4)$$

Como  $x = \cos\theta$ , sustituyendo en la ecuación anterior y usando las identidades  $\frac{(1-\cos\theta)}{2} = \sin^2\frac{\theta}{2}$ ,  $\sin^2\theta = 1 - \cos^2\theta$ , se obtiene

$$P_l^k(\cos\theta) = \frac{(l+k)!}{(l-k)!} \frac{(\sin\theta)^k}{2^k k!} {}_2F_1(k-l, k+l+1; k+1; \sin^2\frac{\theta}{2}). \quad (2,2,5)$$

El valor de  $l$  es determinado explícitamente por la condición a la frontera  $\Theta(\theta = \theta_0) = 0$  [9], de donde es necesario que se cumpla la siguiente condición

$$P_l^k(\cos\theta_0) = 0. \quad (2,2,6)$$

Para esto se escoge un ángulo  $\theta_0$  y una  $k$ , las cuales se dejan fijas en la ecuación (2.2.4) y se iguala ésta a cero. Ahora, procedemos a encontrar las  $l$ 's que satisfacen las condiciones anteriores. Para  $l$  entero, la función hipergeométrica se convierte en un polinomio de grado  $l-k$ . Pero para valores no enteros de  $l$ , la serie o función hipergeométrica diverge, sin embargo con el propósito de encontrar sus ceros, la serie se puede truncar tomando un número finito de términos de acuerdo a la precisión deseada [9]. Así, los ceros obtenidos de esta manera determinan la posición de la frontera del pozo cónico- esférico. La cantidad de ceros ó raíces de  $l$ , la denotamos por el subíndice  $p$ , con  $p$  natural. Hay que notar también el hecho de que si fijamos las  $l$ 's en vez de la abertura angular, debemos de encontrar ahora tal abertura angular de la frontera que satisface la ecuación (2.2.6), es decir, la situación se invierte. No obstante, se usa el mismo método descrito anteriormente, con la diferencia de que ahora se escoge una  $l$  y una  $k$  constantes y se procede a encontrar la abertura angular  $\theta_0$ , la cual satisface la condición a la frontera de la ecuación hipergeométrica.

De esta manera hemos obtenido las  $l_p$ 's, que ya no poseen el carácter de ser enteras al igual que sucedió con las  $m$ 's de la cuña. El valor de  $l_p$  nos da la abertura angular del cono, así en función de su valor, se puede trabajar tanto con un cono muy agudo, como con una



esfera con una hendidura en forma de cono, o también con una semiesfera. Hay que señalar que el valor de  $k$  y  $p$  repercuten en  $l_p$ , tomando ésta última un valor mayor al aumentar el valor de las primeras, para un ángulo fijo.

La solución de la ecuación (2.1.6), transformada en la ecuación (2.1.9) por medio del cambio de variable  $R(\alpha r) = \frac{j(\alpha r)}{\sqrt{\alpha r}}$ , posee las mismas soluciones del pozo esférico, con la diferencia de que ahora el subíndice ya no es entero sino toma cualquier valor real, dependiendo de la abertura angular del cono. La solución físicamente aceptable es  $R(\alpha r) = D_1 j_{l_p}(\alpha r)$ , que con la condición a la frontera  $\Psi(r = a, \theta, \phi) = 0$ , se convierte en  $R(\alpha r) = D_1 j_{l_p}(\frac{\nu_{l_p n}}{a} r)$ , donde  $\nu_{l_p n}$  es el  $n$ -ésimo cero de la función esférica de Bessel de orden  $l_p$ . Debido a la propiedad de no ser entero  $l_p$ , la denotamos ahora por  $\lambda_p$  para evitar confusiones con el pozo de la sección anterior. Por tanto, las eigenfunciones y eigenenergías toman las formas siguientes

$$\Psi_{npk}(r, \theta, \phi) = \mathbf{N} j_{\lambda_p} \left( \frac{\nu_{\lambda_p n}}{a} r \right) P_{\lambda_p}^k(\cos\theta) \frac{\exp ik\phi}{\sqrt{2\pi}}, \quad (2,2,7)$$

$$E_{n\lambda_p} = \frac{\hbar^2 \nu_{\lambda_p n}^2}{2\mathbf{m}a^2}, \quad (2,2,8)$$

en donde  $P_{\lambda_p}^k(\cos\theta) = \frac{(\lambda_p+k)!}{(\lambda_p-k)!} \frac{(\sin\theta)^k}{2^k k!} {}_2F_1(k - \lambda_p, k + \lambda_p + 1; k + 1; \sin^2 \frac{\theta}{2})$  y  $\mathbf{N}$  es una constante de normalización. En el estado base, estado al cual se refiere este estudio, los subíndices tienen los valores  $p = n = 1$  y  $k = 0$ , por lo que las ecuaciones anteriores toman las formas

$$\Psi_B(r, \theta, \phi) = \mathbf{N}_0 j_{\lambda_1} \left( \frac{\nu_{\lambda_1 1}}{a} r \right) {}_2F_1(-\lambda_1, \lambda_1 + 1; 1; \sin^2 \frac{\theta}{2}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \quad (2,2,9)$$

$$E_B = \frac{\hbar^2 \nu_{\lambda_1 1}^2}{2\mathbf{m}a^2}. \quad (2,2,10)$$

Si definimos

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mathbf{m}e^2}, \quad (2,2,11)$$

como el *radio de Bohr*, donde  $\mathbf{m}$  y  $e$  son la masa y carga del electrón respectivamente, nuestra energía en términos de éste se reescribe como sigue

$$E_B = \frac{a_0 e^2 \nu_{\lambda_1 1}^2}{2a^2}. \quad (2,2,12)$$

Esta definición se usará en el capítulo 3 como patrón de referencia de unidades en las cuales están medidas las dimensiones del cono.

## 2.3. El Campo Eléctrico y los Corrimientos de Energía (Efecto Stark)

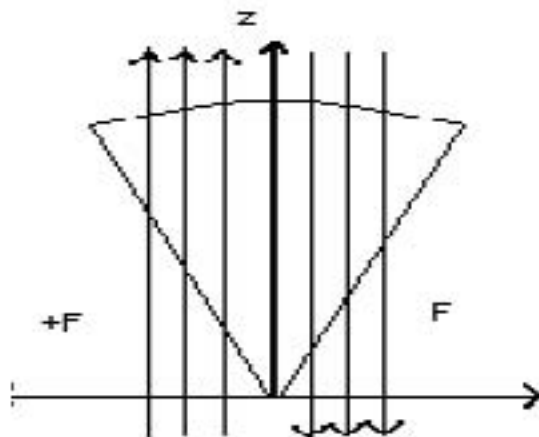


Figura 2.3: El Campo Eléctrico en las Direcciones Aplicadas.

Al momento de introducir el campo eléctrico, de acuerdo al método visto en la sección 1.4, debemos usar una función de prueba para la descripción del efecto provocado por el campo. Al restringirnos al caso del estado base, hacemos uso de la ecuación (2.2.9), la cual denotamos por  $\Psi_0$ . Según el tratamiento de la cuña con el campo aplicado, nuestro hamiltoniano debe contener el término del campo, que adecuado a nuestra geometría queda como

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2\mathbf{m}} \pm |e|Frcos\theta + V_c, \quad (2,3,1)$$

donde cabe señalar que  $\theta$  es en este caso la variable angular cenital de las coordenadas esféricas a diferencia de la cuña,  $F$  es la magnitud del campo eléctrico,  $rcos\theta$  la dirección en que se aplica este último (a lo largo del eje  $Z$ ),  $|e|$  y  $\mathbf{m}$  la carga y masa del electrón, respectivamente; y  $V_c$  el potencial de confinamiento de acuerdo al modelo del pozo infinito, dado por la ecuación (2.2.1). Para el estudio del efecto Stark, usamos la función de prueba multiplicada por el factor exponencial que contiene el parámetro variacional  $\beta$  del campo

eléctrico, obteniendo la función

$$\Psi(r, \theta, \phi, \beta) = \Psi_0 \exp(\pm \beta r \cos \theta). \quad (2,3,2)$$

Al tratar con electrones, el signo  $-$  corresponde a un campo aplicado en la dirección positiva del eje del cono, mientras el signo  $+$  corresponde al campo aplicado en la dirección opuesta.

