



# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

“CONFINAMIENTO  
CUANTICO EN SISTEMAS  
ANISOTROPICOS”

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

FISICO

PRESENTA:

**ARTURO REYES ROMERO**

DIRECTOR DE TESIS:

**DR. MARCELO DEL CASTILLO MUSSOT**

**2006**





Universidad Nacional  
Autónoma de México



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

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

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

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

***Dedicado a:***

*La memoria de Agripina Salinas; Mi abuelita.*

*Sofía Romero y Jesús Reyes; Mis padres.*

*Carmen, Irma, Georgina y José; Mis Hermanos.*

*Mónica, Eduardo, Omar y Mauricio; Mis sobrinos.*

*Daniel Frausto y Rodolfo López; Mis cuñados.*

*La familia Fernández Gárate.*

*Toda la gente que quiero y que me quiere también.*

## ***Agradecimientos***

*Después de un primer intento, al fin veo el fruto del esfuerzo realizado. No sin antes haber tenido que superar una serie de obstáculos (como en tantos otros casos) que fueron desde el aspecto emocional y anímico, hasta lo económico. Sin embargo, debo mencionar que nunca estuve sólo, afortunadamente, siempre hubo alguien quien a través de sus sabios consejos (y en ocasiones a través de sus útiles monedas) me motivará a seguir adelante, cuando las fuerzas del cuerpo, alma y corazón pareciera que me habían abandonado. Gracias a Dios y a ustedes, quienes, desde el primer día en que llegue a la ciudad que se crece para arriba, me tendieron su mano, logré superar esos momentos tan difíciles, en los cuales ni fuerzas, ni ganas, ni mucho menos dinero, ni siquiera salud, tenía. Por esta razón quiero expresar mi infinita gratitud:*

*A Dios por permitirme estar a donde ahora.*

*A mis directores de tesis; Dr. Juan Adrián Reyes Cervantes y Dr. Marcelo del Castillo Mussot, por todo el apoyo recibido y la paciencia para conmigo. Les agradezco también el no haberme hechado a patadas en aquellos momentos en los que salieron a relucir mis nulos conocimientos en materia cuántica, pues cualquiera otra persona, no lo hubiera dudado ni un segundo. De manera especial, gracias Adrián.*

*A mi honorable jurado; Dra. Andrea L. Aburto Espina, Dr. J. Alejandro Reyes Esqueda y Dr. Carlos I. Mendoza Ruíz, quienes leyeron detenidamente este trabajo y me ayudaron a descubrir errores, ambigüedades y frases oscuras y quienes además sugirieron cambios o adiciones. Desde luego, asumo la responsabilidad por algún error que el lector pudiera encontrar. Para ustedes mis más sinceros agradecimientos.*

*A Dr. Gerardo J. Vázquez Fonseca. No olvido el beneficio que logré con sus sugerencias y observaciones. Estoy profundamente agradecido.*

*A mi estimado amigo Dr. Arturo Quintar Isaías, quien en todo momento ha estado pendiente de mi situación académica. Cómo poder pagarle al menos la milésima parte de todo lo que ha hecho por mí. Sé que la culminación de este trabajo, para usted será sin duda alguna motivo de inmensa alegría, por una parte y por otra, creo que he saldado parte de una deuda moral pendiente. Mil gracias Doc.*

*A mis amigos, compañeros de aula; Raúl Velázquez y de cubículo; Luis Felipe Rivera y Hugo Ramírez. Los aprecio mucho.*

*A quien considero mis dos grandes amigos; Esteban Fernández Gárate (El Niño Verde) y Carlos Gabriel Avendaño López (El Signore). Aunque pareciera, que en este mundo, las personas que dan todo por nada han sido especie de extinción, no es así. Quedan muy pocas, pero aún las hay. Gracias por su amistad, gracias por todo. Por lo que son, no dudaría ni un segundo en beber de la copa de Alejandro.*

*A la UNAM, en particular a la Facultad de Ciencias, por haberme formado como físico y al Instituto de Física, por el uso de sus instalaciones.*

*A la DGAPA y CONACYT, por el apoyo económico brindado durante la realización del presente trabajo.*

**ARTRERO.**

*Un día de 2006 de no importa que mes.*

*P.D. No sé, si en este espacio sea válido, desde el punto de vista de las reglas de redacción, pero lo haré; escribiré una posdata. Perdón por omitir los renglones en los cuales, los que agradecen dicen que agradecen a todas y todos, y al final más dicen y aclaran que todas y todos, no son todos, por que faltan algunos y faltan algunos, por que las prisas y en ocasiones la falta de papel, motivo y causa de olvido fueron, para no mencionar a todos. Cómo es posible?.*

# Índice general

0.1. INTRODUCCION . . . . .	I
<b>1. Antecedentes</b>	<b>1</b>
1.1. El rotor rígido (Molécula Doble) . . . . .	2
1.2. El pozo cilíndrico . . . . .	3
1.3. El pozo rectangular . . . . .	7
1.4. Operador de momento . . . . .	10
1.5. Conexión entre el operador de momento radial y el hamiltoniano en coordenadas cilíndricas . . . . .	11
1.6. Armónicos cilíndricos . . . . .	13
<b>2. Planteamiento y solución del problema</b>	<b>16</b>
2.1. Confinamiento de una partícula inmersa en el potencial de un cuadrupo- lo eléctrico en 2D . . . . .	16
<b>3. Análisis y discusión de resultados</b>	<b>30</b>
3.1. Funciones de onda y densidad de probabilidad . . . . .	30
3.2. Cálculo del momento radial . . . . .	40
3.3. Espectro de energías . . . . .	45
<b>4. Conclusiones</b>	<b>48</b>

## 0.1. INTRODUCCION

Se considera una estructura cuántica de baja dimensionalidad a aquel sistema en el cual 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 gobierna el comportamiento en la mecánica cuántica. Por tal razón, éstas se conocen como pozos cuánticos. Si tal confinamiento ocurre en una dirección, dejando libre el movimiento en dos, entonces se tiene un pozo cuántico en dos dimensiones (2D). Cuando el confinamiento, es limitado en dos direcciones, dejándolo libre solamente una, se dice que se trata de un alambre cuántico en una dimensión (1D). Si el movimiento es restringido en las tres direcciones, se genera un punto cuántico o un sistema de cero dimensiones (0D). En todos estos sistemas surgen efectos cuánticos, los cuales predicen que el confinamiento adicional de portadores dota a estas estructuras de propiedades electrónicas diferentes. La idea de que una estructura epitaxial<sup>1</sup> podría llevar a nuevos fenómenos ópticos y electrónicos fue sugerida al final de la década de 1960 por Leo Esaky y Raphael Tsu. Ellos predijeron que los electrones (y huecos) en pozos cuánticos exhiben notables propiedades ópticas y eléctricas que podrían ser controladas variando el espesor de los pozos y la altura de sus barreras [1].

Teóricamente, se puede representar una estructura ideal cuántica, mediante un pozo, un alambre o un punto cuántico, en donde la energía de la partícula confinada se obtiene resolviendo la ecuación de Schrödinger. La densidad de estados electrónicos depende críticamente de la dimensión espacial. Esto tiene una gran influencia sobre la

---

<sup>1</sup>El crecimiento Epitaxial es el proceso fundamental mediante el cual un cristal es formado en una superficie cristalina como el resultado de la depositación de nuevo material sobre esta superficie. El estudio de este proceso es de 150 años atrás, pero no fue hasta el trabajo de Louis Royer en la década de 1920 que el crecimiento Epiaxial sistemático comenzó a lograrse (Royer, 1928). Royer llevó a cabo un extenso estudio del crecimiento de cristales iónicos uno sobre otro y en mica. Royer define el término *Epitaxy*, el cual es una combinación de la palabra Griega *epi*, que significa encima de, y *taxis*, que significa orden, para comunicar la nueva noción de un cristal en crecimiento y cuya orientación es determinada por un sustrato cristalino y para distinguir un crecimiento epitaxial de un crecimiento policristalino y amorfo.

transición entre los diferentes estados de energía, un efecto que puede ser explotado de diferentes formas, sobre todo en propiedades ópticas y electrónicas. Sin embargo, en sistemas reales de baja dimensión, el confinamiento nunca es perfecto. Una restricción del movimiento en  $z$  de un electrón, por ejemplo, sería dentro de un muy pequeño intervalo de  $z$ , pero finito comparable con la longitud de onda de De Broglie del electrón. Este confinamiento imperfecto, resulta en la cuantización de las energías del electrón donde, en general, más de una de tales energías puede ser permitida. Solamente si las condiciones son tales que haya electrones en un solo nivel de energía cuantizado, se tiene uno de los casos ideales mencionados en la dimensión apropiada.

Experimentalmente, una estructura cuántica, puede ser un sustrato semiconductor, con multicapas creciendo epitaxialmente. Actualmente, se preparan multicapas semiconductoras haciéndolo capa por capa atómica, con un estricto control en el envenenamiento por impurezas (dopaje) y composición llegando a construir prácticamente una por una cada capa atómica. También las multicapas pueden ser diseñadas de manera que el tamaño de éstas conste de unas cuantas capas atómicas.

Además del entendimiento de la física básica asociada al estudio de propiedades electrónicas y ópticas de estructuras semiconductoras tales como pozos, alambres y puntos cuánticos, existe también interés debido a su importancia tecnológica, pues dichas estructuras pueden generar dispositivos ópticos y electrónicos que ofrezcan un funcionamiento muy eficiente [2].

En casi todo cuerpo, sustancia o sistema, el comportamiento de sus propiedades varía con la dirección, esto es lo que se conoce como anisotropía. El sistema que aquí se construye, presenta cierta anisotropía para cualquier dependencia en la variable angular, lo cual hace plausible considerar un potencial anisotrópico que origine funciones de onda anisotrópicas cuya densidad de probabilidad esté concentrada en un cierto sector de ángulo. Esto sugiere una manera alternativa de confinar una partícula cargada que puede ser aprovechada para modelar una punta de cantiliver [3], en lugar de usar



directamente un sector con geometría angular. Aquí se eligió considerar un potencial anisotrópico generado por un cuadrupolo eléctrico bidimensional, básicamente por dos razones: primero, es perfectamente separable en la ecuación de Schrödinger lo que permite obtener una solución analítica; segundo, su grado de anisotropía puede ser teóricamente controlado cambiando la intensidad de campo del cuadrupolo.

Este trabajo se ha organizado de la siguiente manera. En el *capítulo 1*, se hace una revisión de algunos conceptos básicos de la mecánica cuántica que se utilizarán en la solución del problema central de este trabajo.

En el *capítulo 2*, se plantea y resuelve el problema de esta investigación, que consiste en calcular las funciones de onda y el espectro de energía, para una partícula dentro de un pozo cilíndrico de paredes rígidas e infinitas, en presencia del potencial generado por un cuadrupolo eléctrico.

El *capítulo 3*, está dedicado a hacer un análisis de los resultados obtenidos y finalmente, en el *capítulo 4*, se presentan las conclusiones.

# Capítulo 1

## Antecedentes

En este capítulo se hace una recopilación de algunos sistemas de confinamiento en pozos cuánticos con paredes infinitas. En particular, se trata el caso del rotor rígido plano [4] y [5], el pozo cilíndrico [4] y el pozo rectangular [6], debido a que sus propiedades ilustran el entendimiento de los conceptos básicos de la mecánica cuántica que gobiernan ciertos sistemas y que además presentan soluciones analíticas

Todos estos sistemas tienen una función de onda real, la cual se asocia con estados estacionarios. Se demuestra que en este caso el valor esperado del momento es nulo. Cuando la función de onda es compleja, se dice que corresponde a estados no ligados y en este caso, el valor esperado del momento no necesariamente es cero.

En esta parte, también se discute la forma del operador de momento radial en coordenadas cilíndricas y la expresión del correspondiente hamiltoniano en términos de éste [7]. Esta discusión es importante, porque se usará más adelante para encontrar aquellos estados cuánticos en los cuales el valor esperado del momento radial es cero, a fin de determinar los estados ligados y cuantizar la energía del sistema.

Además, en esta sección se resuelve la ecuación de Laplace en coordenadas cilíndricas que coincide con una expansión multipolar en dos dimensiones [8].

## 1.1. El rotor rígido (Molécula Doble)

Este sistema está compuesto por dos partículas de masas <sup>2</sup>  $m_1$  y  $m_2$  separadas por una barra sin masa y de longitud  $2a$ . Véase la figura 1.1. El momento de inercia del rotor, el cual gira respecto a su centro de masa en el plano  $x-y$  y alrededor de un eje de rotación  $z$  es  $I = 2ma^2$ . Supóngase que el rotor es colocado muy lejos de algún campo de fuerza, tal que su energía es puramente cinética

$$E = \frac{L_z^2}{2I}, \quad (1.1)$$

de esto se sigue que el Hamiltoniano es

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}_z^2}{2I}, \quad (1.2)$$

en donde se define el operador  $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\phi}$ .

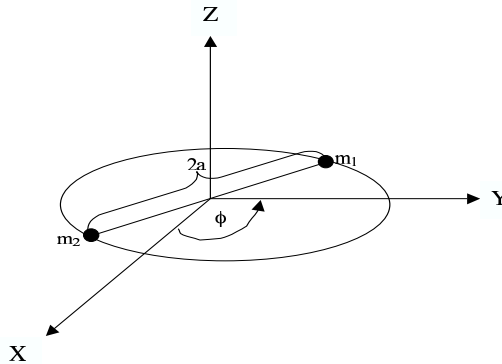


Figura 1.1: Rotor rígido.

---

<sup>2</sup>Las masas que componen este sistema físico, pueden ser un átomo hidrogenoide - es decir, un núcleo y un electrón orbital -, una molécula diatómica, etc [9].

La correspondiente ecuación de Schrödinger, es por lo tanto

$$\left(\frac{\hat{L}_z^2}{2I}\right)\psi = E\psi. \quad (1.3)$$

La ecuación (1.3) describe el movimiento de las dos partículas, el cual se reduce al movimiento de una sola de masa reducida  $m$  [9]. Una condición que se requiere en la función de onda, es que sea monovalente (univaluada), o sea, que haya un solo valor de  $\psi$  para un punto en el espacio en un tiempo dado, es decir, se debe cumplir la condición  $\psi(\phi) = \psi(\phi+2\pi)$ , ya que el ángulo  $\phi$  y  $\phi+2\pi$  describen el mismo punto. Reescribiendo la ecuación (1.3), se llega a

$$\frac{d^2\psi}{d\phi^2} + n^2\psi = 0, \quad (1.4)$$

con  $n^2 = \frac{4ma^2E}{\hbar^2}$ . De esta última expresión, se obtienen los valores permisibles de la energía, dados por

$$E_n = \frac{L_z^2}{2I} = \frac{p_\phi^2}{4ma^2} = \frac{(\hbar n)^2}{2I}, \quad (1.5)$$

en donde  $p_\phi = \hbar n$ ,  $L$  es el momento angular e  $I$  el momento de inercia.

La solución a la ecuación (1.4), es  $\psi(\phi) = Ae^{in\phi}$ ;  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$  y  $A$  es una constante para normalizar la función de onda.

## 1.2. El pozo cilíndrico

Considérese el caso de una partícula de masa  $m$  confinada en un cilindro circular recto (caja de píldoras) de radio  $a$  y altura  $L$ . Véase figura 1.2. Expresado en coordenadas cilíndricas  $(r, \phi, z)$ , el potencial de esta configuración esta dado por

$$V(r, \phi, z) = \begin{cases} 0, & r < a, 0 < z < L \\ \infty, & \text{en cualquier otra parte.} \end{cases} \quad (1.6)$$

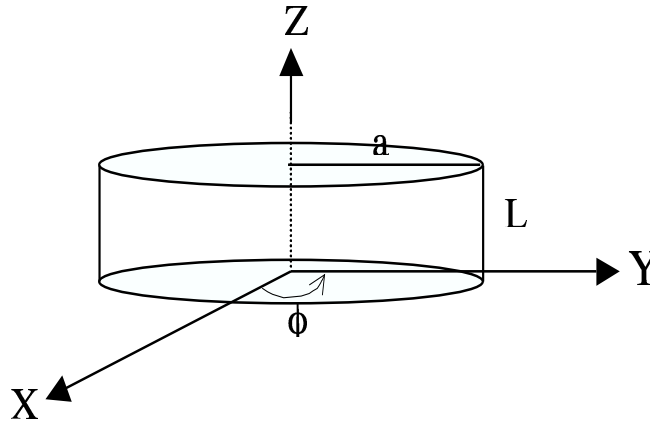


Figura 1.2: Cilindro de píldoras que contiene una partícula cuya energía potencial es nula en su interior e infinita fuera.

