



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

EFFECTO STARK CONFINADO EN  
UNA DIMENSION

294049

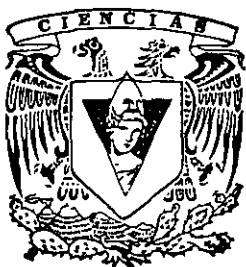
**T E S I S**

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

F I S I C O

P R E S E N T A :

**CARLOS GABRIEL AVENDAÑO LOPEZ**



DIRECTORES DE TESIS:  
DR. JUAN ADRIAN REYES CERVANTES  
DR. MARCELO DE CASTILLO MUSSOT

MEXICO, D.F.



JUNIO DE 2001

FACULTAD DE CIENCIAS  
SECCION ESCOLAR



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



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

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

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

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

# TESIS CON FALLA DE ORIGEN



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AVANCEA EN  
MIZERO

**M. EN C. ELENA DE OTEYZA DE OTEYZA**

Jefa de la División de Estudios Profesionales de la  
Facultad de Ciencias  
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: Efecto Stark confinado en una dimensión.

realizado por CARLOS GABRIEL AVENDAÑO LOPEZ

con número de cuenta 9455773-6 , pasante de la carrera de FISICA

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis

Propietario DR. JUAN ADRIAN REYES CERVANTES

Propietario DR. MARCO ANTONIO MARTINEZ NEGRÉTE

Propietario DR. ORACIO NAVARRO CHAVEZ

Suplente DR. MARCELO DEL CASTILLO MUSSOT

Suplente DR. GERARDO JORGE VAZQUEZ FONSECA

*[Handwritten signatures of Juan Adrian Reyes Cervantes, Marco Antonio Martinez Negrete, Oracio Navarro Chavez, Marcelo del Castillo Mussot, and Gerardo Jorge Vazquez Fonseca]*

Consejo Departamental de FISICA

*[Handwritten signature of Patricia Goldstein Menache]*

DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE

## AGRADECIMIENTOS

asesores de Tesis:

r. Juan Adrian Reyes Cervantes. Por su fina atención y enseñanza, así como el tiempo dedicado para que ésta tesis se pudiera realizar.

r. Marcelo del Castillo Mussot por su constante motivación y apoyo científico durante toda ésta etapa de mi carrera.

ambos, que con sus enseñanzas y sabuduría, han hecho de un físico, un aliado más en la búsqueda del conocimiento científico.

honorable Jurado:

r. Juan Adrian Reyes Cervantes

r. Marco Antonio Martínez Negrete

r. Oracio Navarro Chávez

r. Marcelo del Castillo Mussot

r. Gerardo Jorge Vazquez Fonseca

por su paciencia en la revisión de ésta tesis y por su opinión crítica y acertada para el mejoramiento de la misma.

NACYT por el apoyo económico brindado a través del proyecto "iones en sistemas de baja dimensionalidad".

A todos las más sinceras **GRACIAS**.

DEDICATORIA

A la UNAM Quien con su  
gratuidad ha hecho que un  
hombre más logre sus propósitos.

GRACIAS

~~Andrés B.~~

# Índice General

0.1	Introducción . . . . .	3
<b>1</b>	<b>Conceptos Útiles de la Física del Estado Sólido</b>	<b>7</b>
1.1	Teoría de bandas electrónica . . . . .	7
1.2	Excitones . . . . .	12
<b>2</b>	<b>Métodos Aproximados</b>	<b>14</b>
2.1	Método WKB . . . . .	14
2.2	Teoría de perturbaciones aplicada al efecto Stark en 3D . . . .	20
2.3	Método de <i>disparo</i> . . . . .	24
<b>3</b>	<b>Efecto Stark Confinado en una Dimensión</b>	<b>26</b>
3.1	La ecuación de Schrödinger adimensional . . . . .	27
3.2	Método de solución . . . . .	29
3.2.1	Solución asintótica . . . . .	29
3.2.2	Solución dentro del capacitor . . . . .	33
3.2.3	Resultados . . . . .	35
3.3	Campo de Ionización . . . . .	38
3.4	Discusión de resultados . . . . .	42
<b>4</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>46</b>
<b>A</b>	<b>Técnicas de fabricación de heteroestructuras de baja dimen- sionalidad</b>	<b>48</b>
<b>B</b>	<b>Convergencia de la serie asintótica</b>	<b>51</b>

## 0.1 Introducción

Hoy en día es común el diseño y la preparación de estructuras semiconductoras de algunas capas atómicas de grueso, cuya composición es controlada experimentalmente. Las estructuras resultantes de estos tratamientos no sólo han permitido la construcción de nuevas generaciones de dispositivos electrónicos y optoelectrónicos, sino que además han abierto nuevas áreas interesantes de la física cuántica del estado sólido.