El cálculo de la energía del estado base se hace por medio de la ecuación (2.2.12), la cual es comparada con las energías obtenidas cuando se aplica el campo eléctrico. El cálculo de estas energías se hace por medio de la ecuación (1.4.6), donde la energía del estado  $\Psi$  es mayor que la energía de  $\Psi_0$ , por ser ésta la función de estado base. Diferenciamos con respecto a  $\beta$  de acuerdo a la ecuación (1.4.7) para encontrar el extremo o mínimo de energía  $E(\beta)$  (ecuación (1.4.11)). Finalmente, para ver el corrimiento Stark definido como  $\Delta E$ , se contrasta esta energía con la correspondiente energía de estado base  $E_B$ , es decir,

$$\Delta E = E(\beta) - E_B. \quad (2,3,3)$$

Ya que nuestra función de estado base está dada por la ecuación (2.2.9), es necesario calcular primero las raíces de la función hipergeométrica, dadas por medio de la ecuación (2.2.6), además de encontrar las correspondientes raíces de las funciones de Bessel esféricas. El siguiente capítulo muestra los cálculos y análisis de las últimas dos secciones.

# Capítulo 3

## Cálculos y Análisis de los Resultados

En este capítulo se presentan, inicialmente, los cálculos de las condiciones sobre las funciones especiales que componen la función de onda involucrada en el problema, en particular la de estado base. A partir de estos resultados, se calculan las energías del electrón dentro del pozo cónico-esférico y los corrimientos de energía que se presentan debido a la influencia del campo eléctrico aplicado, en función de los parámetros dimensionales de la caja cuántica y de la magnitud del campo eléctrico, de acuerdo al análisis teórico hecho en el capítulo anterior. La programación se realizó en **Mathematica** y para el manejo y análisis de los datos se empleó **Origin**, cuyos resultados se muestran a continuación.

### 3.1. Cálculos Preliminares

De nuevo, observando la ecuación (2.2.9), es necesario comenzar por el cálculo de las  $\lambda_p$  de la función hipergeométrica, es decir, sus raíces de acuerdo a la condición (2.2.6) para un ángulo  $\theta_0$  y  $k$  dados. En el estado base,  $k = 0$  por lo que el cálculo se simplifica en la coordenada azimutal. Los ángulos en la coordenada cenital escogidos son:  $\frac{\pi}{20}$ ,  $\frac{\pi}{10}$ ,  $\frac{\pi}{5}$ ,  $\frac{\pi}{3}$ ,  $\frac{\pi}{2}$ ,  $\frac{4\pi}{5}$ . Según el método visto en la sección 2.2, se debe truncar la serie para encontrar las raíces necesarias en cada caso, no obstante, con el uso del cómputo, estas raíces se obtuvieron de

una gráfica de  $\lambda$  contra  $P_\lambda(\cos\theta_0)$  con la ayuda de **Mathematica**. Cabe hacer notar que el no comenzar con la función armónica (2.2.2), ( $\Phi(\phi) = \frac{\exp ik\phi}{\sqrt{2\pi}}$ ), se debe al hecho de que en el estado base  $k = 0$ , por lo que no es necesario hablar de esta función en dicho estado. Las siguientes gráficas muestran el comportamiento de la función hipergeométrica con respecto de  $\lambda$  y cómo varían las  $\lambda_p$  respecto del ángulo.

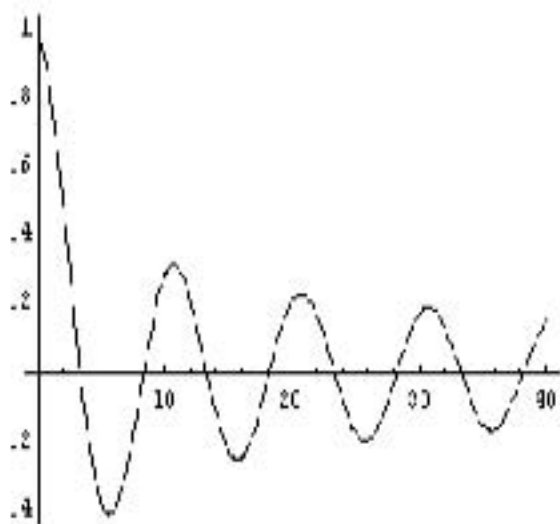


Figura 3.1: Función Hipergeométrica

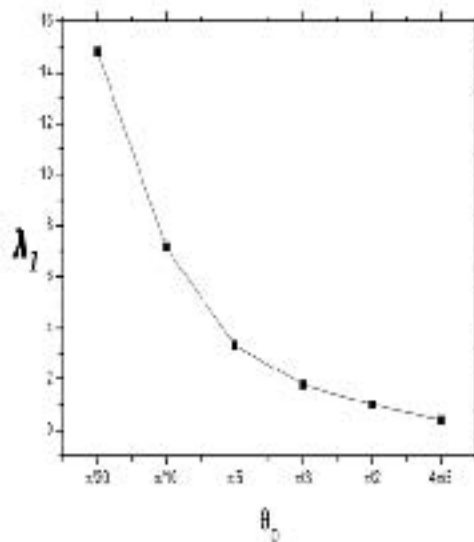


Figura 3.2: Raíz  $\lambda_p$  vs. Ángulo

Como se puede observar de la gráfica 3.2, mientras más pequeño sea el ángulo cenital del cono, el valor de la raíz es un número real mayor y tiende a disminuir al aumentar la abertura angular. Por otro lado, al tender el ángulo a  $\frac{\pi}{2}$ , el valor de la raíz tiende a un número entero, el cual pierde nuevamente su carácter de entero al aumentar el ángulo ( $\frac{\pi}{2} \leq \theta_0 < 2\pi$ ). La tabla de la página siguiente muestra los valores de  $\lambda_1$  para los ángulos dados anteriormente.

Ya que se ha obtenido la primer raíz  $\lambda_1$  de la función hipergeométrica en la ecuación (2.2.9), se observa que esta raíz repercute en la función radial por medio del cero de la función de Bessel, además de que repercute también en la ecuación (2.2.12), esto es, en las energías del electrón. Esto se debe al hecho de que el valor de  $\lambda_p$  nos da la abertura angular

$\theta_0$	$\lambda_1$
$\pi/20$	14.8069
$\pi/10$	7.14945
$\pi/5$	3.31643
$\pi/3$	1.77698
$\pi/2$	0.999407
$4\pi/5$	0.3108

Figura 3.3: Valores de las Raíces de la función Hipergeométrica

del cono y, por ser la constante de separación de la ecuación cenital, esta constante influye en la ecuación radial como lo muestra la ecuación (2.1.6). La siguiente figura muestra la evolución de los ceros de la función de Bessel esférica al aumentar la abertura angular, o dicho de otro modo, al disminuir el valor de  $\lambda_1$ .

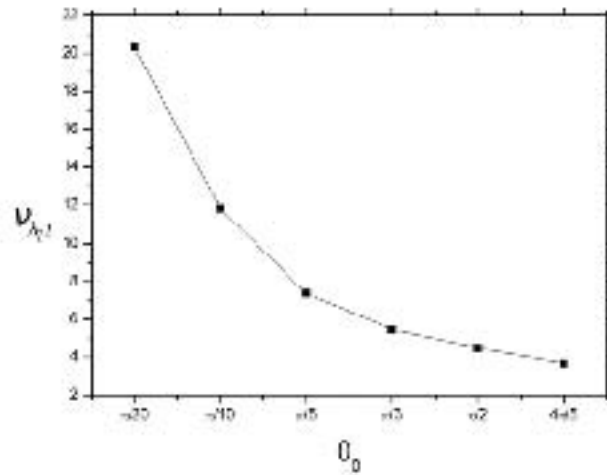


Figura 3.4: Raíz de la Función Bessel vs.  $\theta_0$

Una vez que se obtuvieron las raíces necesarias para el cálculo de las energías, se procede ahora a encontrar dichas energías del estado base del electrón en el pozo cónico-esférico,

para distintos radios de éste dada una abertura angular cenital y sin aplicación del campo eléctrico. Esto se trabaja en la siguiente sección.