La partícula se describe por medio de una función de onda que satisface la ecuación de Schrödinger estacionaria

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (1.7)$$

Dentro del pozo,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r, \phi, z) = E\psi(r, \phi, z), \quad (1.8)$$

donde el Hamiltoniano,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{\hat{p}_\phi^2}{2mr^2}, \quad (1.9)$$

con  $\hat{p}_r^2 = -\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)$ ,  $\hat{p}_z^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}$  y  $\hat{p}_\phi^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$ . Introduciendo la expresión para el Laplaciano en coordenadas cilíndricas, la ecuación de Schrödinger para la partícula confinada está dada por

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + k^2\psi = 0, \quad (1.10)$$

donde

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.11)$$

Con la separación de coordenadas,  $\psi(r, \phi, z) = R(r)\Phi(\phi)Z(z)$ , la ecuación (1.10) se convierte en

$$\frac{1}{R} \left( \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \Phi(\phi)} \frac{\partial \Phi^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + k^2 = 0. \quad (1.12)$$

De esto se sigue,

$$\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -k_z^2, \quad (1.13)$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -\beta^2 \quad (1.14)$$

y

$$\frac{1}{R} (r^2 R'' + rR') + r^2 (k^2 - k_z^2) = \beta^2, \quad (1.15)$$

donde  $k_z$  y  $\beta$  son constantes de separación y una prima denota diferenciación con respecto a  $r$ .

Para satisfacer las condiciones de frontera  $\Psi(z = 0) = \Psi(z = L) = 0$  y  $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$ , es necesario que las soluciones a las ecuaciones (1.13) y (1.14) sean de la forma  $Z(z) = A \sin \frac{\pi n_z z}{L}; n_z = 1, 2, \dots$  y  $\Phi(\phi) = B e^{i\beta\phi}; \beta = 0 \pm 1, \pm 2, \dots$ , siendo  $A$  y  $B$  constantes.

Regresando a (1.15) y renombrando  $k^2 - k_z^2 \equiv K^2$  y  $\rho \equiv Kr$ , resulta

$$\rho^2 R'' + \rho R' + (\rho^2 - \beta^2) R = 0, \quad (1.16)$$

que es conocida como *Ecuación de Bessel*. Las soluciones generales a esta ecuación

son dadas por

$$R(\rho) = C_1 J_\beta(\rho) + C_2 N_\beta(\rho), \quad (1.17)$$

donde  $C_1$  y  $C_2$  son constantes. Las funciones  $J_\beta(\rho)$  y  $N_\beta(\rho)$  son llamadas *funciones de Bessel* y *funciones de Neumann de primera clase*, respectivamente. Como  $N(0) = -\infty$ , entonces  $C_2$  es cero. Por lo tanto, sólo las funciones  $J_\beta(\rho)$  son aceptadas físicamente como soluciones.

La condición de frontera restante toma la forma  $R(r = a) = 0 = C_1 J_\beta(aK)$ . Sea  $\chi_{\beta s}$  el  $s$ -ésimo cero finito de  $J_\beta(\rho)$ , de modo que  $J_\beta(aK_{\beta s}) \equiv J_\beta(\chi_{\beta s}) = 0$ . Una tabla de los primeros ceros de la función de Bessel, se puede encontrar en [10].

De acuerdo con (1.11), la condición  $k_z L = n_z \pi$  y como se definió  $K$  anteriormente, la ecuación para los valores propios de la energía esta dada por

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (K^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ K^2 + \left( \frac{n_z \pi}{L} \right)^2 \right]. \quad (1.18)$$

Con  $\chi_{\beta s} \equiv aK_{\beta s}$ , la ecuación precedente se convierte en

$$E_{\beta s n_z} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{\chi_{\beta s}}{a} \right)^2 + \left( \frac{n_z \pi}{L} \right)^2 \right]. \quad (1.19)$$

Las funciones propias correspondientes son

$$\psi_{\beta s n_z}(r, \phi, z) = A_1 J_m \left( \frac{r \chi_{\beta s}}{a} \right) \sin \left( \frac{\pi n_z z}{L} \right) e^{i\beta \phi}, \quad (1.20)$$

cuya constante de normalización

$$A_1 = \sqrt{\frac{2}{\pi L [a J'_\beta(K_{\beta s} a)]^2}},$$

en donde los tres parámetros de cuantización son enteros,  $\beta \geq 0$ ,  $s > 0$ ,  $n_z \geq 1$ .

### 1.3. El pozo rectangular

Supóngase una partícula en el interior de una caja de potencial de lados  $a$ ,  $b$  y  $c$ , como se muestra en la figura 1.3.

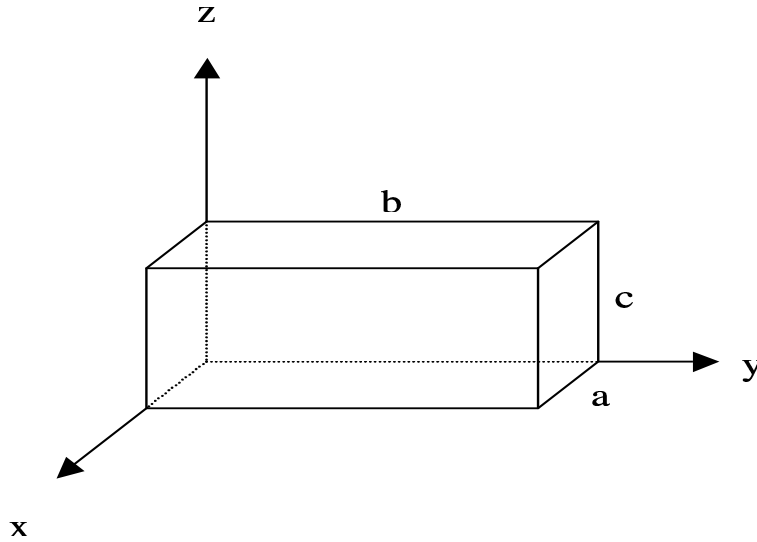


Figura 1.3: Caja que contiene una partícula cuya energía potencial es nula en su interior e infinita fuera de ella.

Para una partícula que se mueve en el espacio, la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z)\psi = E\psi, \quad (1.21)$$

en donde el potencial

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0; & 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c \\ \infty; & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases} \quad (1.22)$$



Para el interior, la ecuación (1.21) se convierte en,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) = E\psi. \quad (1.23)$$

De (1.23) se sigue

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + k^2 \psi = 0, \quad (1.24)$$

en donde se define

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (1.25)$$

Para (1.24) se propone una solución de la forma  $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$ . Por el método de separación de variables, se llega a las siguientes tres ecuaciones diferenciales ordinarias en las componentes  $x$ ,  $y$  y  $z$ ,

$$\frac{d^2 X}{dx^2} + k_x^2 X = 0, \quad (1.26)$$

$$\frac{d^2 Y}{dy^2} + k_y^2 Y = 0 \quad (1.27)$$

y

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} + k_z^2 Z = 0. \quad (1.28)$$

Tomando en cuenta que la función de onda  $\psi$  debe anularse en los bordes del pozo, entonces se pide que  $X(0) = Y(0) = Z(0) = 0$ . Estas condiciones se satisfacen, sólo si se toma la parte senoidal como solución a las ecuaciones anteriores, así

$$X(x) = A \sin(k_x x), \quad (1.29)$$

$$Y(y) = B \sin(k_y y) \quad (1.30)$$

y

$$Z(z) = C \sin(k_z z). \quad (1.31)$$

Donde  $A$ ,  $B$  y  $C$  representan constantes. Se puede ahora evaluar  $k_x$ ,  $k_y$  y  $k_z$ , utilizando las restantes condiciones a la frontera,  $X(a) = 0$ ,  $Y(b) = 0$  y  $Z(c) = 0$ , lo que implica  $k_x a = n_x \pi$ ,  $k_y b = n_y \pi$  y  $k_z c = n_z \pi$ , donde  $n_x$ ,  $n_y$  y  $n_z$  son números enteros.

La solución completa es, por lo tanto,

$$\psi(x, y, z) = N \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{b} \sin \frac{n_z \pi z}{c}, \quad (1.32)$$

donde  $N$ , es la constante de normalización. Tomando en cuenta la condición de normalización  $\int_v |\Psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1$ , se obtiene  $N = \sqrt{\frac{8}{abc}}$ .

De la relación (1.25) se deduce que el espectro de energía es

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{n_x \pi}{a} \right)^2 + \left( \frac{n_y \pi}{b} \right)^2 + \left( \frac{n_z \pi}{c} \right)^2 \right],$$

en donde  $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ . Aquí se tienen tres números de onda independientes,  $k_x$ ,  $k_y$  y  $k_z$ , éstos determinan las componentes del momento:  $p_x^2 = \hbar^2 k_x^2$ ,  $p_y^2 = \hbar^2 k_y^2$  y  $p_z^2 = \hbar^2 k_z^2$ .

Otro caso importante se presenta, cuando la caja de potencial es cúbica, esto es, cuando  $a = b = c$ . Entonces la expresión para las energías posibles se reduce a

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} k^2, \quad (1.33)$$

donde  $k^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$  y las correspondientes funciones de onda son

$$\psi(x, y, z) = N \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{a} \sin \frac{n_z \pi z}{a}. \quad (1.34)$$

Obsérvese que la energía depende sólo de  $k^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$ . Esto significa que todos los estados correspondientes a los enteros  $n_x$ ,  $n_y$  y  $n_z$  que dan el mismo valor

para  $k$  tienen la misma energía. Sin embargo, cuando se alteran los números  $n_x$ ,  $n_y$  y  $n_z$  sin cambiar el valor de  $k$ , la función de onda también cambia. De este modo un cierto nivel de energía puede estar asociado con varias funciones de onda o estados dinámicos. Cuando sucede esto se dice que existe *degeneración* de estados del sistema [11].

En el caso unidimensional, sólo se tiene una componente, por ejemplo, si se considera la dirección en  $x$ , la partícula estaría obligada a moverse dentro de la región  $0 < x < a$ , en donde su energía potencial es nula. En los puntos  $x = 0$  y  $x = a$ , la energía potencial se hace infinita. Esto significa que actúan fuerzas muy intensas en estos puntos, que la obligan a rebotar al chocar con las paredes. En otras palabras, para las regiones ( $x < 0$  y  $x > a$ ), la función de onda  $\Psi \equiv 0$  y su energía potencial  $V = \infty$ , entonces, el problema se reduce al caso de la partícula libre [11]. En este ejemplo, los niveles de energía se reducen a la expresión

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad (1.35)$$

y las funciones de onda normalizadas a

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right). \quad (1.36)$$

## 1.4. Operador de momento

Un resultado importante de la mecánica cuántica es el siguiente: *El valor esperado del momento para una partícula confinada en un sistema cuántico es cero, si la función de onda es real.*

**Demostración:** Sea  $\langle \hat{p} \rangle$  el operador de momento radial, que se define como

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_v \Psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi dv, \quad (1.37)$$

donde  $\Psi^*$  es el conjugado complejo de  $\Psi$ . Dado que  $\hat{p}$  es un operador hermitiano se cumple que

$$\langle \Psi^* | \hat{p} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{p}^\dagger | \Psi^* \rangle, \quad (1.38)$$

para el caso que  $\Psi$  es real

$$\langle \Psi | \hat{p} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{p}^\dagger | \Psi \rangle, \quad (1.39)$$

entonces de la definición (1.37)

$$\int_v \Psi \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi dv = \int_v \Psi \left(-\frac{\hbar}{i}\right) \nabla \Psi dv, \quad (1.40)$$

finalmente de (1.40) se tiene

$$2 \int_v \Psi \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi dv = 0, \quad (1.41)$$

lo que implica  $\langle \hat{p} \rangle = 0$ .

## 1.5. Conexión entre el operador de momento radial y el hamiltoniano en coordenadas cilíndricas

El hamiltoniano de una partícula libre en coordenadas cilíndricas no puede ser expresado en una forma simple usando el operador de momento radial, como sucede en una dimensión ó en coordenadas esféricas.

En mecánica cuántica el operador de momento radial se obtiene por la cuantización de la forma simétrica del momento radial clásico, por ejemplo, en tres dimensiones:

$$p_\rho = \frac{1}{2}(\vec{p} \cdot \hat{\rho} + \hat{\rho} \cdot \vec{p}), \quad (1.42)$$

entonces

$$\hat{p}_\rho = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \right) = -i\hbar \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho. \quad (1.43)$$

En este caso (y en una dimensión) la conexión con el hamiltoniano es

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} = \frac{\hat{p}_\rho^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2m\rho^2}. \quad (1.44)$$

Gil Paz [7], demuestra que en general esto no es cierto, pues la relación (1.44) no es válida en coordenadas cilíndricas.

Si se quiere escribir el hamiltoniano (1.44) en coordenadas cilíndricas y en términos del operador de momentos, éste tiene que ser de la forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_\rho^2}{2m} + \frac{\hat{L}_z}{2m\rho^2} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}. \quad (1.45)$$

La expresión (1.44), indica que (1.45) también se puede escribir como

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m}. \quad (1.46)$$

Sustituyendo en (1.46) el Laplaciano para la parte radial en coordenadas cilíndricas se tiene

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\hat{L}_z}{2m\rho^2} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \right]. \quad (1.47)$$

Por otro lado, si se repite el procedimiento en coordenadas cilíndricas, por la cuantización del momento radial clásico

$$p_\rho = \frac{1}{2}(\vec{p} \cdot \hat{\rho} + \hat{\rho} \cdot \vec{p}), \quad (1.48)$$

se obtiene

$$\hat{p}_\rho = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} \right). \quad (1.49)$$

Por sustitución directa del operador (1.49) en (1.45) se llega a la expresión

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{4\rho^2} \right) + \frac{\hat{L}_z}{2m\rho^2} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}. \quad (1.50)$$

Si se comparan las expresiones (1.47) y (1.50), se nota que

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} \neq \frac{\hat{p}_\rho^2}{2m} + \frac{\hat{L}_z}{2m\rho^2} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}. \quad (1.51)$$

Este hecho generalmente se pasa por alto en textos de mecánica cuántica. Gil Paz [7], propone sumar un término extra de la forma  $\frac{\hbar^2 (n-1)(n-3)}{2m 4\rho^2}$  al Hamiltoniano, para que la conexión entre  $\hat{H}$  y  $\hat{p}$  sea siempre válida en cualquier dimensión. Las relaciones propuestas son,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_\rho^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2m\rho^2} + \frac{\hbar^2 (n-1)(n-3)}{2m 4\rho^2} \quad (1.52)$$

y

$$\hat{p}_\rho = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{n-1}{2\rho} \right). \quad (1.53)$$

Es importante mencionar que estos operadores son autoadjuntos. Para obtener los correspondientes operadores en coordenadas cilíndricas que se usarán en la sección 2.1 del capítulo siguiente, tómesese  $n = 2$  en (1.52) y (1.53) y agréguese el operador de momento en la coordenada  $z$  en (1.52). Para cambiar a una dimensión ó a coordenadas esféricas, basta con escoger  $n = 1$  ó  $n = 3$ , respectivamente.