Por otra parte, desde los inicios de la mecánica cuántica, ha sido de gran interés el estudio de sistemas hidrogenoides cuánticos los cuales experimentan un campo eléctrico uniforme  $E$ , fenómeno conocido como efecto Stark. En efecto, el bien conocido efecto Stark en el átomo de hidrógeno [1, 2, 3] muestra que algunos estados excitados degenerados inicialmente, pierden su degeneración cuando se les aplica un campo eléctrico débil, además de que las funciones de onda tienden a concentrarse en la región en la que el potencial eléctrico es más profundo. Es importante mencionar que debido a la naturaleza perturbativa del método comúnmente usado para resolver este problema, no es posible hallar un campo de ionización.

El efecto Stark ha sido de interés en investigaciones recientes en el área general de los semiconductores. Por ejemplo, el estudio en sistemas tridimensionales semiconductores, para los estados ligados del sistema hueco-electrón con una interacción coulombiana (excitón), se encuentra teóricamente mediante aproximaciones clásicas [4] que existe un campo eléctrico de ionización de aproximadamente  $2.5 \text{ kV/cm}$  para el  $GaAs$ . Aquí, el campo eléctrico aplicado no está confinado, es decir, se modela como si estuviera en todo el espacio.



También este efecto se ha estudiado en sistemas de baja dimensionalidad. Por ejemplo, en estructuras que confinan la región accesible a las partículas, como es el caso de estructuras de pozos cuánticos a las que se les aplican campos eléctricos perpendiculares a las capas que confinan a los pozos. En tales sistemas, campos eléctricos débiles (por debajo de la energía de ionización clásica) son capaces de ionizar a excitones cargados (triones) desligando el exceso de carga [5]. En contraste, para excitones neutros se encuentra que las energías de ionización son de aproximadamente 50 veces el resultado clásico  $\sim 10^5$  V/cm [6]. En alambres cuánticos en forma de V, con la misma estructura de pozos cuánticos, el método perturbativo proporciona los estados electrónicos más bajos para campos eléctricos débiles [7].

Asimismo, en puntos cuánticos se ha investigado el cambio, como función del campo eléctrico, en los niveles de energía en un nanocrystal semiconductor de forma esférica con radios del orden de 10 nm [8]. Los puntos cuánticos son interesantes debido a sus propiedades optoelectrónicas no lineales.

Como se ha mencionado, estos resultados han sido obtenidos para sistemas en los cuales se modela el campo eléctrico como aplicado sobre todo el espacio, mientras que las partículas pueden estar confinadas o no dependiendo del tipo de estructura. Por ello consideramos de interés estudiar desde el punto de vista teórico el caso más realista del efecto Stark en un sistema coulombiano en una dimensión, es decir, el comportamiento cuántico de un sistema unidimensional formado por dos partículas con carga opuesta bajo la influencia de un campo eléctrico uniforme  $E$  confinado a una región finita  $2a$ . Ya que un excitón está formado por un electrón y un hueco ligados a través de un campo atractivo coulombiano, esperamos que nuestros cálculos sirvan de guía para la investigación de excitones en alambres cuánticos, en donde

se deberá tomar en cuenta el ancho finito del alambre. Nuestros resultados podrían también ser aplicados a los estados electrónicos de una impureza en un sistema unidimensional.

A continuación se presentará la estructura de este trabajo.

A fin de describir el comportamiento cuántico de los sólidos, revisaremos brevemente en el primer capítulo algunos de los conceptos básicos de la física del estado sólido, como la teoría de bandas y los excitones.

Debido a que el sistema que investigaremos no tiene solución analítica exacta, en el capítulo segundo se describen los métodos aproximados que utilizaremos para hallar las soluciones de nuestro modelo. Además, se presentan los resultados del importante efecto Stark para el átomo de hidrógeno en 3D.