### 3.2. Las Energías dentro del Pozo Cónico

Se calcularon las energías del electrón en función del radio del cono a distintos ángulos fijos, donde la abertura angular está dada por el respectivo valor de  $\lambda_1$ . Todos los resultados se presentan en unidades atómicas reducidas (a. u.), que corresponden a la unidad de longitud de un radio efectivo de Bohr definido por la ecuación (2.2.11), y un Rydberg efectivo definido de la siguiente manera:  $R = \frac{me^4}{2\hbar^2}$ . En la referencia [11] se muestran los cambios de las energías en función de las dimensiones de pozos con geometrías como las que se presentan en esta tesis y su posible aplicación tecnológica. La siguiente tabla muestra las energías calculadas para distintos valores del radio del cono, manteniendo un ángulo fijo o viceversa.

$\lambda_1$	$E_{10}(m^20)$	$E_{10}(m^40)$	$E_{11}(m^50)$	$E_{11}(m^70)$	$E_{11}(m^20)$	$E_{11}(4m^50)$
103.201	1.0133	6.7200	3.1378	20.1538	3.78671	
100.020	04.97	10.5744	7.52119	5.04595	1.69630	
10.0212	7.77111	3.31562	1.37188	1.12132	1.76108	
12.91533	4.37125	1.5905	0.24015	0.63074	3.42417	
8.90731	2.7971	1.78252	0.7717	0.40708	1.07147	
5.74015	1.94270	0.7540	0.41704	0.20030	3.00052	
4.91725	1.49735	0.75407	0.37089	0.20790	1.385	
0.22000	1.09201	0.4242	0.20504	0.15769	3.0604	
2.00118	1.86376	1.5817	0.13671	0.12760	10.8271	
11	3.06345	3.6924	0.27146	0.13042	0.10092	3.06737

Figura 3.5: Energías

Como se observa de la ecuación (2.2.12), los valores de las energías decaen en forma de

hipérbola cuadrática con el radio del cono para una  $\lambda_1$ , la cual da la abertura angular. Estas energías también fueron calculadas por medio de la ecuación

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^{\theta_0} \int_0^a \Psi^* \hat{H} \Psi r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi, \quad (3,2,1)$$

de acuerdo a los principios de la mecánica cuántica [6], [7], obteniéndose el mismo resultado tal como se esperaba. La energía del electrón disminuye al aumentar las dimensiones del cono, no sólo al aumentar el radio, sino también al aumentar la abertura angular, como se puede leer de la tabla en dirección horizontal, de izquierda a derecha. Es decir, la energía siempre disminuye al aumentar las dimensiones del pozo cónico.

La siguiente gráfica muestra la evolución de las energías de la figura anterior sin aplicación del campo eléctrico respecto del radio, a las aberturas angulares dadas anteriormente.

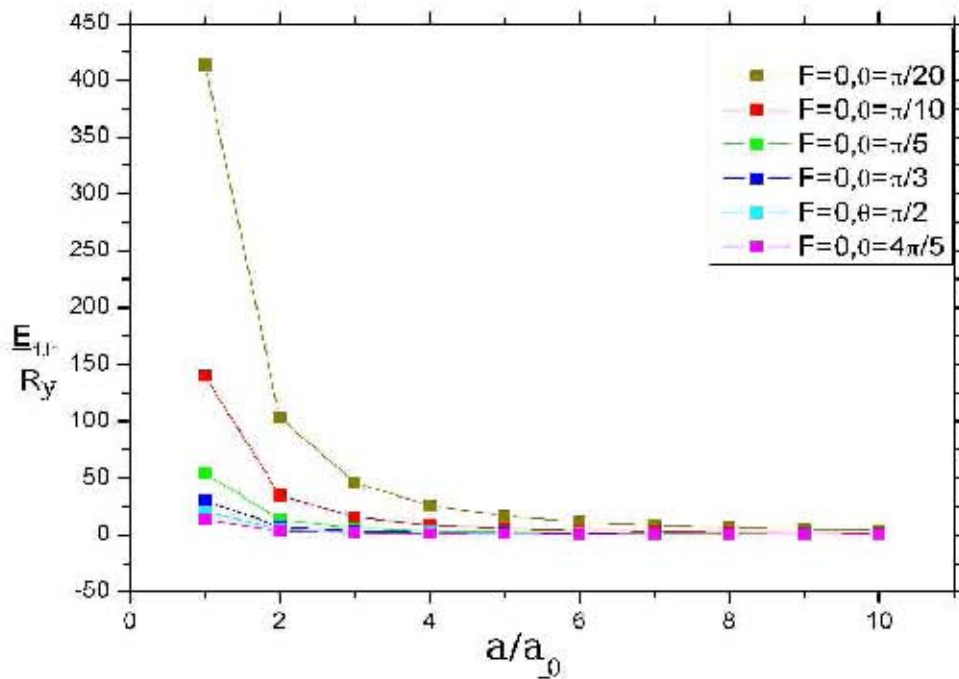


Figura 3.6: Las Energías en el Pozo Cónico-Esférico



En esta gráfica, es bastante notorio el decaimiento hiperbólico de las energías, las cuales parecen tender al mismo valor al ir aumentando el radio del cono, es decir, se nota una convergencia a una misma energía sin importar la abertura angular del pozo cónico. No obstante, los valores dados en la tabla para un radio grande, muestran aún una energía mayor para una abertura angular pequeña. Ahora falta ver el cambio que experimentan estas energías al aplicarse el campo eléctrico para su posible aplicación en la microscopía de fuerza atómica.

### 3.3. El Campo Eléctrico y sus Efectos

El siguiente paso es analizar los efectos de la aplicación del campo eléctrico al pozo cónico, el cual también está dado en unidades atómicas (u. a.) como  $F_0 = \frac{e}{2a_0^2}$ . Éste es aplicado a lo largo del eje del cono dirigido desde la parte más angosta hacia el casquete esférico y viceversa. De acuerdo al tratamiento de la sección 1.4, adaptado a este problema en la sección 2.3, nuestra función de prueba mas el término exponencial del campo nos da la función siguiente

$$\Psi(r, \theta, \phi, \beta) = \mathbf{N}_0 j_{\lambda_1} \left( \frac{\nu_{\lambda_1 1}}{a} r \right) {}_2F_1(-\lambda_1, \lambda_1 + 1; 1; \sin^2 \frac{\theta}{2}) \frac{e^{(\pm \beta r \cos \theta)}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (3,3,1)$$

Teniendo ya nuestra función con el término variacional del campo eléctrico, es necesario calcular las energías del electrón, las cuales serán mayores que las energías de estado base. De este cálculo, buscamos el mínimo con respecto a  $\beta$  de acuerdo a las ecuaciones

$$\delta E \equiv \delta \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0, \quad (1,4,7)$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} (E(\beta)) = 0. \quad (1,4,11)$$

Las energías de estado base con campo aplicado  $E(\beta)$  son obtenidas de esta manera y son comparadas con las de estado base sin campo aplicado. La diferencia de energías se da por la ecuación (2.3.3), la cual muestra los corrimientos debido a la influencia del campo.

$$\Delta E = E(\beta) - E_B. \quad (2,3,3)$$

La gráfica siguiente muestra los corrimientos que provoca el campo al aplicarse en la dirección positiva del eje  $Z$ , es decir, de la parte puntiaguda hacia el casquete esférico. Esto provoca que el electrón sea empujado por la fuerza eléctrica hacia dicha parte puntiaguda.