## 1.6. Armónicos cilíndricos

La ecuación de Laplace  $\nabla^2 \phi = 0$ , escrita en coordenadas cilíndricas  $(\rho, \phi, z)$  es

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = 0. \quad (1.54)$$

Por separación de variables se puede escribir una solución en la forma

$$\Phi(\rho, \phi, z) = R(\rho)Q(\phi)Z(z). \quad (1.55)$$

Sustituyendo (1.55) en la ecuación (1.54) y multiplicando por  $\frac{\rho^2}{\Phi}$ , se llega a

$$\frac{\rho}{R} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{dR}{d\rho} \right) + \frac{\rho^2}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -\frac{1}{Q} \frac{d^2 Q}{d\phi^2}. \quad (1.56)$$

En (1.56) se puede separar el término dependiente en la coordenada  $\phi$  de los términos dependientes en  $\rho$  y  $z$ . Por lo tanto, se pueden igualar ambos lados de la ecuación (1.56) a una constante,  $m^2$ , y obtener

$$\frac{d^2 Q}{d\phi^2} + m^2 Q = 0. \quad (1.57)$$

El lado izquierdo de la ecuación (1.56) ahora puede escribirse como

$$\frac{1}{\rho R} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{dR}{d\rho} \right) - \frac{m^2}{\rho^2} = -\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2}. \quad (1.58)$$

Un caso especial de simetría cilíndrica, se da cuando no hay variación en la dirección  $z$ , en este caso la constante de separación se toma  $k = 0$ . Entonces, la ecuación radial (1.58) se reduce a

$$\rho \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{dR}{d\rho} \right) - m^2 R = 0. \quad (1.59)$$

Para la ecuación (1.59), se propone una solución en series de potencias de la forma  $R(\rho) = A\rho^{\pm m}$  con coeficientes arbitrarios. La solución general es por tanto

$$R_m(\rho) = \begin{cases} A_0 + B_0 \ln \rho, & m = 0 \\ A_m \rho^m + \frac{B_m}{\rho^m}, & m = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \quad (1.60)$$

La solución angular también toma una forma especial para  $m = 0$ , y la solución general de la ecuación (1.57) es

$$Q_m(\phi) = \begin{cases} C_0 + D_0\phi, m = 0 \\ C_m \cos m\phi + D_m \sin m\phi, m = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \quad (1.61)$$

Usualmente se descarta el término  $D_0\phi$  porque no es univaluado con período  $2\pi$ . Por superposición de las expresiones (1.60) y (1.61), se tiene la solución general en coordenadas cilíndricas que no depende de  $z$ :

$$\Phi(\rho, \phi) = A_0 + B_0 \ln \rho + \sum_{m=1}^{\infty} \left[ A_m \rho^m + \frac{B_m}{\rho^m} \right] [C_m \cos m\phi + D_m \sin m\phi]. \quad (1.62)$$

Los términos de la expresión (1.62) se conocen como *armónicos cilíndricos*. En muchas aplicaciones de los armónicos cilíndricos, la simetría de la dependencia angular podría permitir escoger el origen tal que todos los coeficientes  $D_m$  se anulen y el  $i$ -ésimo coeficiente  $C$ , pueda ser absorbido por el  $i$ -ésimo coeficiente  $A$  ó  $B$ . De esta manera,

$$\Phi(\rho, \phi) = A_0 + B_0 \ln \rho + \sum_{m=1}^{\infty} \left( \lambda_m \rho^m \cos m\phi + \lambda'_m \frac{\cos m\phi}{\rho^m} \right). \quad (1.63)$$

Los términos de la serie (1.63) tienen una interpretación física y coinciden con la expansión multipolar en dos dimensiones. El término en el coeficiente  $B_0$  es el potencial de una carga puntual ó un monopolo, si  $m = 1$ , se tiene el potencial de un dipolo y cuando  $m = 2$ , el término corresponde a un cuadrupolo. Los coeficientes de cada término son elegidos de tal forma que satisfagan las condiciones de frontera.



# Capítulo 2

## Planteamiento y solución del problema

Este capítulo contiene la parte original de este trabajo. Aquí, se calculan las funciones propias y los correspondientes valores propios, para un pozo de potencial infinito en una geometría cilíndrica que confina una partícula en presencia de un potencial generado por un cuadrupolo eléctrico.

El estudio se realiza desde un punto de vista cuántico, por lo que el análisis se comienza planteando la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para dicho sistema. Los conceptos del capítulo anterior serán de utilidad en la solución del problema que se plantea.

### 2.1. Confinamiento de una partícula inmersa en el potencial de un cuadrupolo eléctrico en 2D

Considérese una partícula de masa  $m$  confinada en un pozo de potencial cilíndrico con paredes rígidas en las direcciones  $z$ ,  $\rho$  y de coordenada angular  $\phi$ . Para este sistema, las funciones de onda son cero, siempre que  $\rho \geq R_0$  y  $|z| \geq L$ , con  $R_0$  el radio y  $L$  la altura del pozo. En todo el análisis presentado aquí se considerará siempre que  $L \ll R_0$ .

En el centro del pozo, se coloca un cuadrupolo de modo que las cuatro cargas que lo representan están sobre los ejes coordenados a una misma distancia  $\rho$  del origen. Sobre el eje  $Y$ , se colocan dos cargas de signo positivo y las dos restantes con signo negativo sobre el eje  $X$ , como se representa en la figura 2.1. Este potencial en coordenadas polares se define como,

$$V(\rho, \phi) = \begin{cases} C \frac{V(\phi)}{\rho^2}, & \text{para } \rho < R_0 \\ \infty, & \text{para } \rho \geq R_0, \end{cases} \quad (2.1)$$

con  $C$  una constante, que tiene que ver con la magnitud del momento cuadrupolar y  $V(\phi)$  una función que depende de la variable angular.

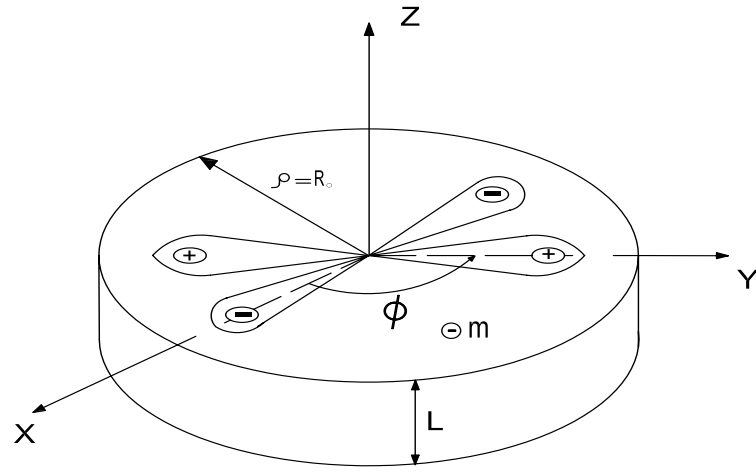


Figura 2.1: Simetría de confinamiento para la partícula (electrón de masa  $m$ ) junto con un cuadrupolo eléctrico.

El Hamiltoniano para esta partícula, escrito en coordenadas cilíndricas  $(\rho, \phi, z)$  y al cual se le ha sumado el término  $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4\rho^2}$  en concordancia con lo discutido en la sección 1.5, es de la forma

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{4\rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\phi, \rho), \quad (2.2)$$

de la cual, se llega a la correspondiente ecuación de Schrödinger de eigenvalores y eigenfunciones

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} - \frac{\Psi}{4\rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) + \frac{CV(\phi)}{\rho^2} \Psi = E\Psi, \quad (2.3)$$

para el interior del pozo, en donde  $E$  es la energía total del sistema. La razón de considerar un potencial de la forma  $\frac{V(\phi)}{\rho^2}$ , es que éste es perfectamente separable en la ecuación de Schrödinger. Si se considera  $V(\phi) = \cos 2\phi$ , entonces se tiene el potencial generado por un cuadrupolo eléctrico como se discutió en la sección 1.6.

La ecuación (2.3), se resuelve por el método de separación de variables que conduce a tres ecuaciones diferenciales ordinarias que describen la dependencia azimutal, angular y radial. Es decir, una solución de la forma  $\Psi(\rho, \phi, z) = R(\rho)\Phi(\phi)Z(z)$  lleva a la ecuación

$$\frac{1}{R} \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \frac{1}{R} \frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} - \frac{1}{4} - \frac{2mC \cos 2\phi}{\hbar^2} \right) + \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dZ^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0. \quad (2.4)$$

En esta última, se hace uso de las constantes de separación  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$  para obtener

$$\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dZ^2} = -\alpha^2, \quad (2.5)$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} - \frac{1}{4} - \frac{2mC \cos 2\phi}{\hbar^2} = -\beta^2 \quad (2.6)$$

y

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left( \gamma^2 - \frac{\beta^2}{\rho^2} \right) R = 0, \quad (2.7)$$

con

$$\gamma^2 = \frac{2mE - \hbar^2 \alpha^2}{\hbar^2}. \quad (2.8)$$

La ecuación (2.5) tiene por solución general  $Z(z) = A \cos \alpha z + B \sin \alpha z$ , siendo  $A$  y  $B$  constantes a determinar. En este caso, la partícula se mueve en la región  $0 < z < L$ , en donde su energía potencial es cero. Sin embargo, la energía potencial es infinita en  $z = 0$  y  $z = L$ . Pensando clásicamente la partícula se mueve libremente hasta que choca con la pared, que la obliga a rebotar [11]. Esta solución indica que la partícula se mueve en ambas direcciones hacia arriba y hacia abajo en la dirección  $z$ , como en el caso de la partícula confinada en una caja de potencial. Ver sección 1.3 del capítulo 1.

De las condiciones de frontera,  $\Psi(z = 0) = \Psi(z = L) = 0$ , se encuentra el valor de  $A$  y  $B$ . En  $z = 0$ ,  $A = 0$ . Cuando  $z = L$ , se tiene  $B \sin \alpha L = 0$ . Si  $B \neq 0$ , entonces  $\sin \alpha L = 0$ , de donde  $\alpha_\lambda = \frac{\lambda\pi}{L}$ , con  $\lambda$  un número entero. Se hace énfasis en escribir  $\alpha_\lambda$ , para resaltar, que para cada  $\lambda$ , se obtiene una  $\alpha$  distinta. Por lo tanto,  $Z(z) = B \sin \frac{\lambda\pi z}{L}$  como en una caja de potencial de altura  $L$ .

Retomando la parte angular y después de reagrupar términos en la ecuación (2.6), se llega a la expresión

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + \left( \beta^2 - \frac{1}{4} - \frac{2mC}{\hbar^2} \cos 2\phi \right) \Phi = 0. \quad (2.9)$$

Definiendo las nuevas constantes,  $a \equiv \beta^2 - \frac{1}{4}$  y  $q \equiv \frac{mC}{\hbar^2}$ , la ecuación (2.9) se transforma en

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + (a - 2q \cos 2\phi) \Phi = 0. \quad (2.10)$$

La expresión (2.10) se conoce como la ecuación de Mathieu, la cual aparece en muchas situaciones físicas que envuelven formas elípticas o potenciales periódicos [12].

Las soluciones para ésta son las funciones de Mathieu que dependen de los parámetros adimensionales  $a$  y  $q$ . Los valores de  $a$  son conocidos como valores característicos de Mathieu. De aquí en adelante, será conveniente separar los valores característicos en dos subconjuntos mayores:  $a = a_r$ , asociados con las soluciones periódicas pares y  $a = b_r$ , asociados con las soluciones periódicas impares, siendo  $r$  un número entero o racional [12].

La ecuación diferencial de Mathieu (2.10), sólo puede ser resuelta numéricamente. En [12], se encuentran soluciones de la forma

$$\Phi(\phi) = Ce_r(\phi, q) + Se_r(\phi, q), \quad (2.11)$$

para diferentes valores de  $a_r$ ,  $b_r$  y  $q$ . Abramowitz [12], utiliza  $Ce_r(\phi, q)$  y  $Se_r(\phi, q)$ , para denotar las funciones de Mathieu pares e impares respectivamente. Las soluciones  $Ce_r(\phi, q)$  son asociadas con  $a_r$ ;  $Se_r(\phi, q)$  son asociadas con  $b_r$ ;  $r$  un entero que puede tomar los valores  $r = 0, 1, 2, \dots$ , para las soluciones pares y  $r = 1, 2, \dots$ , para las impares.

Para el problema que se plantea,  $q$  se puede interpretar como la magnitud de la fuerza o intensidad de campo con que el cuadrupolo está atrayendo a la partícula,  $r$  está asociado con el número cuántico angular y  $a$  como la energía propia asociada a la variable angular  $\phi$ , donde los valores de  $a$  para los cuales  $\Phi$  es periódica son las energías propias del sistema pues  $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$ .

Con ayuda de la gráfica mostrada en la figura 2.2 [12], se puede determinar el valor del número cuántico  $a$  en función de  $q$ . Obsérvese que conforme  $q$  aumenta, los valores propios son negativos. En Abramowitz [12], también se encuentran tablas para diferentes valores de estos parámetros.

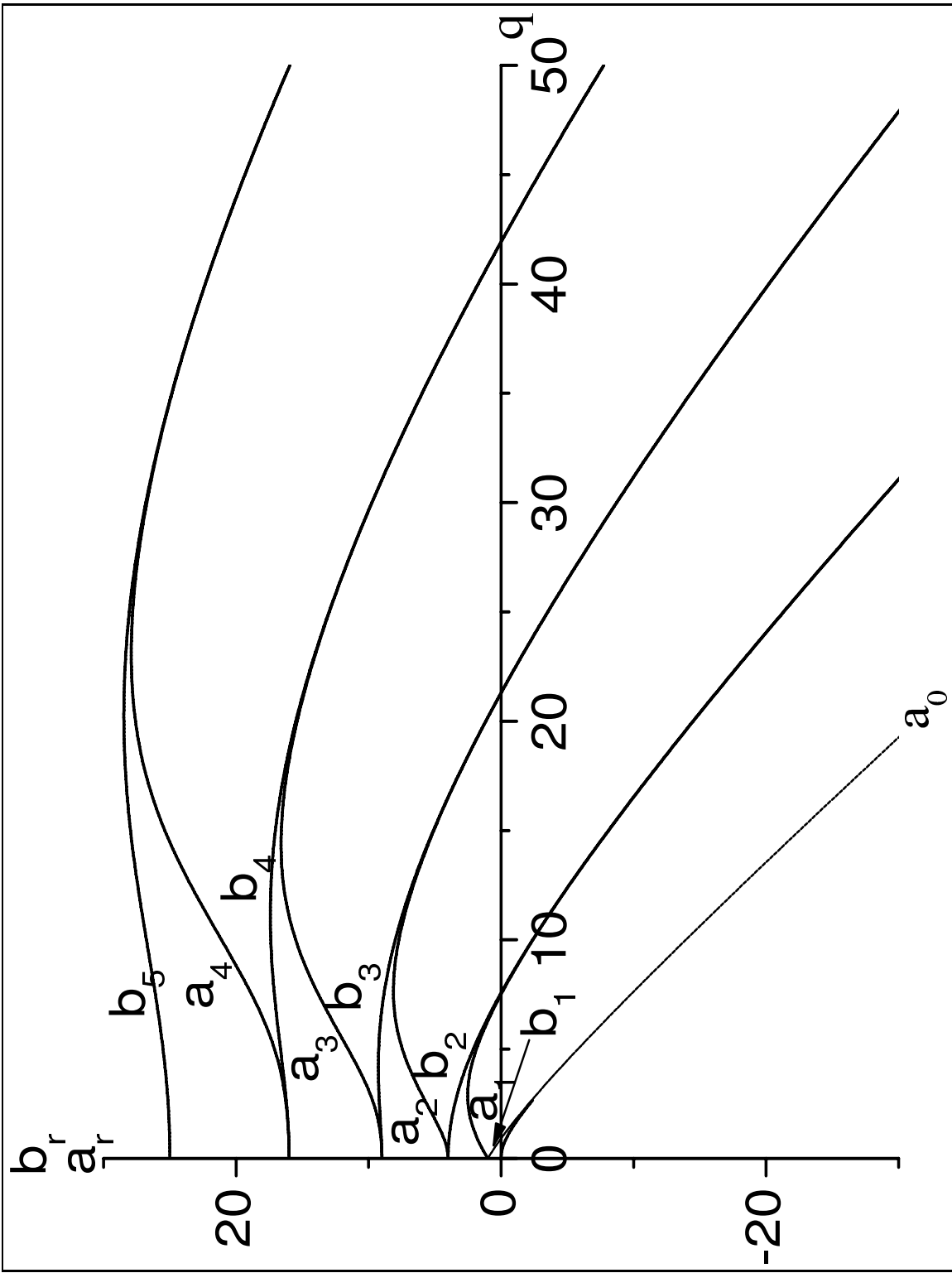


Figura 2.2: Eigenvalores  $a_r(q)$ ,  $b_r(q)$ , para diferentes intensidades del potencial  $q$ . Ambos parámetros son adimensionales.

Un análisis de la gráfica en la figura 2.2, muestra que el intervalo en donde el parámetro  $a$  es positivo, está restringido para los primeros estados aunque se vuelve más amplio para estados más excitados. Es importante mencionar que, para cada uno de estos valores propios, existe una función de Mathieu correspondiente.

Las condiciones de continuidad que deben cumplir la función de onda y su derivada son

$$\Phi(0) = \Phi(2\pi) \quad (2.12)$$

y

$$\frac{d\Phi(0)}{d\phi} = \frac{d\Phi(2\pi)}{d\phi}, \quad (2.13)$$

ya que  $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$  representan el mismo punto físico.

Se muestra en la teoría de ecuaciones de Mathieu [13] que, para  $q \neq 0$  las funciones de Mathieu son solamente periódicas en  $\phi$  para ciertos valores de  $a$ . Para satisfacer las condiciones de periodicidad (2.12) y (2.13), basta tomar el exponente característico  $r$  entero o racional en las ecuaciones (2.11).