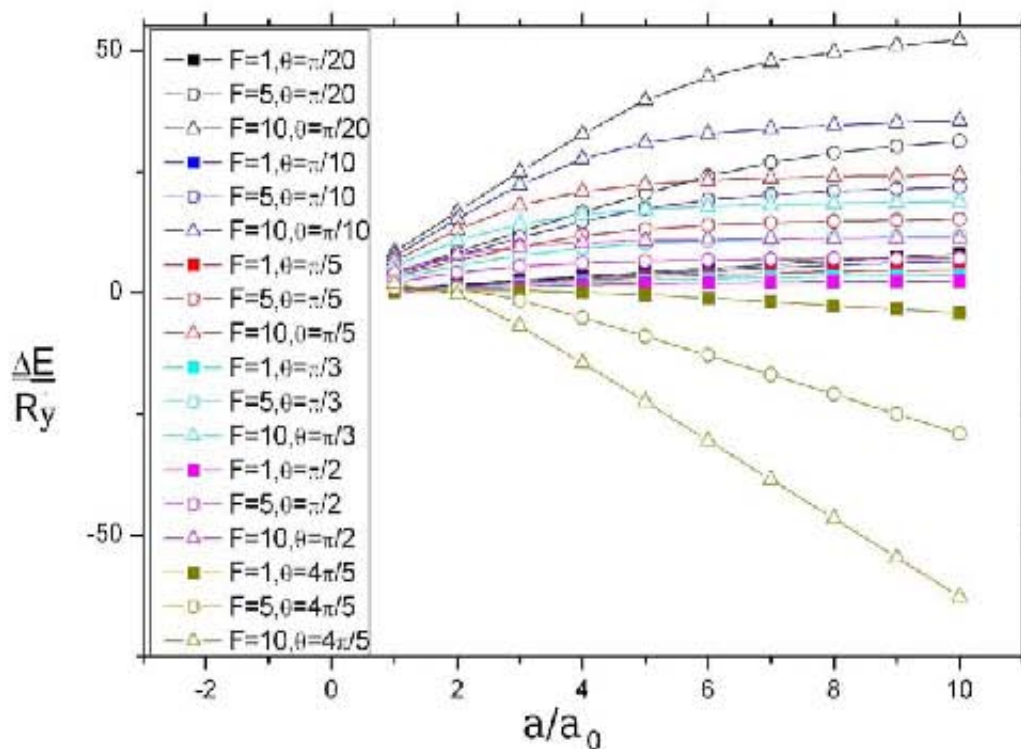


Figura 3.7: Corrimientos de Energía debidos al Campo eléctrico

Para el análisis de los efectos del campo eléctrico aplicado, dividimos el problema en dos partes: para ángulos  $\theta_0 \leq \frac{\pi}{2}$  y para ángulos  $\theta_0 > \frac{\pi}{2}$ .

De la gráfica podemos observar que para ángulos pequeños, el corrimiento de las energías es mayor al aumentar la magnitud del campo. Para ángulos mayores, el corrimiento es más pequeño o menos intenso. El efecto neto es un confinamiento del electrón hacia la punta del cono, presentándose un aumento en la energía cinética de éste. El confinamiento para

ángulos mayores es menor debido a que la energía disminuye al aumentar la abertura angular como se observa en la figura 3.6. Además, de la figura 3.7 se muestra que el confinamiento es mayor a medida que se reduce el radio del cono, debido al aumento de energía que presenta el electrón en la caja cuántica como consecuencia de una *compresión* en la función de onda. Sin embargo, al llegar a una abertura angular de  $\frac{\pi}{2}$ , es decir, cuando la punta se convierte en una semiesfera, el efecto del campo es dirigir al electrón a la parte central plana de la semiesfera.

Al aumentar la abertura angular hasta tener una esfera menos una sección cónica, el efecto del campo es confinar al electrón en la zona donde  $z < 0$ , es decir, si tomamos un corte transversal de la esfera se obtiene una figura como la de un **Packman**, entonces el electrón se confina en las partes puntiagudas del Packman3D.

Al graficar la densidad electrónica en estado base ( $\Psi^2$ ) sin campo y con campo aplicado, se observa claramente el corrimiento en energía, ó confinamiento del electrón hacia la punta del cono, en el caso de un ángulo  $\theta_0 < \frac{\pi}{2}$ . En las siguientes figuras se muestra este efecto para el ángulo de  $\frac{\pi}{20}$ , radio  $\frac{a}{a_0} = 5$ , a la izquierda, sin campo aplicado y a la derecha con campo  $\frac{F}{F_0} = 10$ . Este campo es constante para todas las gráficas.

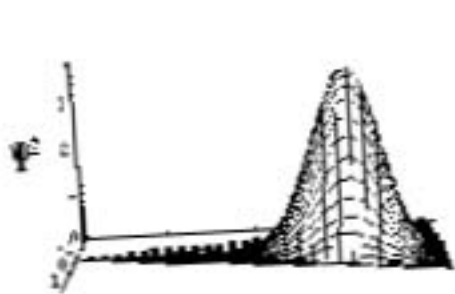


Figura 3.8:  $\Psi^2$  sin Campo ( $\frac{\pi}{20}$ )

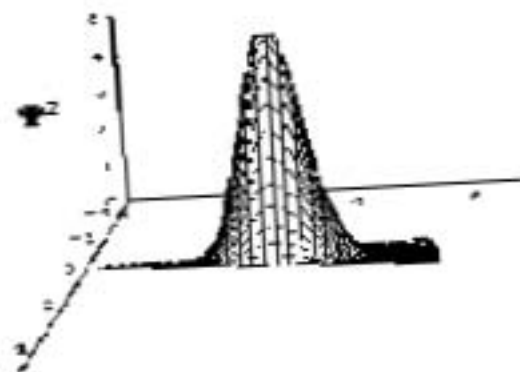


Figura 3.9:  $\Psi^2$  con Campo

Graficando la misma  $\Psi^2$  con respecto a ángulos  $\theta_0 \geq \frac{\pi}{2}$ , se observa el confinamiento del

electrón, en el primer caso ( $\theta_0 = \frac{\pi}{2}$ ), hacia la parte central de la cara plana de la semiesfera, y en el otro caso ( $\theta_0 > \frac{\pi}{2}$ ), hacia las partes puntiagudas de la cara del packman. Esto se muestra claramente en las siguientes figuras.

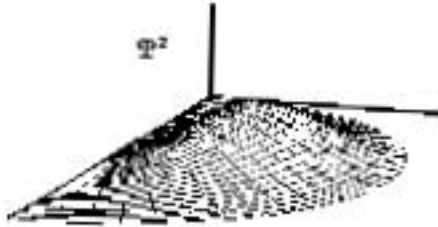


Figura 3.10:  $\Psi^2$  s/Campo  $\frac{\pi}{2}$

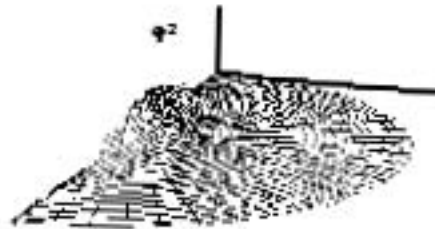


Figura 3.11:  $\Psi^2$  con Campo

Cabe hacer notar aquí el cambio de signo que se presenta en el corrimiento cuando se pasa a ángulos  $\theta_0 > \frac{\pi}{2}$ . El confinamiento siempre se presenta en el mismo sentido, a pesar del cambio de signo en el corrimiento de energías.

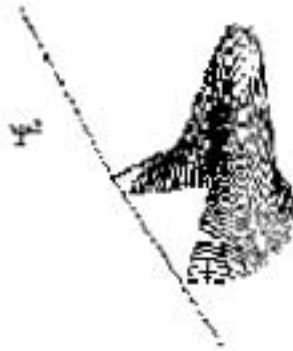


Figura 3.12:  $\Psi^2$  s/Campo  $\frac{4\pi}{5}$



Figura 3.13:  $\Psi^2$  con Campo

Ahora se grafica el cambio de energías que experimenta el electrón al aumentar la inten-

sidad del campo eléctrico, manteniendo el radio constante. Este efecto es el que nos interesa para la aplicación directa al microscopio de fuerza atómica, ya que el aumento de la intensidad del campo eléctrico asemeja el acercamiento de la punta al sustrato en el régimen de no contacto o regimen atractivo, como se explicó en el capítulo 1 de esta tesis. La figura 3.7 muestra vagamente el efecto que provoca el campo eléctrico a las energías del electrón, pero la siguiente figura muestra con gran detalle el corrimiento de las energías al ir aumentando gradualmente la intensidad del campo manteniendo el radio fijo.

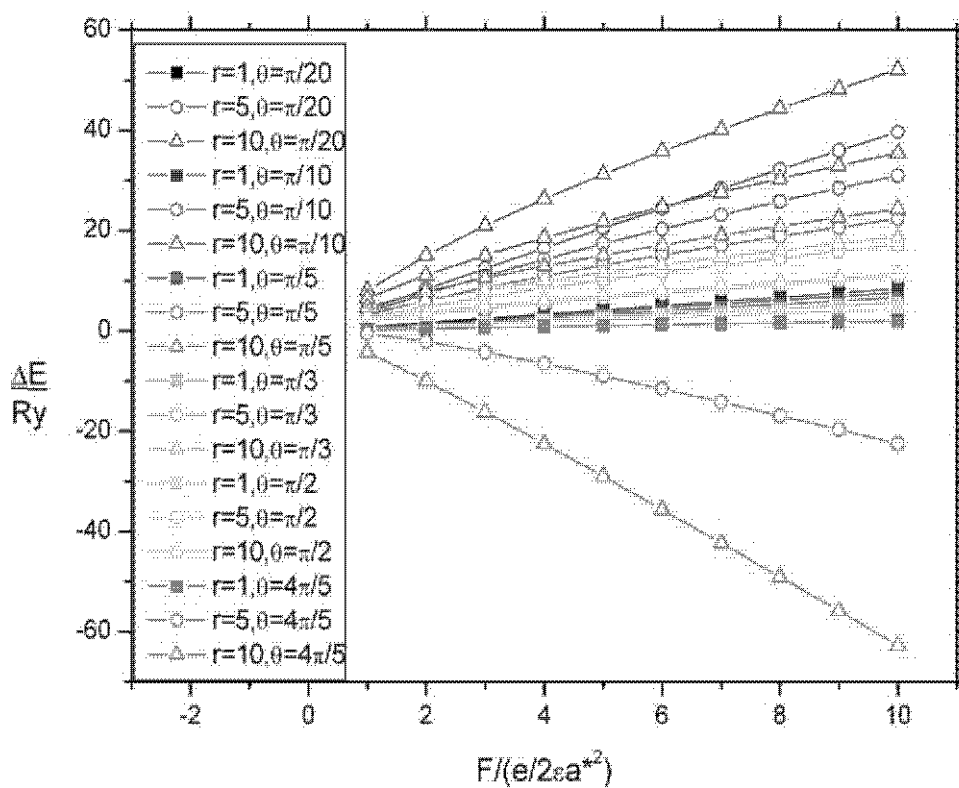


Figura 3.14: Corrimientos de Energía vs. Campo a Radio fijo.

Como se observa, el corrimiento es positivo al aumentar la intensidad del campo para ángulos  $\theta_0 \leq \frac{\pi}{2}$ , es decir, el campo confina hacia la punta del cono en el caso de un ángulo

pequeño y confina hacia el centro de la cara plana de la semiesfera, como se explicó anteriormente. De la misma manera, para ángulos  $\theta_0 > \frac{\pi}{2}$ , el corrimiento de energías es negativo, no obstante el campo confina al electrón hacia las partes puntiagudas del packman3D, cuya figura, si se rota  $360^\circ$  alrededor del eje  $Z$ , permite apreciar una esfera menos un cono y el confinamiento se da en la zona negativa del eje  $Z$ .

De esta manera, centrándonos un poco en las puntas cuya abertura angular es pequeña, el corrimiento en energía es tal que, en forma, se asemeja a la fuerza que sienten punta y cantilever en el régimen de no contacto, como se muestra en la parte izquierda de las gráficas de la figura 1.3. Esto nos lleva a considerar los corrimientos de energía como métodos alternos para realizar observaciones con el AFM, ya que producirían una corriente en una dirección, la cual puede ser amplificada y manipulada para obtener la información deseada, que en este caso es obtener una imagen y fuerzas de interacción. Cabe hacer notar que las puntas con abertura angular pequeña y radio mayor son las más sensibles a los efectos del campo eléctrico aplicado.

Si nos centramos en los packmans, podemos observar que el confinamiento hace que los electrones tiendan a estar en un círculo. Una ventaja de esta consecuencia es que la interacción en distintas partes de este círculo puede ser distinta, obteniéndose corrientes distintas dentro del packman, las cuales se pueden aprovechar para obtener una imagen de una superficie mayor, haciendo posible una velocidad de barrido mayor que con una punta muy fina. Sin embargo, se ve sacrificada la sensibilidad, ya que este tipo de puntas no se acerca tanto a finas depresiones que pudiesen encontrarse en el sustrato, lo que ocasionaría que la imagen resultante fuese de poca calidad, al no poder sondear de buena manera esas depresiones.

A pesar de que la sensibilidad se sacrifica con los packmans, es de notar el hecho de que pueden sustituir el método de medición de uso de varias puntas a la vez, un método que es muy frecuentemente usado en microscopía de fuerza atómica, ya que la superficie que barre el círculo es un equivalente a tener varias puntas en un cantilever.

Una vez que se han observado los efectos que produce el campo eléctrico aplicado en la dirección positiva del eje del cono, se procede a analizar los efectos que produce éste al ser aplicado en la dirección contraria, es decir, en la dirección  $-z$ , lo que hace que el electrón se mueva hacia la parte más ancha del cono, a lo largo del eje de simetría.

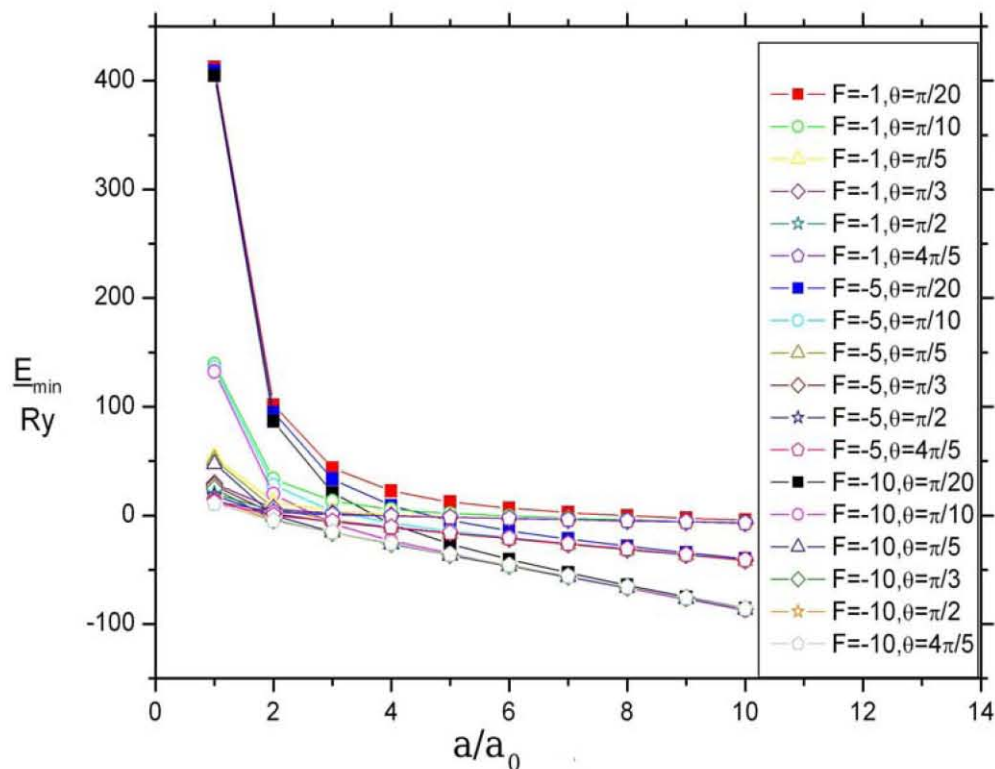


Figura 3.15: Evolución de las Energías con Campo Negativo

La gráfica 3.15 presenta las energías del electrón al aumentar el radio del cono para los mismos ángulos y campos, pero estos últimos con signo contrario. Las unidades siguen siendo las mismas, no obstante cambia el signo a positivo en la ecuación (2.3.2), ya que corresponde a la aplicación del campo en dirección negativa del eje del cono, como se explicó en la sección 2.3. La siguiente gráfica presenta los corrimientos de energía con respecto al radio del cono.