Regresando a la parte radial, se deduce de la relación  $\beta = \sqrt{a + \frac{1}{4}}$  que cuando  $a < -\frac{1}{4}$ , el valor de  $\beta$  se vuelve imaginario. Entonces, la ecuación (2.7) toma la forma,

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left( \gamma^2 + \frac{\beta^2}{\rho^2} \right) R = 0, \quad (2.14)$$

como se verifica si se cambia  $\beta \rightarrow \beta i$ . La expresión (2.14), es conocida como ecuación de *Bessel de orden complejo*. Entonces, existen dos tipos de ecuaciones para la parte radial tomando en cuenta el valor de  $a$ .

Considérese la ecuación (2.7) para  $a \geq -\frac{1}{4}$ , en este caso la solución es

$$R(\rho) = C_1 J_\beta(\gamma\rho) + C_2 N_\beta(\gamma\rho), \quad (2.15)$$

donde  $C_1$  y  $C_2$  son constantes. Como antes  $J_\beta(\gamma\rho)$  y  $N_\beta(\gamma\rho)$ , son las funciones de Bessel y de Neumann, respectivamente.

Las condiciones de frontera, requieren que la solución sea finita cerca del origen, esto excluye automáticamente  $N_\beta$ , puesto que ahí diverge. Por tanto, la solución se limita únicamente a la solución regular lo que impone  $C_2 = 0$ .

La función de onda  $\Psi$  tienen que anularse en las paredes del sistema (bordes del pozo), es decir, se deben cumplir las condiciones de contorno,

$$\Psi(\rho = R_0) = 0 \text{ y } \Psi(\rho = 0) < \infty. \quad (2.16)$$

De la condición  $\Psi(R_0) = 0$ , el espectro de las energías permitidas se determina por los valores de  $R_0$  que resuelven las ecuaciones trascendentes  $J_\beta(\gamma R_0) = 0$ , con  $\chi_{\beta s} = \gamma_{\beta s} R_0$ , donde  $\chi_{\beta s}$  es el  $s$ -ésimo cero de  $J_\beta$ . De esta manera, se tiene la solución  $R(\rho) = C_1 J_\beta(\gamma\rho) = C_1 J_\beta(\frac{\chi_{\beta s} \rho}{R_0})$ .

Para la ecuación (2.14), se tiene la solución  $R(\rho) = C_3 J_{\beta i}(\frac{\chi_{\beta i s} \rho}{R_0}) + C_4 N_{\beta i}(\frac{\chi_{\beta i s} \rho}{R_0})$ , donde  $C_3$  y  $C_4$ , son constantes. Es importante mencionar que para satisfacer la condición de frontera dada por la ecuación (2.16), basta con escoger

$$\frac{C_3}{C_4} = -\frac{N_{\beta i}(\chi_{\beta i s})}{J_{\beta i}(\chi_{\beta i s})}. \quad (2.17)$$

En contraste con lo que ocurre cuando el orden de las funciones de Bessel y Neumann es real, ahora cualquier valor de  $\chi_{\beta s}$  satisface la condición de frontera. Por tanto dicha condición no restringe los valores que pueda tomar  $\chi_{\beta s}$ .



Desarrollando en series las funciones de Bessel y de Neumann alrededor del origen ( $\rho = 0$ ) se encuentra que, a primer orden y cuando el índice es complejo ( $a < -\frac{1}{4}$ ), estas funciones van como

$$\left. \begin{array}{l} J_{\beta i} \\ N_{\beta i} \end{array} \right\} \approx \frac{\cos(\beta \ln x) \pm i \sin(\beta \ln x)}{(\beta i)!}, \quad (2.18)$$

donde ! denota la función factorial. Ninguna de ellas está definida en el origen. Véase más adelante figura 3.14. Sin embargo  $|R(\rho)|^2$  de ambas funciones sí tiene un valor bien definido, como se puede observar en las gráficas de las figuras 2.3, 2.4 y 2.5.

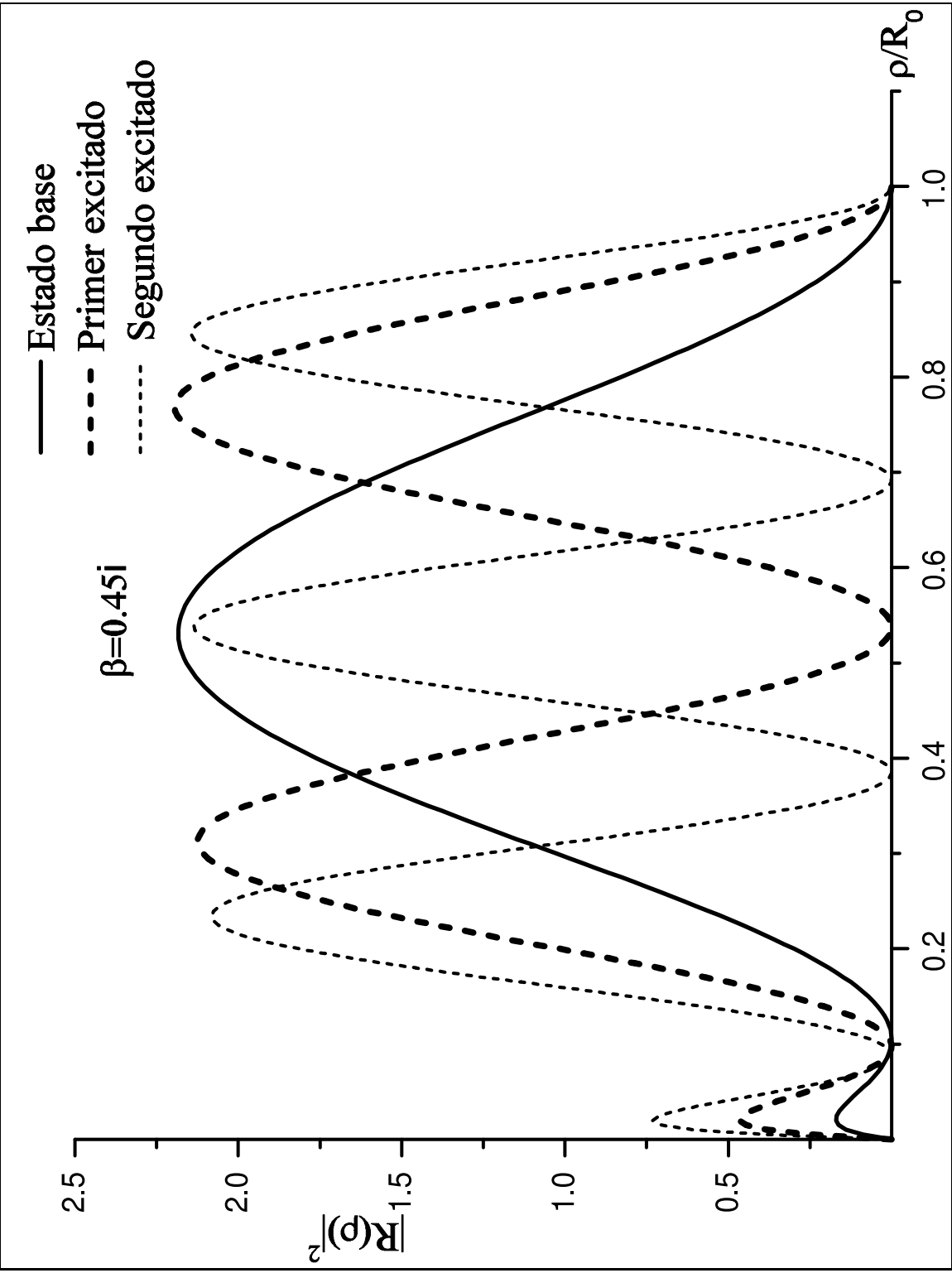


Figura 2.3: Densidad de probabilidad en la parte radial, para los primeros tres estados cuánticos con  $\beta = 0.45i$ . Aquí  $\bar{\rho} = \frac{\rho}{R_0}$ .

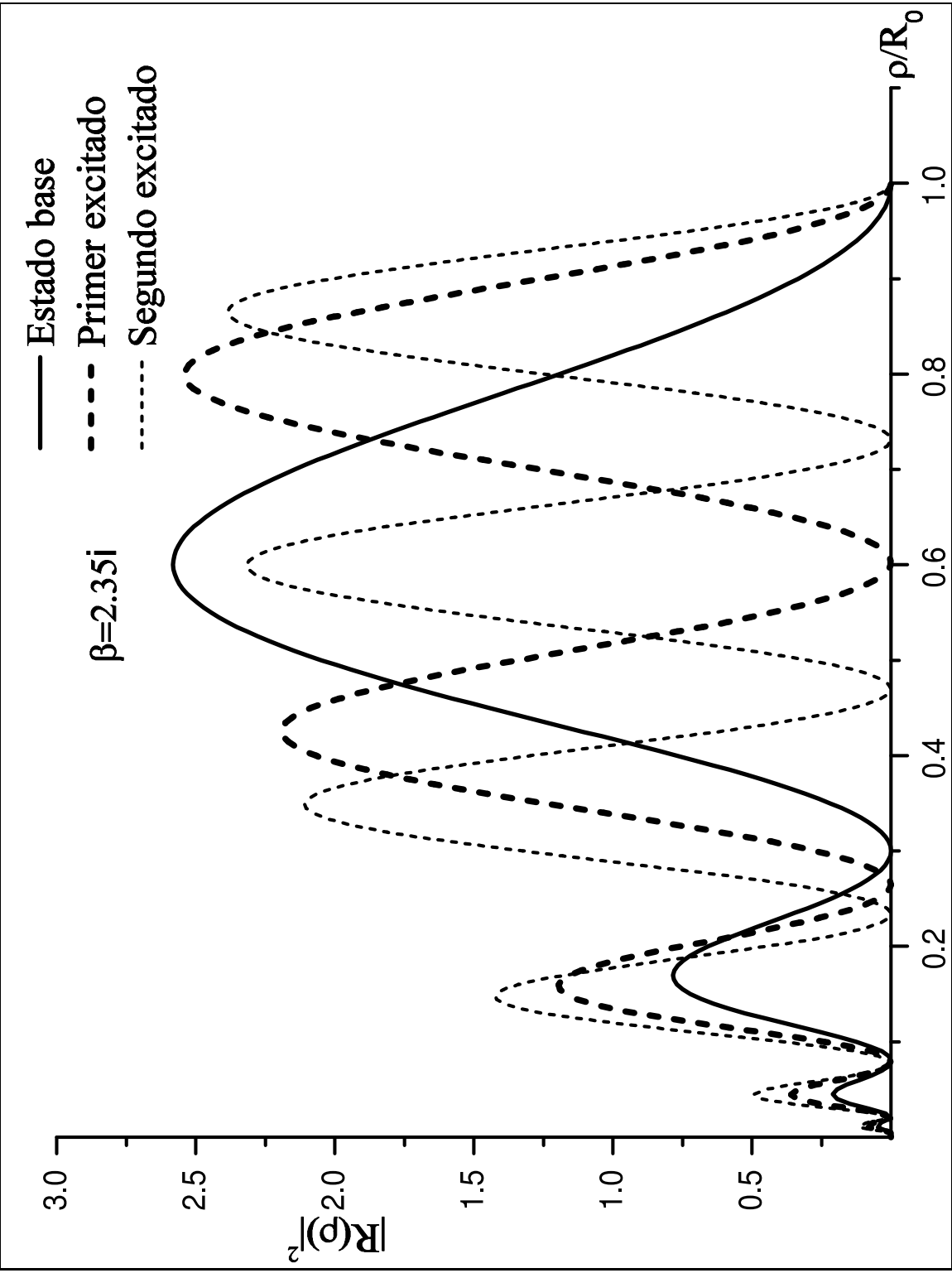


Figura 2.4: Densidad de probabilidad en la parte radial, para los primeros tres estados cuánticos con  $\beta = 2.35i$ . Aquí  $\bar{\rho} = \frac{\rho}{R_0}$ .

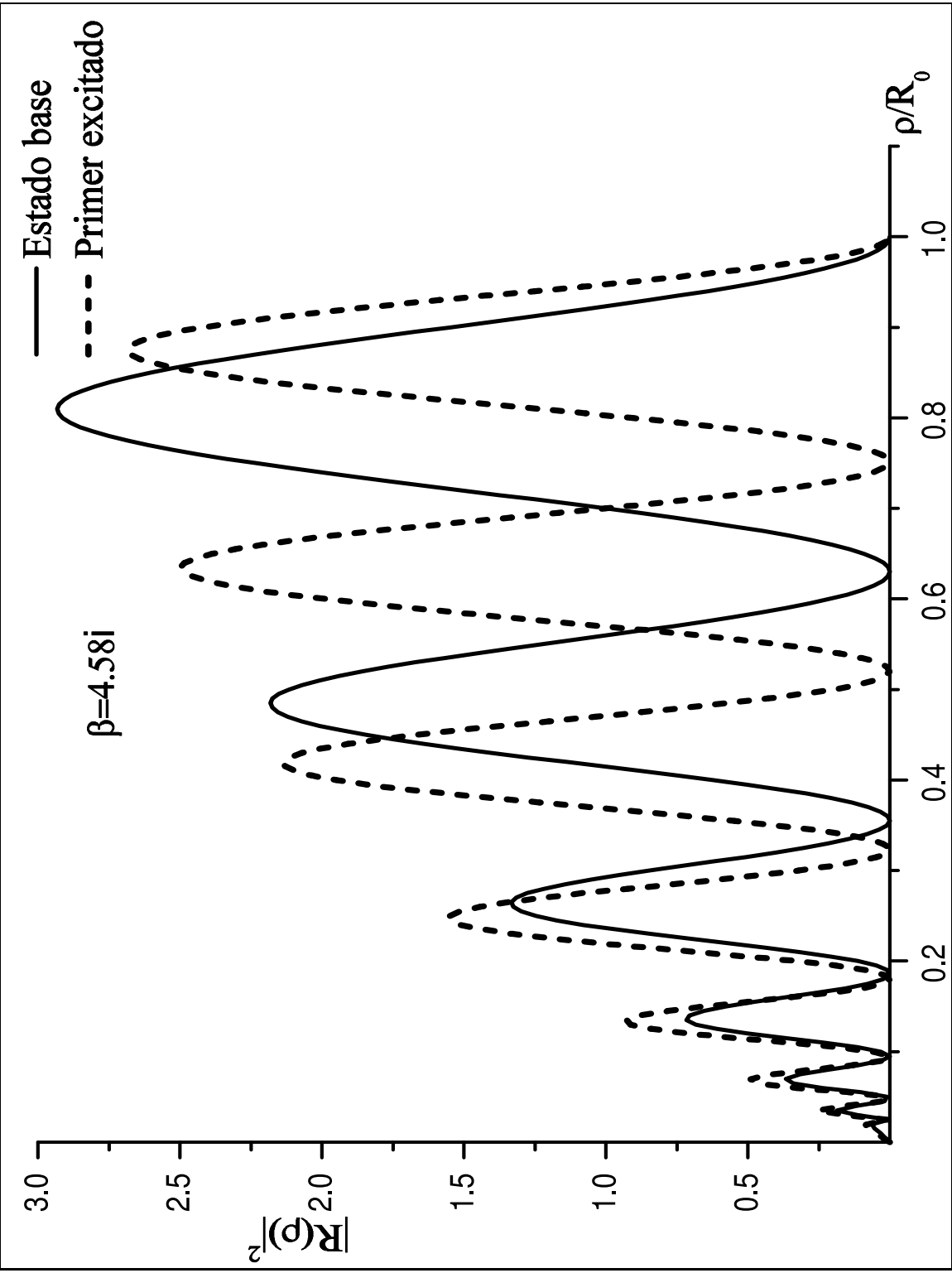


Figura 2.5: Densidad de probabilidad en la parte radial, para los primeros dos estados cuánticos con  $\beta = 4.58i$ . Aquí  $\bar{\rho} = \frac{\rho}{R_0}$ .