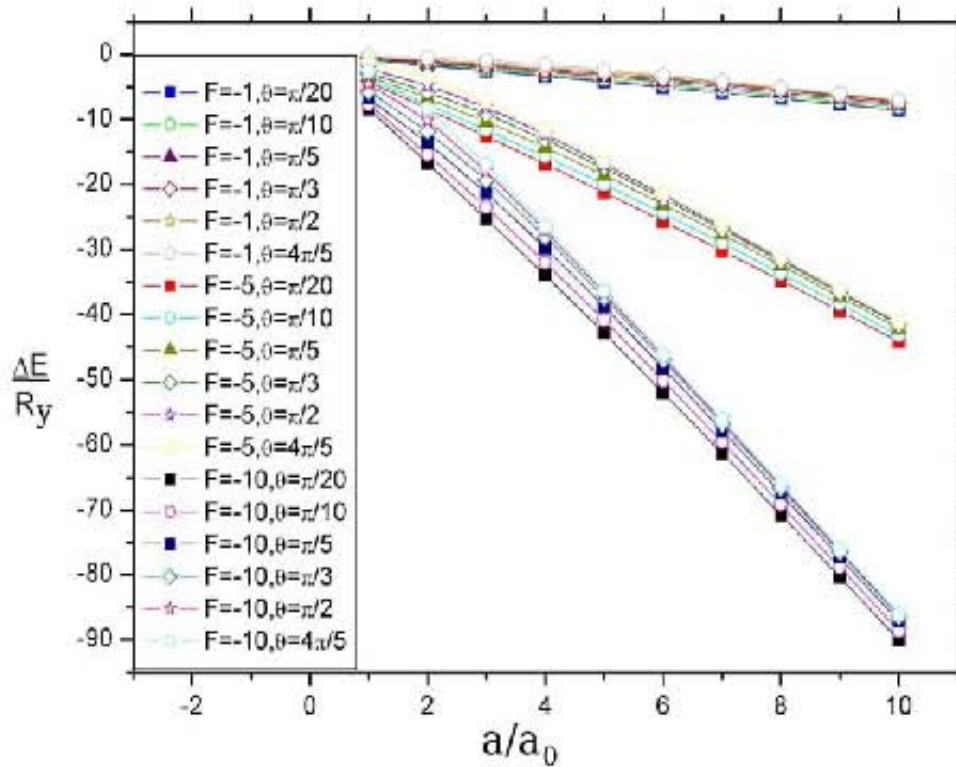


Figura 3.16: Corrimientos de Energía con Campo Negativo

Al observar la gráfica, se aprecia que el corrimiento de energía en este caso es negativo, lo que puede interpretarse como desconfinamiento. Es decir, el electrón ya no se dirige hacia la punta del cono, sino al lado contrario presentándose el desconfinamiento. Éste es mayor al aumentar la magnitud del campo eléctrico como se observa directamente de la gráfica.

Un hecho que es muy notorio es la poca dependencia de la abertura angular. Como se observa, las curvas se traslapan al aumentar la abertura angular del cono. El efecto ya no es distinto para las distintas aberturas, el electrón se desconfina dependiendo solamente de la magnitud del campo. Este efecto es el que se presentaría en el régimen de contacto del microscopio de fuerza atómica, es decir, como se observa en la parte izquierda de las



gráficas de la figura 1.3. Al estar en contacto el sustrato y la punta, el campo provoca un desconfinamiento de los electrones de la punta, mandándolos hacia la parte ancha del cono. Esto provocaría una corriente que se puede amplificar para obtener la imagen deseada del sustrato. Además, la manera en que las energías se corren, se asemeja a la fuerza que sienten tanto punta como cantilever en este régimen, las gráficas son muy similares a pesar de medir distintos efectos.

De acuerdo a los resultados encontrados en este capítulo, la propuesta de funcionamiento del AFM tiene que ver con corrimientos en energía de los electrones de la punta, debido a la influencia de las fuerzas eléctricas que se presentan entre la materia a escala microscópica. Comparando las gráficas de la figura 1.3 con los resultados obtenidos, se observa una similitud entre las gráficas de los dos regímenes con respecto a las gráficas de corrimiento de energías obtenidas en este capítulo. No hay que olvidar que las gráficas de la figura 1.3, corresponden a la fuerza entre el sustrato y el sistema cantilever-punta. Esto puede hacer suponer un nuevo funcionamiento del AFM, obteniendo mediciones por un método más sencillo que simplificaría las piezas necesarias de este microscopio.

# Capítulo 4

## Conclusiones

De acuerdo a los resultados y análisis hechos en el capítulo anterior sobre el pozo cónico se concluye lo siguiente:

Se presenta confinamiento cuántico del electrón al aplicarle un campo eléctrico externo en la dirección del eje del cono. El confinamiento se da hacia la punta del cono para ángulos menores a  $\frac{\pi}{2}$ . Al llegar la abertura a una semiesfera, el electrón se confina en el centro de la cara plana de ésta. Al aumentar la abertura, el electrón se confina en la zona donde  $z < 0$ , cuando se tendría una esfera con una hendidura cónica. El confinamiento depende fuertemente de las dimensiones del cono, en particular del radio y de la abertura angular, y de la intensidad del campo eléctrico aplicado. No obstante, el confinamiento se da siempre en la misma dirección, contraria a la dirección de aplicación del campo eléctrico. Este comportamiento asemeja al funcionamiento del AFM en el régimen de no contacto.

Al aplicar el campo eléctrico en la dirección contraria, se observa un desconfinamiento de los electrones de la punta, presentándose de una manera que depende muy poco de la abertura angular del cono. El confinamiento depende solamente del radio del cono y de la intensidad del campo eléctrico. Este comportamiento asemeja al AFM funcionando en el régimen de contacto.

En ambos casos, el confinamiento es más sensible a radios grandes, ya que en radios

pequeños la función de onda se encuentra en un espacio muy pequeño, por lo que se puede pensar que se encuentra *comprimida*, sobre todo si además se tiene una abertura angular pequeña. Es por eso que al aumentar las dimensiones del cono, tanto angulares como radiales, la función de onda se *descomprime*, siendo a la vez más sensible a la aplicación del campo eléctrico. La diferencia radica en la abertura angular. Si se tiene un ángulo pequeño, a la vez que se tiene un radio grande, el efecto es más claramente observado, como se mostró en el capítulo anterior. Por esta razón, conviene al AFM una punta con abertura angular pequeña para una mejor observación. No obstante, para una medición en el régimen de contacto, teóricamente no importa la abertura angular de la punta a utilizar, da lo mismo una punta muy fina que una semiesfera o una esfera menos una sección cónica.

Sin embargo, el empleo de la punta fina de radio grande es mejor, ya que puede llegar a depresiones en el sustrato, las cuales no podrían ser captadas de una buena manera con el uso de una punta burda.

En resumen, esta tesis estudió teóricamente de una manera sencilla un efecto que ocurre en la naturaleza a nivel microscópico, el cual puede ser aprovechado para un desarrollo tecnológico futuro. Un estudio más profundo consideraría una constante dieléctrica de la punta distinta de la del vacío, un potencial de confinamiento finito, campos eléctricos más reales, efectos de polarización del material, teoría de bandas del estado sólido, etcétera.

# Apéndice A

## Ortogonalización

Ortogonalización de las funciones que componen la función de onda de los pozos cilíndrico y cónico de las secciones 1.2 y 2.1 [10].

De la definición de la integral de Riemann

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \sum_{i=1}^N f(x_i)g(x_i) \right) \Delta x, \quad (A,1)$$

donde  $x_0 = a$  y  $x_N = b$ ,  $x_i - x_{i-1} = \Delta x$ , si interpretamos a  $f(x_i)$  y a  $g(x_i)$  como la  $i'$ -ésima componente de un vector de  $N$  componentes, entonces la suma (y por lo tanto la integral) corresponde directamente a un producto escalar de vectores (funciones). Al anularse el producto escalar, se obtiene la condición de ortogonalidad para vectores o funciones.

Las soluciones de la ecuación (1.2.2) deben ser ortonormales. En el caso del pozo cilíndrico, la función de onda está dada por la ecuación (1.2.12). Debemos de ver que las funciones que componen a dicha función son ortogonales. Usamos la identidad  $e^{ikx} = \cos(kx) + i\sin(kx)$ , por lo que necesitamos ver la ortogonalidad de estas funciones. De acuerdo a (A.1), se tiene que

$$\int_0^{2\pi} \cos(nx)\sin(mx)dx = 2\pi\delta_{nm}, \quad (A,2)$$

donde  $\delta_{nm}$  es la delta de Kronecker. Por lo tanto, estas funciones representan un conjunto ortogonal, y como  $\sin^2\theta + \cos^2\theta = 1$ , se sigue que es un conjunto ortonormal, cuya constante de normalización es  $2\pi$ .