Las gráficas de las figuras 2.3, 2.4 y 2.5, ilustran la distribución de probabilidad radial, para los tres primeros estados cuánticos con distintos valores del parámetro  $\beta$ . Nótese que para valores pequeños de  $\beta$ , las funciones de probabilidad exhiben el número de oscilaciones correspondiente al orden del estado cuántico. Mientras que para valores más grandes de  $\beta$ , oscilaciones adicionales de amplitud menor aparecen cerca del origen. Por otra parte, mientras  $\beta$  se incrementa aún más, el número de oscilaciones también se incrementa, llevando a perfiles con mucho más oscilaciones, para los cuales apenas puede distinguirse entre las curvas de cada estado diferente, incluso para el estado base y el primer estado excitado. Esto se puede comprender, si se escribe el hamiltoniano (2.2) en la siguiente forma

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V = \frac{\hat{p}_\rho^2}{2m} + \frac{\hat{H}_\phi}{\rho^2} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}, \quad (2.19)$$

donde se define

$$\hat{H}_\phi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\phi^2} + f(\phi); \quad (2.20)$$

$$f(\phi) = C \cos 2\phi \text{ y } \hat{p}_z = -i\hbar \frac{d}{dz}.$$

De (2.19) se sigue que la ecuación de Schrödinger para la parte radial y angular puede escribirse como

$$\hat{H}\Psi = \frac{\hat{p}_\rho^2}{2m}\Psi + \frac{\hat{H}_\phi}{\rho^2}\Psi = E\Psi. \quad (2.21)$$

De la ecuación (2.10) se sabe que  $\Psi$  también satisface

$$\hat{H}_\phi\Psi = \frac{\hbar^2 a}{2m}\Psi. \quad (2.22)$$

Por sustitución directa de (2.22) en (2.21), se obtiene

$$\frac{\hat{p}_\rho^2}{2m}R = \left( E - \frac{\hbar^2 a}{2m\rho^2} \right) R, \quad (2.23)$$

recuérdese que  $a = \beta^2 - \frac{1}{4}$ .

Por lo tanto, para valores negativos muy grandes de  $a$ , la energía de enlace  $E_e$  asociada con  $R$ , puede escribirse de la siguiente manera,

$$E_e = E + (\hbar^2 a / 2m\rho^2). \quad (2.24)$$

Nótese de la ecuación (2.24), que cuando  $\rho$  es muy pequeña, este potencial no es despreciable, lo que ocasiona que cada estado tenga una energía adicional que se refleja en el número de oscilaciones, por esta razón el estado base por ejemplo, se ve como si se tratara de un estado excitado. Lo mismo sucede para estados subsecuentes. Esta interpretación puede explicar porque aparecen muchas oscilaciones cerca del origen aún para el estado más bajo.

Realizando los cambios de variable a variables adimensionales  $\bar{\rho} = \frac{\rho}{R_0}$  y  $\bar{z} = \frac{z}{L}$ , finalmente, la función de onda asociada  $\Psi(\bar{\rho}, \phi, \bar{z})$  se escribe como,

$$\Psi(\bar{\rho}, \phi, \bar{z})_{\chi_{\beta s \lambda}} = N \sin \lambda \pi \bar{z} \Phi(\phi) \begin{cases} J_{\beta}(\chi_{\beta s} \bar{\rho}), a \geq -\frac{1}{4} \\ J_{\beta i}(\chi_{\beta i s} \bar{\rho}) + C_4 N_{\beta i}(\chi_{\beta i s} \bar{\rho}), a < -\frac{1}{4}. \end{cases} \quad (2.25)$$

Donde  $N$  es una constante de normalización,  $s = 1, 2, 3 \dots$ ,  $\lambda = 1, 2, 3, \dots$  y  $\beta$  real o imaginario, son los parámetros de cuantización.

A partir de la ecuación (2.8), se encuentra que los valores propios correspondientes, dependen del número cuántico azimutal  $\lambda$  y de las raíces  $\chi_{\beta s}$  de la parte radial, así como de las dimensiones, es decir, la altura  $L$  y el radio del pozo  $R_0$ . Éstos se relacionan mediante la expresión

$$E_{\chi_{\beta s \lambda}} = \frac{\hbar^2(\alpha^2 + \gamma^2)}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{\lambda \pi}{L} \right)^2 + \left( \frac{\chi_{\beta s}}{R_0} \right)^2 \right], \quad (2.26)$$

en donde hasta ahora,  $\chi_{\beta s}$  puede tomar cualquier valor real y  $\lambda = 1, 2, 3, \dots$ .

# Capítulo 3

## Análisis y discusión de resultados

El objetivo fundamental de este capítulo, es analizar e ilustrar los resultados obtenidos. La discusión se centra en la forma de las funciones de onda y sus respectivas densidades de probabilidad, así como en el cálculo del momento radial y del espectro de energías.

### 3.1. Funciones de onda y densidad de probabilidad

Ya que el interés está en la localización espacial de la partícula, específicamente en la dirección angular, se promedia la función de onda  $\Psi$  en todo un ciclo de su movimiento en esta dirección. Fijando un valor del parámetro  $q$  y tomando  $r = 0$ ,  $r = 1$  y  $r = 1^3$  que representan el estado base, primer y segundo excitado, respectivamente; se encuentra un valor característico de la energía  $a_r(q)$  ó  $b_r(q)$ , como se explicó anteriormente. Ver gráfica 2.2. Introduciendo estos valores en las ecuaciones (2.11), se obtienen las gráficas 3.1, 3.2 y 3.3, que representan las funciones de onda normalizadas para los tres primeros estados estacionarios. En éstas, se observa como la concavidad de la curva crece o decrece en función del parámetro  $q$ . En otras palabras, se puede decir que la anisotropía del sistema es controlada con la intensidad de campo  $q$  del cuadrupolo.

---

<sup>3</sup>El hecho de tomar  $r = 1$  para ambos estados primero y segundo, podría traer confusión, sin embargo debe notarse que  $r = 1$ , se utiliza para funciones pares e impares. Notación tomada de Abramowitz [12].

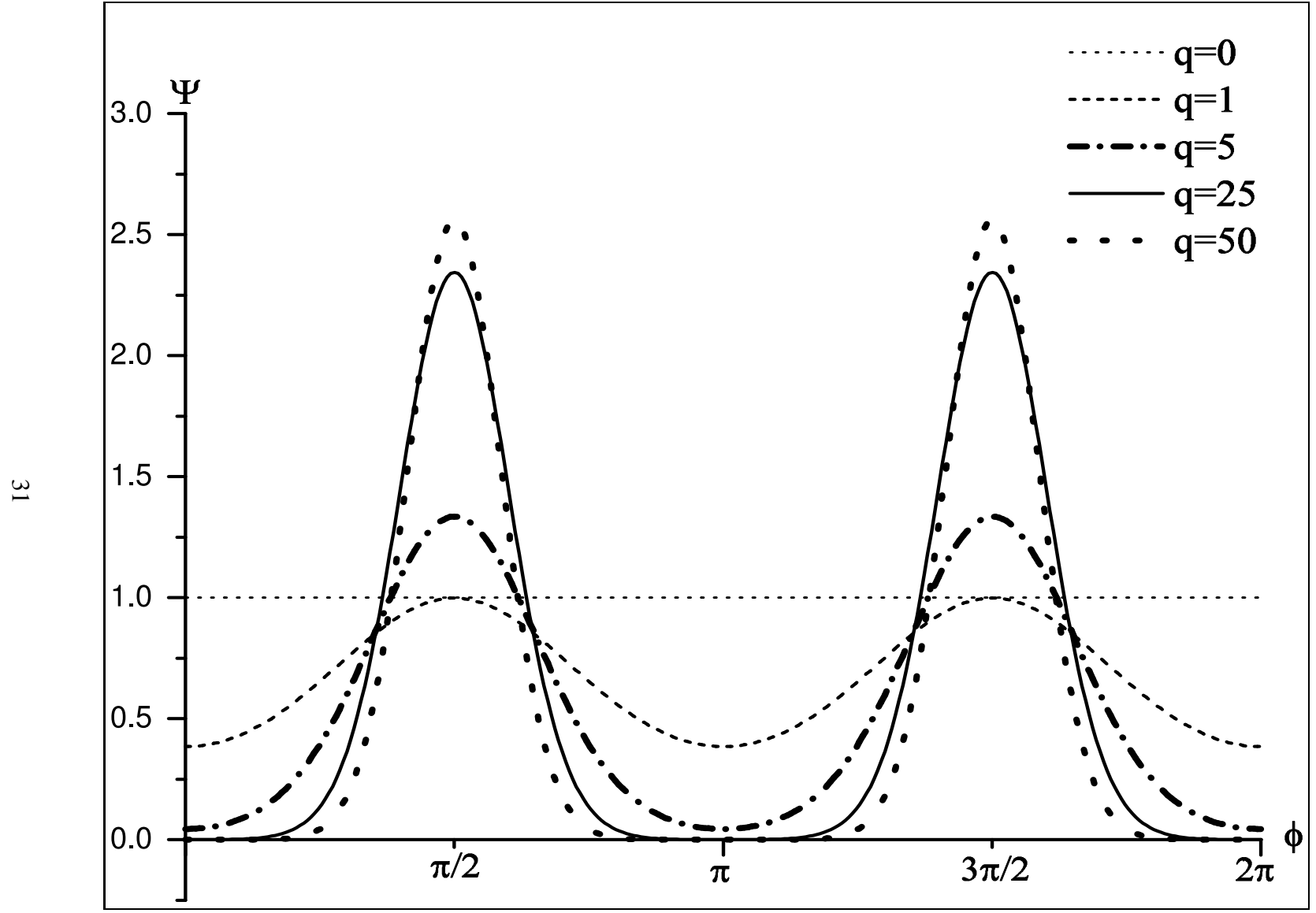


Figura 3.1: Función de onda correspondiente al estado base, para distintos valores de  $q$ .



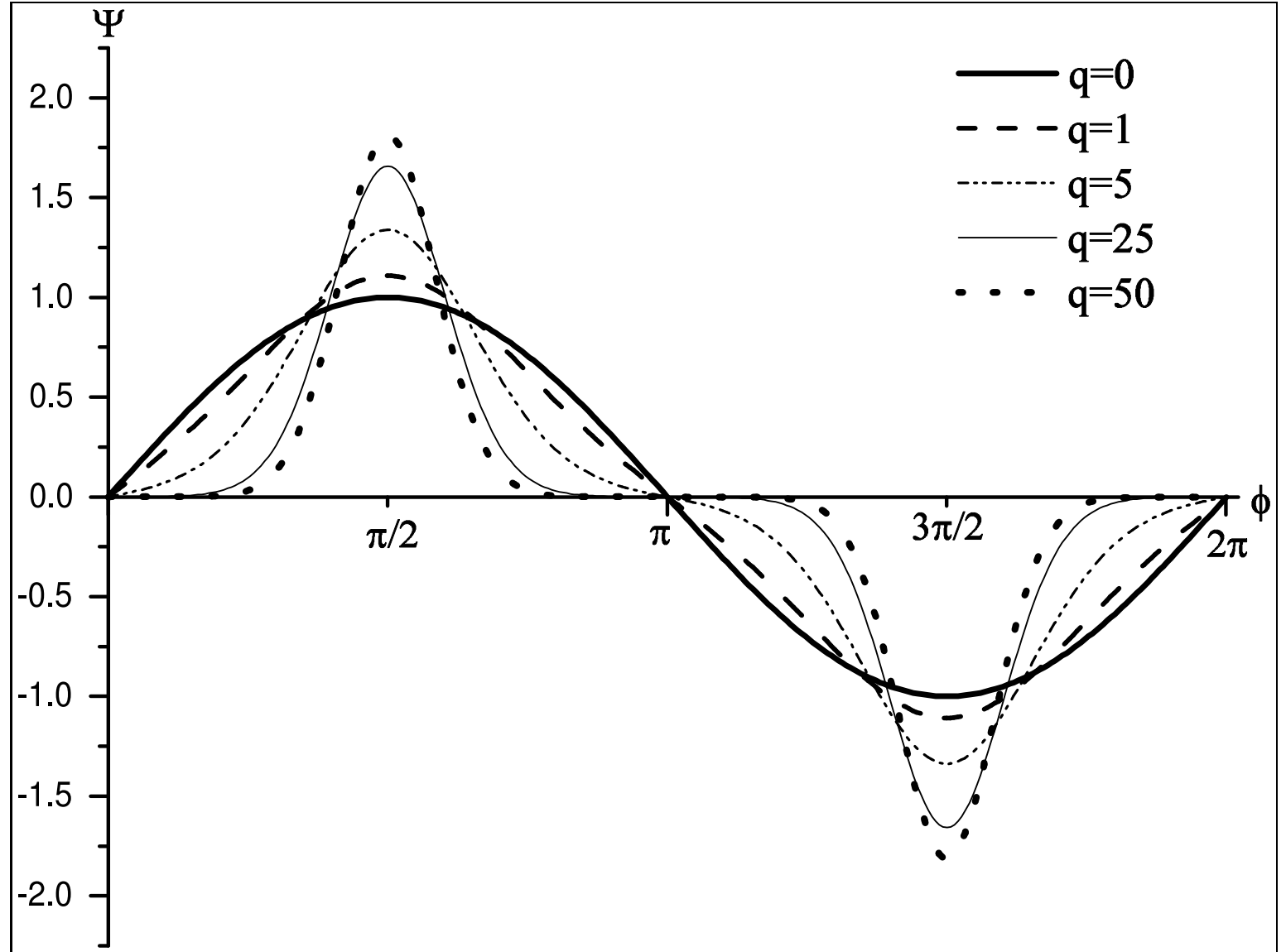


Figura 3.2: Función de onda correspondiente al primer estado excitado, para diferentes valores de  $q$ .

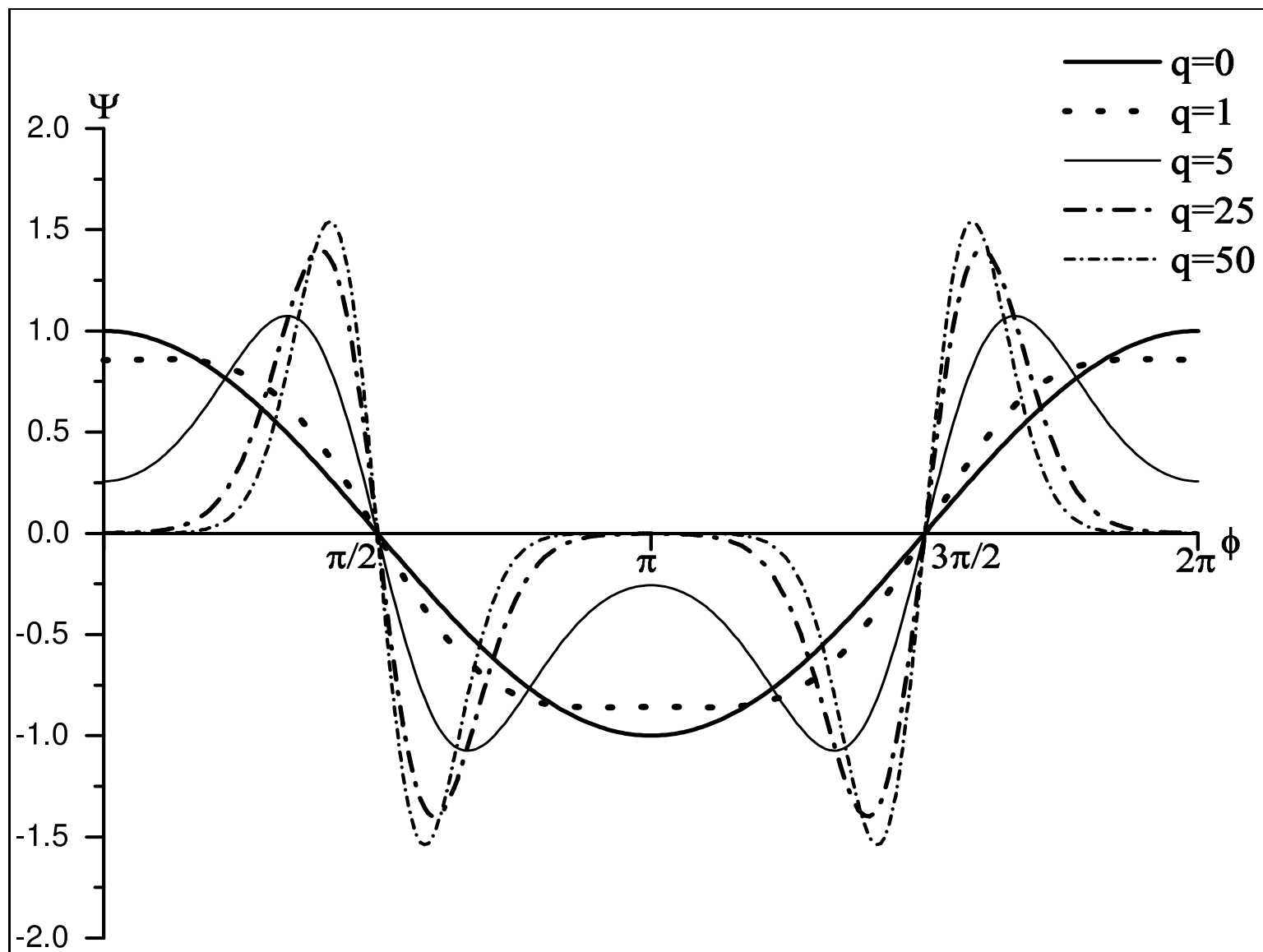


Figura 3.3: Función de onda correspondiente al segundo estado excitado, para diferentes valores de  $q$ .