La ortogonalidad de las funciones de Bessel en un intervalo  $[0, a]$ , se obtiene a partir de la teoría de Sturm-Liouville, la cual puede encontrarse en la referencia [10]. Tomemos la ecuación (1.2.9) con soluciones  $J_{m'}(\nu_{m'n}\frac{\rho}{a})$  y  $J_{m'}(\nu_{m'p}\frac{\rho}{a})$ , entonces tendremos dos ecuaciones iguales a (1.2.9), con subíndices distintos ( $n \neq p$ ). Multiplicando la solución con subíndice  $n$  por  $J_{m'}(\nu_{m'p}\frac{\rho}{a})$ , a la ecuación con subíndice  $p$  por  $J_{m'}(\nu_{m'n}\frac{\rho}{a})$  y restando ambas obtenemos

$$\begin{aligned} J_{m'}(\nu_{m'n}\frac{\rho}{a})\frac{d}{d\rho}\left[\rho\frac{d}{d\rho}J_{m'}(\nu_{m'p}\frac{\rho}{a})\right] - J_{m'}(\nu_{m'p}\frac{\rho}{a})\frac{d}{d\rho}\left[\rho\frac{d}{d\rho}J_{m'}(\nu_{m'n}\frac{\rho}{a})\right] \\ = \frac{\nu_{m'n}^2 - \nu_{m'p}^2}{a^2} J_{m'}(\nu_{m'n}\frac{\rho}{a})J_{m'}(\nu_{m'p}\frac{\rho}{a})\rho d\rho. \end{aligned} \quad (A,3)$$

Integrando por partes con respecto a  $\rho$  desde 0 hasta  $a$  obtenemos

$$\begin{aligned} \int_0^a J_{m'}(\nu_{m'n}\frac{\rho}{a})\frac{d}{d\rho}\left[\rho\frac{d}{d\rho}J_{m'}(\nu_{m'p}\frac{\rho}{a})\right]d\rho - \int_0^a J_{m'}(\nu_{m'p}\frac{\rho}{a})\frac{d}{d\rho}\left[\rho\frac{d}{d\rho}J_{m'}(\nu_{m'n}\frac{\rho}{a})\right]d\rho \\ = \frac{\nu_{m'n}^2 - \nu_{m'p}^2}{a^2} \int_0^a J_{m'}(\nu_{m'n}\frac{\rho}{a})J_{m'}(\nu_{m'p}\frac{\rho}{a})\rho d\rho. \end{aligned} \quad (A,4)$$

Al efectuar la integración, el lado izquierdo de (A.4) da

$$\left|\rho J_{m'}(\nu_{m'n}\frac{\rho}{a})\frac{d}{d\rho}J_{m'}(\nu_{m'p}\frac{\rho}{a})\right|_0^a - \left|\rho J_{m'}(\nu_{m'p}\frac{\rho}{a})\frac{d}{d\rho}J_{m'}(\nu_{m'n}\frac{\rho}{a})\right|_0^a. \quad (A,5)$$

Para  $\nu \geq 0$ , el factor  $\rho$  garantiza un cero en el límite inferior  $\rho = 0$ . En el límite superior  $\rho = a$ , cada factor se anula debido a las raíces  $\nu_{m'n}, p$ . Entonces, para  $n \neq p$ , el lado izquierdo se desvanece, por lo que

$$\int_0^a J_{m'}(\nu_{m'n}\frac{\rho}{a})J_{m'}(\nu_{m'p}\frac{\rho}{a})\rho d\rho = 0. \quad (A,6)$$

Esta última ecuación nos da la ortogonalidad de las funciones Bessel en  $[0, a]$ . Su normalización está dada por

$$\int_0^a [J_{m'}(\nu_{m'n}\frac{\rho}{a})]^2 \rho d\rho = \frac{a^2}{2} [J_{m'}(\nu_{m'n})]^2. \quad (A,7)$$

Para las funciones del pozo esférico, puesto que están compuestas de funciones armónicas, polinomios de Legendre y funciones Bessel esféricas y dos de estas funciones ya están ortogonalizadas, debemos ahora ortogonalizar las soluciones de la ecuación de Legendre. La

ortogonalidad de las funciones esféricas de Bessel se obtiene de la misma manera que hemos hecho con las cilíndricas. Para esto usamos la identidad  $j_{m'}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{m'+\frac{1}{2}}(x)$ , obteniendo la ortogonalización

$$\int_0^a j_{m'}(\nu_{m'n} \frac{\rho}{a}) j_{m'}(\nu_{m'p} \frac{\rho}{a}) \rho^2 d\rho = \frac{a^3}{2} [j_{m'+1}(\nu_{m'n})]^2 \delta_{np}. \quad (A,8)$$

Para la ortogonalización de los polinomios asociados de Legendre, usamos la fórmula de Rodrigues para  $P_n^m(x)$  [10], de donde se tiene que

$$\int_{-1}^1 P_p^m(x) P_q^m(x) dx = \frac{(-1)^m}{2^{p+q} p! q!} \int_{-1}^1 X^m \frac{d^{p+m}}{dx^{p+m}} X^p \frac{d^{q+m}}{dx^{q+m}} X^q dx, \quad (A,9)$$

con  $X = (x^2 - 1)$ . Si  $p \neq q$ , y de hecho, suponemos que  $p < q$ , integrando repetidamente por partes, éstas se anularán mientras exista  $X$ , así que integrando  $q + m$  veces obtenemos

$$\int_{-1}^1 P_p^m(x) P_q^m(x) dx = \frac{(-1)^m (-1)^{q+m}}{2^{p+q} p! q!} \int_{-1}^1 \frac{d^{q+m}}{dx^{q+m}} (X^m \frac{d^{p+m}}{dx^{p+m}} X^p) X^q dx. \quad (A,10)$$

El integrando del lado derecho se expande usando la fórmula de Leibniz, lo cual nos da

$$\frac{d^{q+m}}{dx^{q+m}} (X^m \frac{d^{p+m}}{dx^{p+m}} X^p) X^q = X^q \sum_{i=0}^{q+m} \frac{(q+m)!}{i!(q+m-i)!} \frac{d^{q+m-i}}{dx^{q+m-i}} X^m \frac{d^{p+m+i}}{dx^{p+m+i}} X^p. \quad (A,11)$$

Ya que el término  $X^m$  implica potencias de  $x$  no mayores a  $x^{2m}$ , se deben de tener las condiciones

$$q + m - 1 \leq 2m, \quad p + m + i \leq 2p, \quad (A,12)$$

o la derivada se anula. La condición para un resultado distinto de cero es

$$i \geq q - m, \quad i \leq p - m. \quad (A,13)$$

Para el caso  $p = q$ , caso en que no se anula la integral, permanece un término  $i = q - m$ .

Introduciendo (A.11) en (A.10) tenemos

$$\int_{-1}^1 [P_q^m(x)]^2 dx = \frac{(-1)^{q+2m} (q+m)!}{2^{2q} q! q! (2m)! (q-m)!} \int_{-1}^1 X^q \left( \frac{d^{2m}}{dx^{2m}} X^m \right) \left( \frac{d^{2q}}{dx^{2q}} X^q \right). \quad (A,14)$$

Ya que

$$X^m = (x^2 - 1)^m = x^{2m} - mx^{2m-2} + \dots, \quad \frac{d^{2m}}{dx^{2m}} X^m = (2m)!, \quad (A,15)$$

la ecuación (A.14) se reduce de la siguiente manera

$$\int_{-1}^1 [P_m^q(x)]^2 dx = \frac{(-1)^{q+2m} (2q)! (q+m)!}{2^{2q} q! q! (q-m)!} \int_{-1}^1 X^q dx. \quad (A,16)$$

La integral de lado derecho vale

$$(-1)^q \int_0^\pi \text{sen}^{2q+1} \theta d\theta = \frac{(-1)^p 2^{2q+1} q! q!}{(2q+1)}. \quad (A,17)$$

Entonces tenemos finalmente la condición de ortogonalización

$$\int_{-1}^1 P_p^m(x) P_q^m(x) dx = \frac{2}{2q+1} \frac{(q+m)!}{(q-m)!} \delta_{p,q}. \quad (A,18)$$

Escrita en coordenadas esféricas, la condición de ortogonalización queda como

$$\int_0^\pi P_p^m(\cos\theta) P_q^m(\cos\theta) \text{sen} \theta d\theta = \frac{2}{2q+1} \frac{(q+m)!}{(q-m)!} \delta_{p,q}. \quad (A,19)$$

De la misma manera, se puede obtener una condición de ortogonalización para subíndices distintos y superíndices iguales dada por

$$\int_{-1}^1 P_n^m(x) P_n^k(x) (1-x^2)^{-1} dx = \frac{(n+m)!}{m(n-m)!} \delta_{m,k}. \quad (A,20)$$

La ortogonalización de las funciones que componen a la función de onda de la rebanada de pastel son las mismas que para el pozo cilíndrico, debido a que la teoría es para índices reales. En el caso del pozo cónico, la ortogonalización de la función hipergeométrica se puede realizar de manera numérica con la ayuda del cómputo, basados en la teoría que se da en este apéndice.