En el caso particular cuando  $q = 0$  no existe cuadrupolo y por lo tanto, la ecuación (2.10), se reduce a  $\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + a\Phi = 0$ , cuyas soluciones son  $\sin(\sqrt{a}\phi)$  y  $\cos(\sqrt{a}\phi)$ . Las funciones de onda están representadas en la figura 3.4. En éstas, se puede ver que el estado base es una línea horizontal, mientras que el primer estado excitado está modulado por una función *Seno* y el segundo por una función *Coseno*, dentro de la región de 0 a  $2\pi$ . Esto concuerda con el caso del rotor rígido, en el cual se tienen estados degenerados.

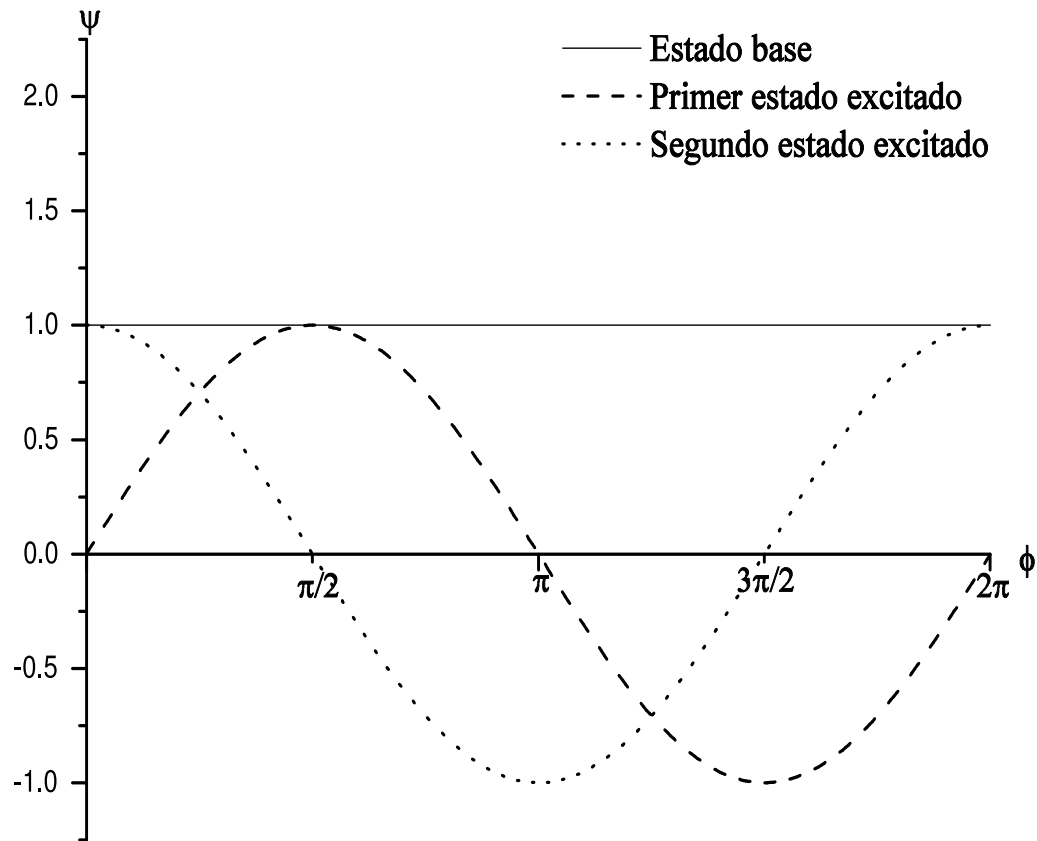


Figura 3.4: Función de onda de los tres primeros estados del sistema para  $q = 0$ .

Al tomar la solución completa de la función de onda  $\Psi$ , recuérdese que para ciertos valores del parámetro  $a$ , la función se vuelve compleja en la parte radial. En este caso, no es fácil graficar las funciones de onda  $\Psi$  correspondientes. No obstante, se pueden graficar las densidades de probabilidad. Partiendo de la ecuación (2.25), se grafica la densidad de probabilidad en 3D que corresponde al segundo estado excitado, esto sólo con el objetivo de ilustrar la situación. La gráfica obtenida se muestra en la figura 3.5, para generarla, se tomó un cero arbitrario  $\chi_{\beta s}$ , sin embargo, se recalca el hecho de que éste no es el primero y por lo tanto, no corresponde al estado de energía más bajo. Véase cuadro 3.1. También se fijó  $\bar{z} = \bar{\rho} = 0.7$ .

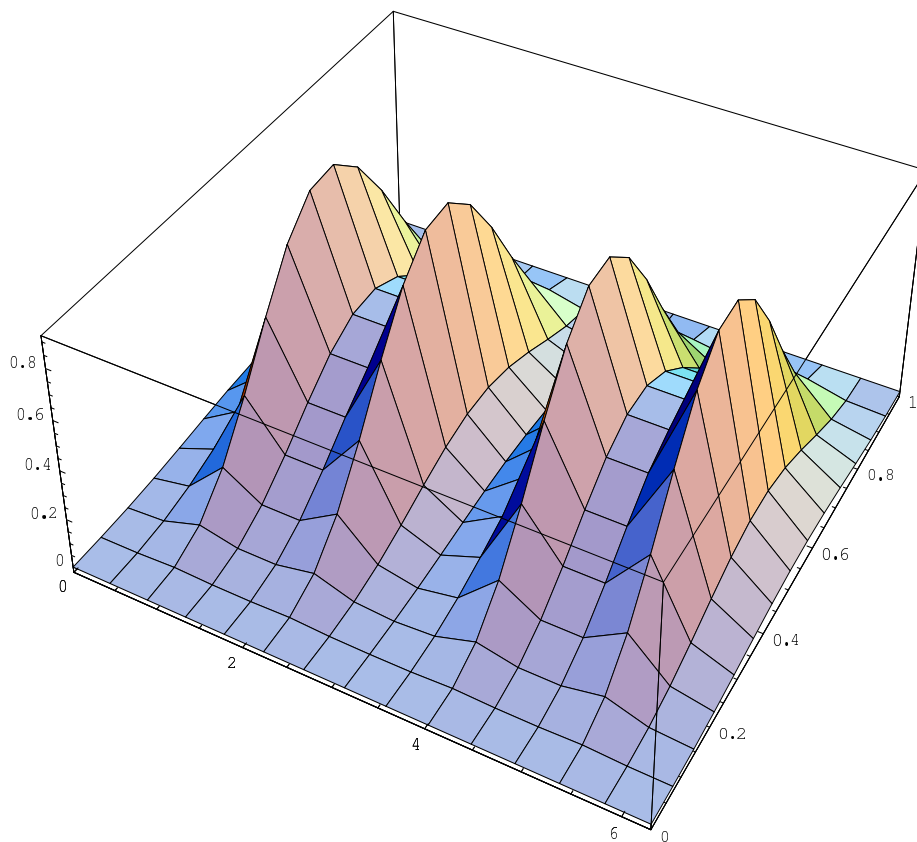


Figura 3.5: Densidad de probabilidad en 3D, para el segundo estado excitado.

Note que si se realizan cortes a  $\bar{\rho} = cte$  en la gráfica de la figura 3.5, se obtienen gráficas semejantes a las representadas en la figura 3.8. Algo análogo ocurre para los dos estados restantes. Las gráficas de las figuras 3.6 y 3.7, representan las respectivas densidades de probabilidad asociadas a los estados base y primer excitado. En éstas, se deduce que la posibilidad de encontrar a la partícula dentro de la región de confinamiento, es más probable en la dirección paralela al eje  $Y$ , es decir, la probabilidad se encuentra distribuida, sobre las líneas de campo ubicadas a lo largo de este eje, alcanzando su máximo en  $\frac{\pi}{2}$  y  $\frac{3\pi}{2}$ . En relación al segundo estado en la figura 3.8, se observa como la partícula se confina más en la dirección perpendicular al eje  $Y$ , aunque esto sólo ocurra para intensidades pequeñas en el campo del cuadrupolo, pues a medida que la intensidad aumenta, la probabilidad se concentra hacia la región paralela a  $Y$ .

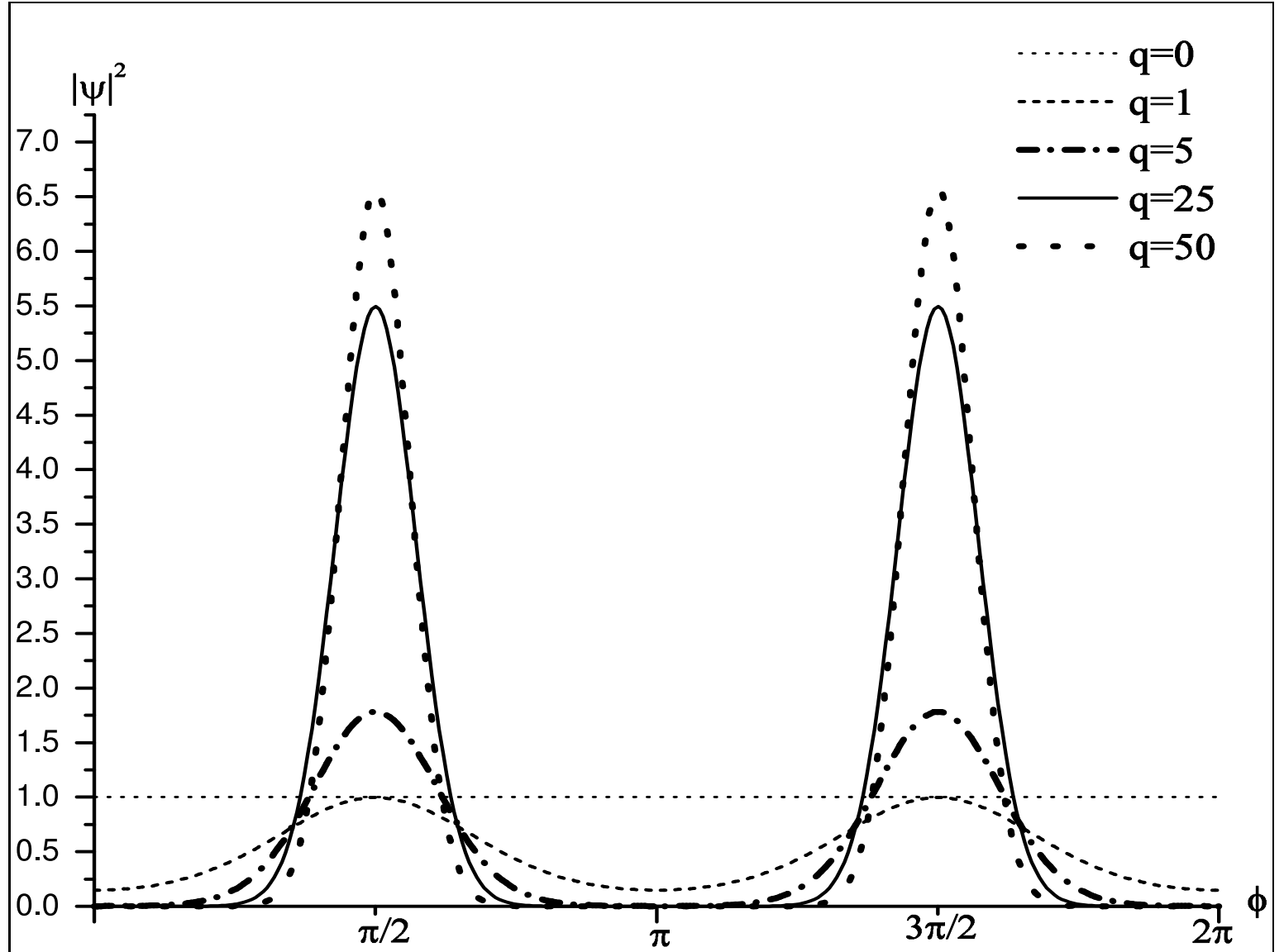


Figura 3.6: Densidad de probabilidad correspondiente al estado base, para distintos valores de  $q$ .

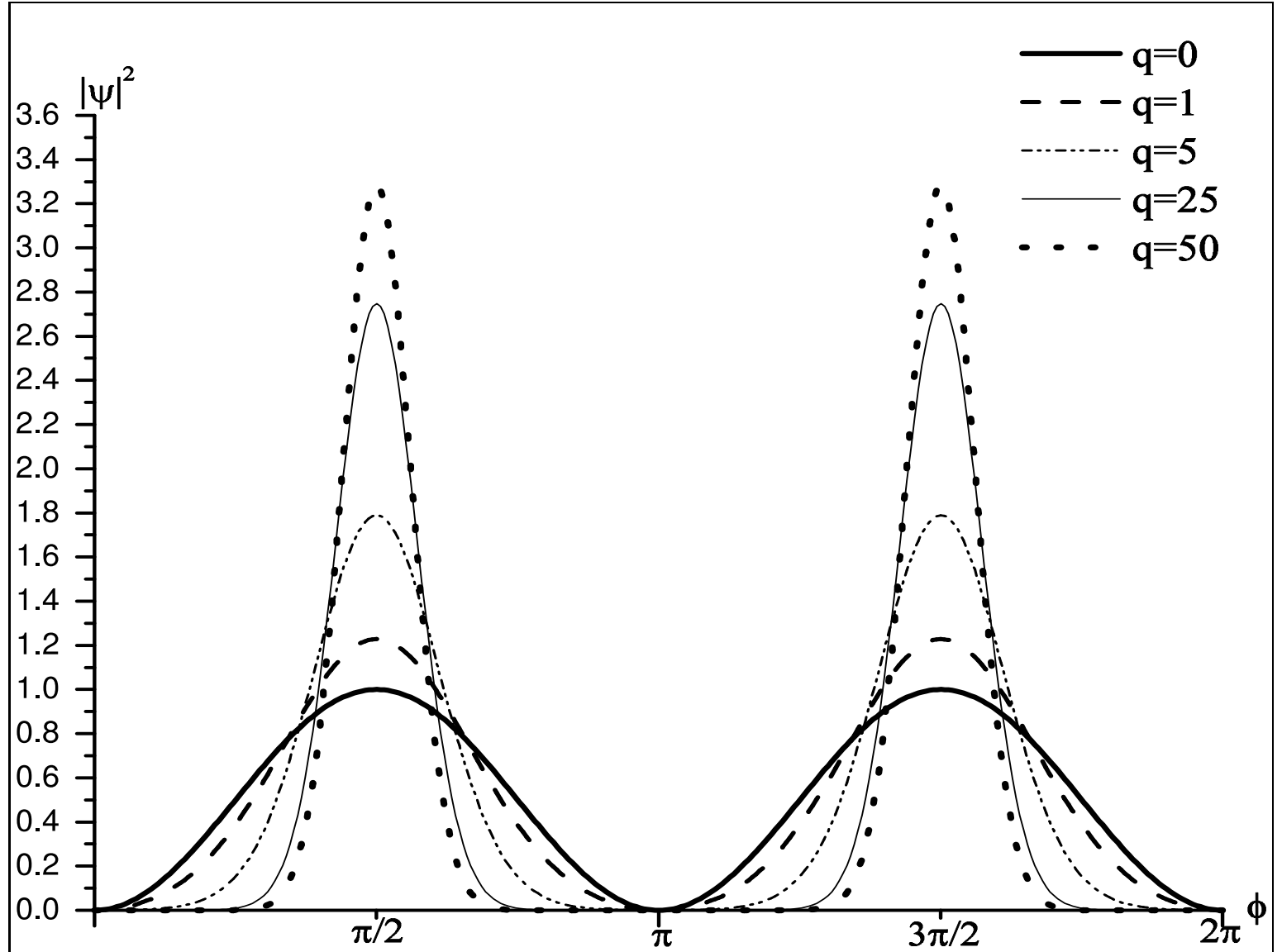


Figura 3.7: Densidad de probabilidad correspondiente al primer estado excitado, para distintos valores de  $q$ .