# Apéndice B

## Función Hipergeométrica

Se soluciona ahora la ecuación hipergeométrica (2.2.3) con  $\xi = \frac{1}{2}(1 - x)$ , por el método de desarrollo en serie de potencias de Frobenius. La solución de la ecuación

$$\xi(1 - \xi)\frac{d^2P}{d\xi^2} + (1 - 2\xi)\frac{dP}{d\xi} + \left(l(l + 1) - \frac{k^2}{4\xi(1 - \xi)}\right)P = 0, \quad (B,1)$$

debe de obtenerse por un desarrollo en serie de potencias alrededor de  $\xi = 0$  (es decir, alrededor de  $x = 1$ ). Para obtener la representación usada en esta tesis, es decir, la ecuación (2.2.5), resolvemos para el caso  $k = 0$ . En este caso desaparece el último término de la ecuación anterior, quedando solamente el término de la constante de separación  $l(l + 1)$ . Se obtiene entonces la ecuación

$$\xi(1 - \xi)\frac{d^2P}{d\xi^2} + (1 - 2\xi)\frac{dP}{d\xi} + (l(l + 1))P = 0, \quad (B,2)$$

y usamos la identidad

$$P_l^k(x) = (-1)^k(1 - x^2)^{\frac{k}{2}}\frac{d^k}{dx^k}P_l(x). \quad (B,3)$$

Entonces nuestra solución está dada por la serie de potencias

$$P(\xi) = \xi^m(a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + a_3\xi^3 + \dots) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} a_{\lambda}\xi^{k+\nu}, \quad (B,4)$$

con  $a_0 \neq 0$ , el exponente  $m$  y los coeficientes  $a_{\nu}$  aún indeterminados y donde la potencia  $\xi^m$  es el término más pequeño de la serie que no se anula. Entonces, diferenciando una y dos



veces la solución (B.4), sustituyendo estos resultados en la ecuación (B.2) y reacomodando términos se obtiene

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} ((l(l+1))a_{\nu} - 2a_{\nu}(\nu+m) - a_{\nu}(\nu+m)(\nu+m+1))\xi^{m+\nu} + \sum_{\nu=0}^{\infty} (a_{\nu}(\nu+m) + a_{\nu}(\nu+m)(\nu+m-1))\xi^{\nu+m-1} = 0. \quad (B,5)$$

Para la mínima potencia se tiene que  $\nu = 0$ , de donde se obtiene la relación  $a_0 m + a_0 m(m-1) = 0$  ó  $m = 0$ . Entonces, sea  $\nu = \lambda$  y  $\nu = \lambda + 1$  en la primera y segunda sumatoria de (B.5), respectivamente. Sustituyendo y despejando se obtiene la relación de recurrencia

$$\frac{a_{\lambda+1}}{a_{\lambda}} = \frac{(\lambda-l)(\lambda+l+1)}{(\lambda+1)^2}. \quad (B,6)$$

Sea  $a_0 = 1$ , sustituyendo se obtienen los coeficientes  $a_1 = \frac{-\lambda(\lambda+1)}{1}$ ,  $a_2 = \frac{(-\lambda)(-\lambda+1)(\lambda+1)(\lambda+2)}{2!2!}$ , etc. Por lo que la solución está dada por

$$P_l(\xi) = 1 + \frac{(-\lambda)(\lambda+1)}{1}\xi + \frac{(-\lambda)(-\lambda+1)(\lambda+1)(\lambda+2)}{2!2!}\xi^2 + \dots = {}_2F_1(-\lambda, \lambda+1; 1; \xi) = P_{\lambda}(\xi). \quad (B,7)$$

Como  $\xi = \frac{1}{2}(1-x)$ , al sustituir, tenemos finalmente que

$$P_{\lambda}(x) = {}_2F_1(-\lambda, \lambda+1; 1; \frac{1-x}{2}). \quad (B,8)$$

Para obtener finalmente la ecuación (2.2.5), hacemos uso de la ecuación (B.3). Entonces, derivando (B.8)  $k$  veces se tiene

$$P'_{\lambda}(x) = \left(\frac{-1}{2}\right) \frac{(-\lambda)(\lambda+1)}{1} {}_2F_1(-\lambda+1, \lambda+2; 2; \frac{1-x}{2})$$

$$P''_{\lambda}(x) = \left(\frac{-1}{2}\right) \left(\frac{-1}{2}\right) \frac{(-\lambda)(-\lambda+1)(\lambda+1)(\lambda+2)}{2!} {}_2F_1(-\lambda+2, \lambda+3; 3; \frac{1-x}{2}), \dots \quad (B,9)$$

Por lo tanto, generalizando y sustituyendo en (B.3), haciendo el cambio de variable  $x = \cos\theta$ , obtenemos finalmente el resultado deseado

$$P_l^k(\cos\theta) = \frac{(l+k)!}{(l-k)!} \frac{(\sin\theta)^k}{2^k k!} {}_2F_1(k-l, k+l+1; k+1; \sin^2 \frac{\theta}{2}). \quad (2,2,5)$$

# Bibliografía

- [1] *Localization and entanglement of two interacting electrons in a double quantum dot*, P. Zhang, X.-G. Zhao, *J. Phys. Condensed Matter* 13 (2001) 8389.
- [2] *Imaging and Spectroscopy of Artificial-Atom States in Core/Shell Nanocrystals Quantum Dots*, O. Millo, D. Katz, Y.W. Cao, U. Banin, *Phys. Rev. Lett.* 86 (2001) 5751.
- [3] *Large-Scale Fabrication of Carbon Nanotube Probe Tips for Atomic Force Microscopy Critical Dimension Imaging Applications*, Q. Ye, A.M. Cassell, H. Liu, K.-J. Chao, J. Han, M. Meyyappan, *Nanoletters* 4 (2004) 1301.
- [4] *Single-Walled Carbon Nanotube AFM Probes: Optimal Imaging Resolution of Nanoclusters and Biomolecules in Ambient and Fluid Environments*, L. Chen, C.L. Cheung, P.D. Ashby, C.M. Lieber, *Nanoletters* 4 (2004) 1725.
- [5] *Stark effect in a wedge-shaped quantum box*, J.A. Reyes-Esqueda, C.I. Mendoza, M. del Castillo-Mussot, G.J. Vázquez, *Phys. E* 28 (2005) 365.
- [6] *Introductory Quantum Mechanics*, Richard L. Liboff, 3ra. Edición.
- [7] *Introducción a la Mecánica Cuántica*, L. de la Peña, 2da. Edición, 1991. Fondo de Cultura Económica.
- [8] *Classical Electrodynamics*, J. D. Jackson, 2da. Edición. Sec. 3.4 "Behavior of Fields in a Conical Hole", pp. 94-98.

- [9] *The hydrogen atom in a semi-infinite space limited by a conical boundary*, E. Ley-Koo, S. Mateos-Cortés, Am. J. Phys. **61**, March, 1993.
- [10] *Mathematical Methods for Physicists*, George Arfken, 2da. Edición, Academic Press, Inc. 1970.
- [11] *Electron energy state dependence of the shape and size of semiconductor quantum dots*, Y. Li, O. Voskoboynikov, C. P. Lee, S. M. Sze, O. Tretyak, J. A. Phys. **90**, (2001) 6416.
- [12] *Piezoresistive cantilevers using InAs-based 2D Heterostructures*, H Yamaguchi, S, Miyashita, Y. Hirayama, Physica **E** 24 (2004) 70.
- [13] *On the electrochemical modelling of a resonating nano-cantilever-based transducer*, J. Teva, G. Abadal, Z.J. Davis, J. Verd, X. Borrisé, A. Boisen, F. Pérez-Murano, N. Barniol, Ultramicroscopy 100 (2004) 225.
- [14] *Feedback controlled nanocantilever device*, C. Ke, H. D. Espinoza, Appl. Phys. Lett. 85 (2004) 681.