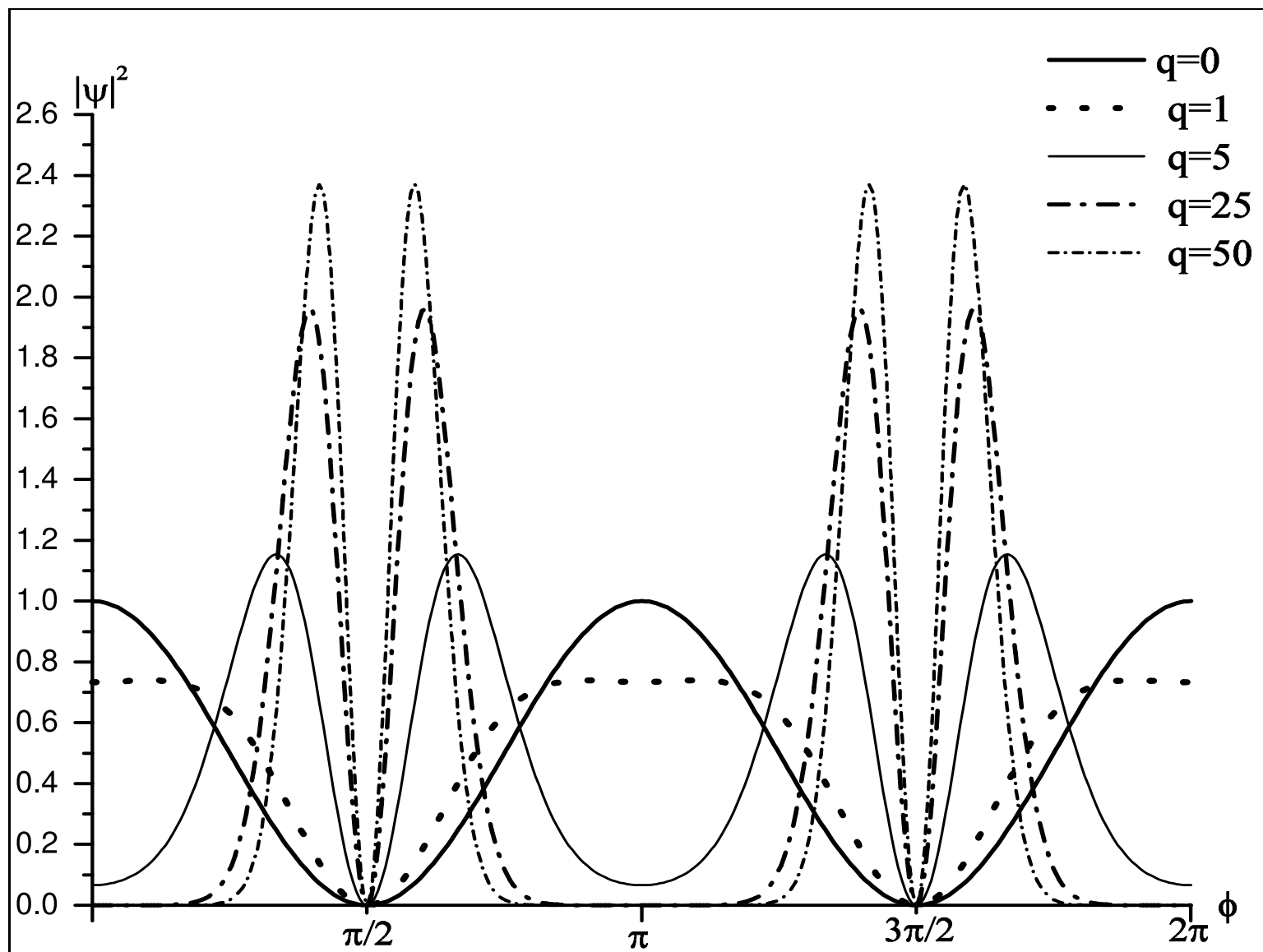


Figura 3.8: Densidad de probabilidad correspondiente al segundo estado excitado, para distintos valores de  $q$ .



### 3.2. Cálculo del momento radial

Recuérdese que para valores grandes de  $q$ , el valor de las energías propias  $a$  ( $a_r(q)$  ó  $b_r(q)$ ), toma valores negativos y que por lo tanto, cuando  $a < -\frac{1}{4}$ , el orden  $\beta$  de las funciones de Bessel en la dependencia radial, se vuelve imaginario.

El hecho de que la función de onda radial sea compleja, hace que el valor esperado de  $\langle \hat{p}_{\bar{\rho}} \rangle$  no sea necesariamente cero, como en el caso para cuando la función de onda es real, como se demostró en la sección 1.4.

En efecto si,  $\langle \hat{p}_{\bar{\rho}} \rangle$ , el valor esperado del momento lineal de la partícula, está dado por

$$\langle \hat{p}_{\bar{\rho}} \rangle = \int_v \Psi^* \hat{p}_{\bar{\rho}} \Psi dv, \quad (3.1)$$

en donde el operador de momento lineal es el definido en la sección 1.5, con  $n = 2$ ,  $\hat{p}_{\bar{\rho}} = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} + \frac{1}{2\bar{\rho}} \right)$ . Considerando primero el caso para  $a \geq -\frac{1}{4}$ , en la ecuación (2.25),

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}_{\bar{\rho}} \rangle = & -N^2 \hbar i \int_0^1 \int_0^{2\pi} \int_0^1 \sin^2(\lambda\pi\bar{z}) \Phi^2(\phi) J_{\beta}(\chi_{\beta s} \bar{\rho}) \\ & \left( J'_{\beta}(\chi_{\beta s} \bar{\rho}) + \frac{1}{2\bar{\rho}} J_{\beta}(\chi_{\beta s} \bar{\rho}) \right) d\bar{z} d\phi \bar{\rho} d\bar{\rho}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Integrando en  $\bar{z}$  y sabiendo que  $\int_0^{2\pi} [c e_r(\phi, q)]^2 d\phi = \int_0^{2\pi} [s e_r(\phi, q)]^2 d\phi = \pi$  [12], se tiene

$$\langle \hat{p}_{\bar{\rho}} \rangle = -\frac{N^2 \hbar i \pi}{2\lambda} \left( \lambda\pi - \frac{\sin 2\lambda\pi}{2} \right) \int_0^1 \left( \bar{\rho} J_{\beta}(\chi_{\beta s} \bar{\rho}) J'_{\beta}(\chi_{\beta s} \bar{\rho}) + \frac{1}{2} J_{\beta}^2(\chi_{\beta s} \bar{\rho}) \right) d\bar{\rho}.$$

La primera integral en  $\bar{\rho}$ , se puede realizar por el método de integración por partes. En este caso, es conveniente tomar  $u = \bar{\rho} J_{\beta}(\chi_{\beta s} \bar{\rho})$  y  $dv = J'_{\beta}(\chi_{\beta s} \bar{\rho}) d\bar{\rho}$ , lo que implica  $du = (\bar{\rho} J'_{\beta}(\chi_{\beta s} \bar{\rho}) + J_{\beta}(\chi_{\beta s} \bar{\rho})) d\bar{\rho}$  y  $v = J_{\beta}(\chi_{\beta s} \bar{\rho})$ , concluyendo

$$\int_0^1 \bar{\rho} J_{\beta}(\chi_{\beta s} \bar{\rho}) J'_{\beta}(\chi_{\beta s} \bar{\rho}) d\bar{\rho} = \frac{\bar{\rho}}{2} J_{\beta}^2(\chi_{\beta s} \bar{\rho}) \Big|_0^1 - \frac{1}{2} \int_0^1 J_{\beta}^2(\chi_{\beta s} \bar{\rho}) d\bar{\rho},$$

para obtener finalmente,

$$\langle \hat{p}_{\bar{\rho}} \rangle = -\frac{N^2 \hbar i}{4\lambda} \left( \lambda\pi - \frac{\sin 2\lambda\pi}{2} \right) J_{\beta}^2(\chi_{\beta s}) = 0, \quad (3.3)$$

puesto que  $\lambda = 1, 2, 3, \dots$  y  $\chi_{\beta s}$  denotan raíces de la función de Bessel.

De manera análoga, se calcula  $\langle \hat{p}_{\bar{\rho}} \rangle$ , cuando  $a < -\frac{1}{4}$ . Definiendo  $\nu = \beta i$ , la función de onda (2.25) toma la forma,

$$\Psi(\bar{\rho}, \phi, \bar{z})_{\nu s \lambda} = N \sin \lambda\pi \bar{z} \Phi(\phi) \left( J_{\nu}(\chi_{\nu s} \bar{\rho}) - \frac{J_{\nu}(\chi_{\nu s})}{N_{\nu}(\chi_{\nu s})} N_{\nu}(\chi_{\nu s} \bar{\rho}) \right), \quad (3.4)$$

entonces

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \bar{\rho}} = N \sin \lambda\pi \bar{z} \Phi(\phi) \left( J'_{\nu}(\chi_{\nu s} \bar{\rho}) - \frac{J_{\nu}(\chi_{\nu s}) N'_{\nu}(\chi_{\nu s} \bar{\rho})}{N_{\nu}(\chi_{\nu s})} \right),$$

Los resultados en la parte axial y angular, son los mismos que en el caso anterior, por lo tanto,

$$\langle \hat{p}_{\bar{\rho}} \rangle = -\frac{N^2 \hbar i}{4\lambda} \left( \lambda\pi - \frac{\sin 2\lambda\pi}{2} \right) \Omega \neq 0, \quad (3.5)$$

donde la integral sobre  $\bar{\rho}$ , se define como,

$$\begin{aligned} \Omega &= \int_0^1 \left( J_{-\nu}(\chi_{\nu s} \bar{\rho}) - \frac{J_{-\nu}(\chi_{\nu s}) N_{-\nu}(\chi_{\nu s} \bar{\rho})}{N_{-\nu}(\chi_{\nu s})} \right) \\ &\quad \left[ \left( J'_{\nu}(\chi_{\nu s} \bar{\rho}) - \frac{J_{\nu}(\chi_{\nu s}) N'_{\nu}(\chi_{\nu s} \bar{\rho})}{N_{\nu}(\chi_{\nu s})} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2\bar{\rho}} \left( J_{\nu}(\chi_{\nu s} \bar{\rho}) - \frac{J_{\nu}(\chi_{\nu s}) N_{\nu}(\chi_{\nu s} \bar{\rho})}{N_{\nu}(\chi_{\nu s})} \right) \right] \bar{\rho} d\bar{\rho}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

La gráfica de  $|\langle \hat{p}_{\bar{\rho}} \rangle|$  como función de  $\chi_{\nu s}$  se muestra en la figura 3.9. Nótese como tiene un comportamiento oscilatorio. Más aún se anula para valores específicos de  $\chi_{\nu s}$ . Debido a que es de esperarse que físicamente un estado ligado tenga un valor de  $\langle \hat{p}_{\bar{\rho}} \rangle$  nulo, la condición  $\langle \hat{p}_{\bar{\rho}} \rangle = 0$  permite determinar los valores de  $\chi_{\nu s}$  que corresponden a estados ligados.

En este caso se fija un valor del parámetro  $\beta$ . De esta manera, se encuentran aquellos valores de  $\chi_{\nu s}$  en los cuales  $\langle \hat{p}_{\bar{\rho}} \rangle = 0$ . Se usa este resultado como un forma alternativa, para cuantizar la energía. Por ejemplo, si  $\beta = 0.25i$ , los tres primeros ceros correspondientes son  $\chi_{\nu 1} = 2.18$ ,  $\chi_{\nu 2} = 5.39$  y  $\chi_{\nu 3} = 8.57$ . Véase gráfica de la figura 3.9.

Utilizando el mismo valor de  $\beta = 0.25i$ , se calculan mediante la relación  $\beta = \sqrt{a + \frac{1}{4}}$ , los valores característicos  $a_r$  ó  $b_r$ , obteniéndose los siguientes resultados  $a_0(q) = -0.18$ ,  $b_1(q) = -0.31$  y  $a_1(q) = -0.31$ . Resolviendo cada una de estas ecuaciones trascendentes para  $q$ , se encuentra  $q(a_0) = 0.62$ ,  $q(b_1) = 1.16$  y  $q(a_1) = 7.86$ .

Las densidades de probabilidad, obtenidas mediante la parametrización del momento lineal radial de la gráfica 3.9, se muestran en las gráficas de las figuras 3.10, 3.11 y 3.12. Aquí se observa como para el primer estado excitado, la distribución de probabilidad se modifica respecto de los casos anteriores y se concentra más entre  $\pi$  y  $2\pi$ .

Esta forma de cuantizar implica que se pueden obtener los estados para los cuales  $\langle \hat{p}_{\bar{\rho}} \rangle = 0$ , controlando la intensidad de campo  $q$  en el cuadrupolo.

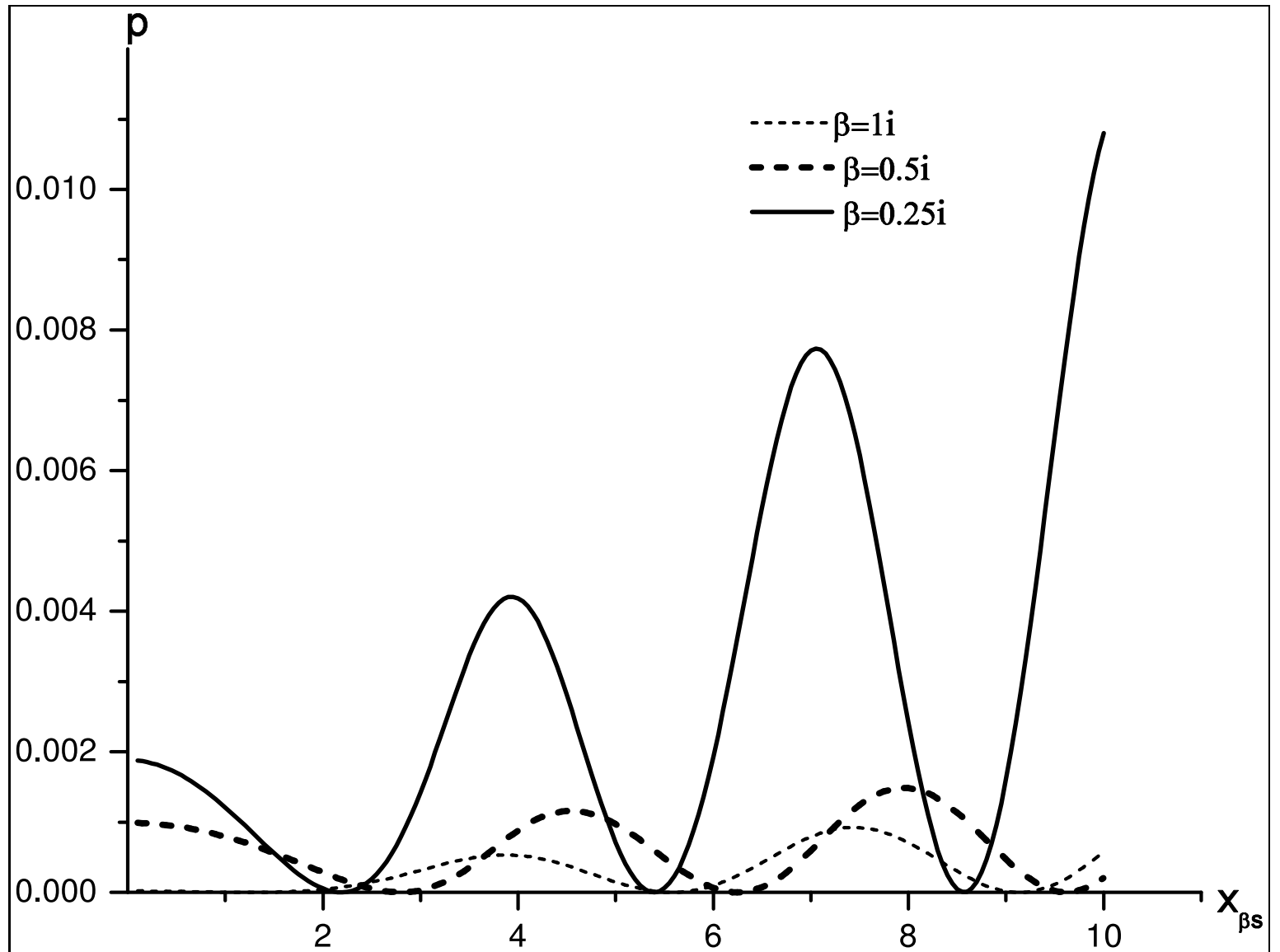


Figura 3.9: Gráfica del valor esperado del momento lineal radial en función de  $\chi_{\beta s}$ , para distintos valores de  $\beta$ . En la gráfica  $p = |\langle \hat{p}_r \rangle|$ .

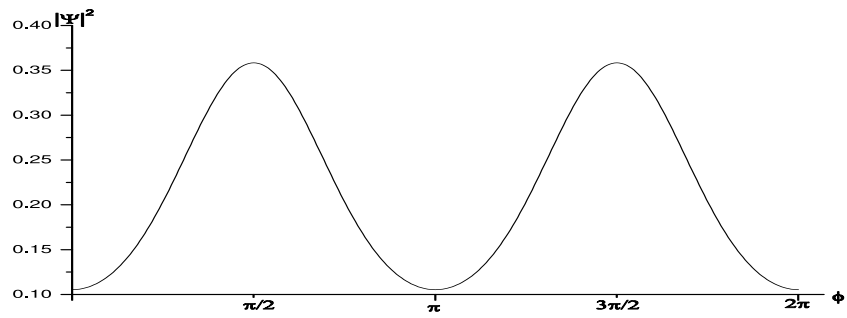


Figura 3.10: Densidad de probabilidad, para el estado base con un valor del parámetro  $\nu = 0.25i$ .

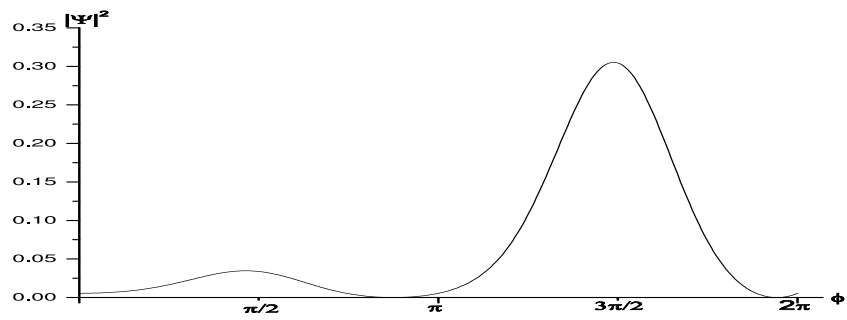


Figura 3.11: Densidad de probabilidad, para el primer estado excitado con un valor del parámetro  $\nu = 0.25i$ .

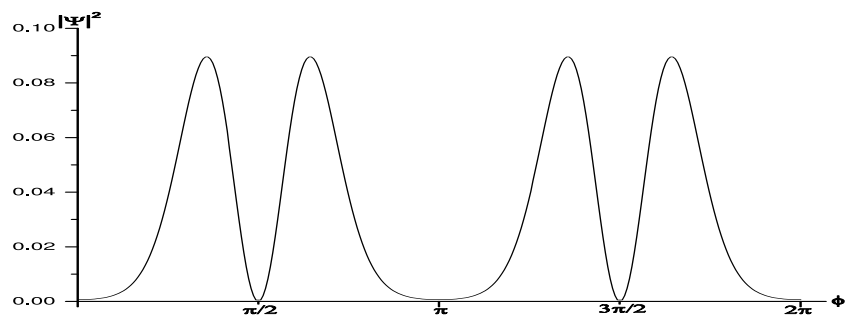


Figura 3.12: Densidad de probabilidad, para el segundo estado excitado con un valor del parámetro  $\nu = 0.25i$ .

### 3.3. Espectro de energías

Una vez encontrado el valor de  $a_r(q)$  ó  $b_r(q)$  como ya se explicó anteriormente, mediante la relación  $\beta^2 = a + \frac{1}{4}$  se calcula el valor de  $\beta$ , que es el orden de la función de Bessel real y de las funciones de Bessel y de Neumann en el caso complejo. En el cuadro 3.1 se presentan los valores obtenidos de tales parámetros.

$q$	$a_0$	$b_1$	$a_1$	$\beta$	$\beta_i$	$s$	$\lambda$	$\chi_{\beta s}$
0	0			0.5		1	1	3.14
0		1		1.11		1	2	3.99
0			1	1.11		1	3	3.99
1	-0.45				0.45		1	-
1		-0.11		0.37		1	2	2.96
1			1.85	1.45		1	3	4.43
5	-5.8				2.35		1	-
5		-5.79			2.35		2	-
5			1.85	1.45		1	3	-
25	-40.25				6.32		1	-
25		-40.25			6.33		2	-
25			-21.31		4.58		3	-
50	-86.11				9.26		1	-
50		-86.11			9.26		2	-

Cuadro 3.1: Valores de la energía propia, representados por  $a_r(q)$  y  $b_r(q)$  en donde se tomó  $q = 0, 1, 5, 25$  y  $50$ . El subíndice  $r = 0, 1, 2 \dots$  denota los estados base, primer y segundo excitados respectivamente. También se dan los valores de otros parámetros como  $s$ ,  $\lambda$ ,  $\chi_{\beta s}$  y  $\beta$ . El subíndice  $i$  denota que el valor de  $\beta$  es imaginario.

La figura 3.13, muestra algunas gráficas de las funciones de Bessel de orden real ( $a \geq -\frac{1}{4}$ ), obtenidas en la dependencia radial para diferente orden  $\beta$ . Los ceros  $\chi_{\beta s}$  correspondientes, se encuentran en el cuadro 3.1. Con base en estos resultados, se puede calcular el espectro de energías.

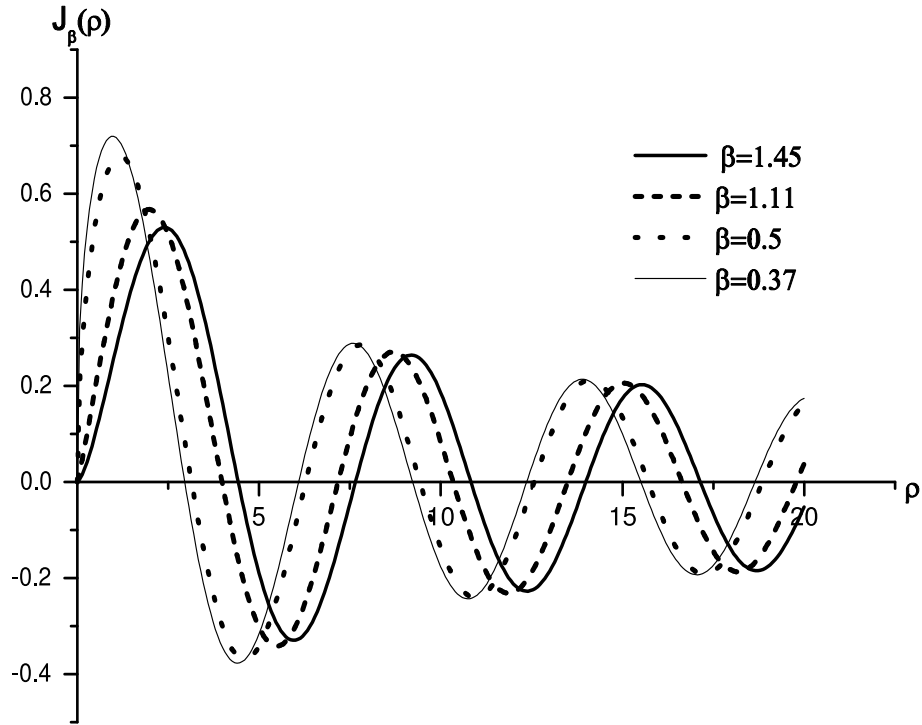


Figura 3.13: Funciones de Bessel  $J_\beta$  cuando  $a \geq -\frac{1}{4}$ .

Nótese que cuando la función de onda radial es compleja ( $a < -\frac{1}{4}$ ), el primer cero  $\chi_{\beta s}$ , y del cual depende la energía  $E_{\chi_{\beta s}\lambda}$  según la ecuación (2.26), no está determinado. Véase gráfica de la figura 3.14. Aquí se tomó una sólo gráfica para ejemplificar, aunque todas tienen un comportamiento similar de acuerdo con (2.18). En este caso, para cuantizar la energía se toman aquellos valores  $\chi_{\beta s}$  de la sección 3.2, para los cuales  $\langle \hat{p}_\rho \rangle = 0$ .

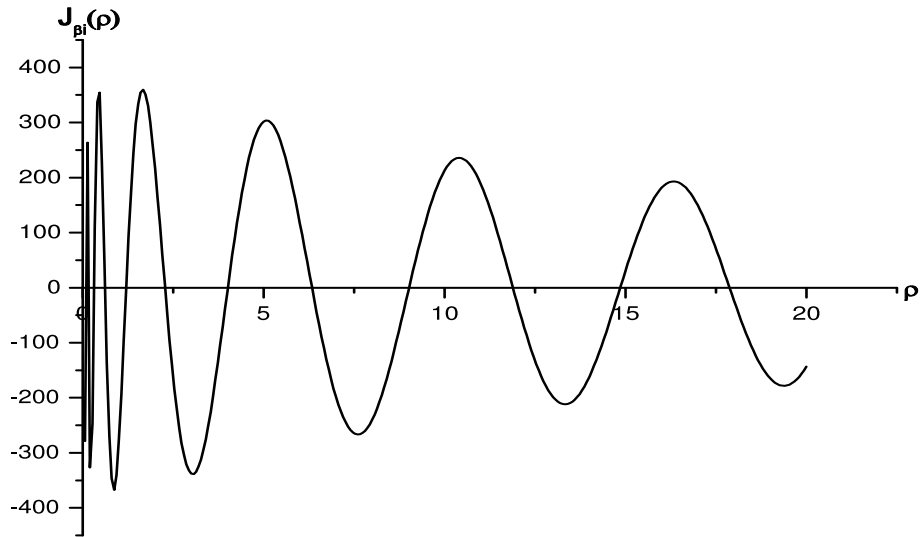


Figura 3.14: Funciones de Bessel y de Neumann;  $J_{\beta i} + N_{\beta i}$  complejas,  $a < -\frac{1}{4}$ .

A partir de la ecuación (2.26), se calcula el espectro de energías que se ilustra en la figura 3.15. Para cuantizar la energía, se tomaron los ceros correspondientes a  $\beta = 0.25i$  de la gráfica 3.9;  $\chi_{\nu 1} = 2.18$ ,  $\chi_{\nu 2} = 5.39$  y  $\chi_{\nu 3} = 8.57$ . Además se tomó la masa del electrón  $m_e = 9.1095 \times 10^{-31} \text{ kg}$ ,  $\hbar = 1.0545 \times 10^{-34} \text{ Js}$  y las dimensiones del pozo  $L = R_0 = 10R_{Bohr} = 5.29 \times 10^{-10} \text{ m}$ .  $R_{Bohr} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}$ , que se usa aquí simplemente como una unidad de distancia conveniente.

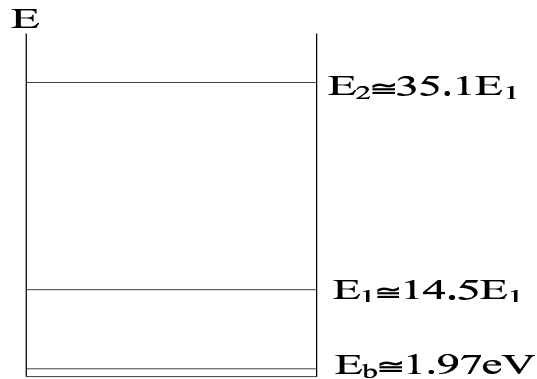


Figura 3.15: Valores propios de un potencial cuadrupolar dentro de un pozo cilíndrico.



# Capítulo 4

## Conclusiones

Se ha planteado y resuelto el problema teórico de encontrar la solución a la ecuación de Schrödinger para una partícula confinada en un pozo cilíndrico infinito con un cuadrupolo bidimensional en su centro. Se muestra que la función de onda en la parte angular de este potencial anisotrópico puede ser expresada en términos de funciones periódicas de Mathieu, mientras la parte radial es escrita en términos de las funciones de Bessel y de Neumann de orden real e imaginario, para pequeños y grandes valores de  $q$ , respectivamente. Por simplicidad en los cálculos, se limitó a trabajar sólo con los tres primeros niveles de energía. No obstante, la metodología utilizada es aplicable a cualquier otro estado cuántico.

Cuando la función de onda es real, se encuentra que en los estados base y primer excitado, la posibilidad de encontrar a la partícula dentro de la región de confinamiento es más probable en la dirección paralela al eje  $Y$  del cuadrupolo. Para el segundo estado excitado, la curva de probabilidad sugiere que la partícula tiende a encontrarse en la dirección perpendicular a  $Y$ , aunque esto sólo ocurra para intensidades pequeñas en el campo del cuadrupolo. Se observa que a medida que esta intensidad aumenta, la distribución de probabilidad se concentra hacia la región paralela. Así, que es más probable localizar a la partícula en esta dirección.

Las peculiaridades de la solución para valores grandes de  $q$ , escrita en términos de las funciones de Bessel y de Neumann de orden imaginario, son dos. Primero, pueden satisfacer las condiciones de frontera sin imponer alguna restricción sobre los parámetros de la solución, y segundo, el valor esperado del momento radial no es nulo. En este caso, se propuso un método alternativo para cuantizar la energía, encontrando aquellos valores en donde el valor esperado del momento lineal radial se anula, lo cual corresponde a los estados ligados del sistema. Para esta situación, sólo el primer estado se comporta diferente en relación al caso real, pues ahora la distribución de probabilidad se dá de igual manera en dirección paralela, pero se concentra más en la región comprendida entre  $\pi$  y  $2\pi$ , alcanzando su máximo en  $\frac{3\pi}{2}$ .

En este trabajo, también se muestra la expresión del operador de momento radial en coordenadas cilíndricas y la importancia de redefinir el hamiltoniano, para que este operador sea autoadjunto.

La anisotropía de este sistema, la cual puede ser teóricamente controlada cambiando la intensidad de campo del cuadrupolo y cuya densidad de probabilidad se concentra en ciertos sectores de ángulo, podría aprovecharse para modelar una punta de canteliver. Es importante recalcar que una descripción más realista de este proceso, se vería favorecida si se consideran pozos de paredes finitas.

Se espera que los resultados surgidos de este trabajo contribuyan de alguna manera a impulsar el estudio de diversos modelos de confinamiento con un grado de complejidad cada vez mayor en su simetría, que permita en la medida que se avance, un acercamiento hacia una descripción lo más realista posible.

# Bibliografía

- [1] K. Barnham and D. Vvedensky, *Low-Dimensional Semiconductor structures. Fundamentals and device applications*, Cambridge University Press 2001. Págs.1,61.
- [2] M. J. Kelly, *Low-Dimensional Semiconductors. Materials, Physics Technology, Devices* Clarendon Press, Oxford Science Publications 1995. Págs xv, xvi.
- [3] H. Yamaguchi, S. Miyashita, Y. Hirayama, *Physica E* 24(2004) 70;H. Yamaguchi, S. Miyashita, Y. Hirayama, *Appl. Surface Sc.* 237 (2004) 649.
- [4] Richard L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, Third Edition, Addison-Wesley 1998. Págs. 376, 377, 435-437.
- [5] Stephen Gasiorowicz, *Quantum Physics*, Second Edition, John Wiley and Sons 1996. Pág. 191.
- [6] John D. Mc Gervey, *Introducción a la Física Moderna*, Primera edición en español, Editorial Trillas 1975. Págs.197-199.
- [7] Gil Paz, *On the connection between the radial momentum operator and the Hamiltonian in n dimensions*, *European Journal of Physics*, **22** (2001) 337-341.
- [8] Mark A. Heald and Jerry B. Marion, *Classical Electromagnetic Radiation*, Third Edition, Saunders College Publishing 1995. Págs.100-103.
- [9] L. De la Peña, *Introducción a la Mecánica Cuántica*, Segunda edición, Fondo de Cultura Económica 1991. Págs. 369, 373, 374.

- [10] G. Arfken, *Mathematical Methods for Physics*, First Edition, Addison-Wesley 1976. Pág. 557.
- [11] M. Alonso y E. Finn, *Física, Vol III: Fundamentos cuánticos y Estadísticos*, Edición corregida y aumentada, Fondo Educativo Interamericano 1976. Págs. 70-71.
- [12] Abramowitz, M., Stegun, I.A., *Handbook of Mathematical Functions*, New York:Dover Publishing 1965. Cap.20.
- [13] Siegfried Flügge, *Practical Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, Reprint of the 1994 Edition. Cap. IV.