En el capítulo tres se presenta y se resuelve el problema de nuestra investigación. Comenzamos planteando la ecuación diferencial de Schrödinger de nuestro sistema en la variable  $x$ . Se deducen expresiones asintóticas que representan a las funciones propias de la ecuación de Schrödinger en las regiones en donde no actúa el campo uniforme  $|x| \geq a$  y se utilizan como condiciones de frontera en la región  $-a < x < a$ , en donde encontraremos numéricamente las soluciones propias a nuestro modelo. Por otro lado, con la ayuda del método aproximado WKB estudiamos el comportamiento de nuestro sistema como función del campo eléctrico aplicado para estimar el campo crítico de ionización y demostrar que después de dicho campo crítico no existen estados ligados. Finalmente, presentamos una pequeña discusión del porque no es conveniente usar la teoría de perturbaciones para obtener soluciones propias cuando el campo eléctrico aplicado es débil.

Por último, se incluyen dos apéndices. En el primero se describen algunas

de las técnicas experimentales más usadas para la elaboración de heteroestructuras semiconductoras y en el segundo, se verifica la convergencia de las expresiones asintóticas obtenidas en el capítulo tres.

# Capítulo 1

## Conceptos Útiles de la Física del Estado Sólido

### 1.1 Teoría de bandas electrónica

En general, resolver por completo la ecuación de Schrödinger para describir el comportamiento de un sólido es extremadamente difícil, ya que debe tomarse en cuenta la gran cantidad de átomos que forman parte de él ( $\sim 10^{23} \text{cm}^{-3}$ ), así como la interacción entre ellos y entre sus electrones. Este problema puede resolverse solamente si se toman en cuenta ciertas propiedades de los sólidos e ignorando ciertas interacciones. Por ejemplo, si notamos que en gran parte de los distintos tipos de sólidos, los átomos están arreglados en una malla periódica regular y si ignoramos la interacción entre electrones, así como la interacción entre iones, la ecuación de Schrödinger a resolver en éste caso es

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = \mathcal{E} \psi(\vec{r}), \quad (1.1)$$

en donde  $V(\vec{r})$  es el potencial del cristal visto por cada uno de los electrones. En  $V(\vec{r})$  se incluye la interacción del electrón con todos los iones en el

sólido. El potencial resultante es periódico (véase Fig. 1), ésto es, cumple la condición  $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{a})$  que proviene de la consideración de simetría traslacional del electrón en la red, donde  $\vec{a}$  es un vector de la red.

De acuerdo al teorema de Bloch, la solución de la Ec. (1.1) para un potencial periódico  $V(\vec{r})$  tiene la forma

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(r), \quad (1.2)$$

en donde la función  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$  tiene la misma simetría traslacional de la red;  $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a})$ . El vector  $\vec{k}$  es una cantidad relacionada con el momento de la partícula. La función dada por la Ec. (1.2) contiene información importante para describir el comportamiento del electrón en el sólido. Por ejemplo

a) Tiene la forma de una onda plana viajera, representada por el factor  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ , que indica que el electrón se propaga a través del cristal como una partícula libre. El efecto de la función  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$  es modular esta onda tal que la amplitud oscile periódicamente de átomo a átomo debido a la interacción con ellos.

b) Debido a que el electrón se comporta como una onda de vector  $\vec{k}$ , ésta tiene una longitud de onda de de Broglie  $\lambda = 2\pi/|\vec{k}|$  y momento  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ .

c) La función  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$  es un orbital de todo el cristal, es decir, la función de onda que describe los estados electrónicos del electrón, se extiende através de todo el sólido. Esto se puede ver en analogía con los orbitales atómicos de un electrón alrededor de un átomo en particular.

Ahora analicemos el espectro de energías. Sustituyendo la forma de  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$  dada por (1.2) en la Ec. (1.1) y eliminando el factor  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ , la ecuación para

la función  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$  es

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + i\vec{k})^2 + V(\vec{r}) \right] u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \mathcal{E}_{\vec{k}} u_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (1.3)$$

Esta es una ecuación de eigenvalores. Notemos que el operador entre paréntesis cuadrados es una función explícita de  $\vec{k}$ , y por lo tanto las eigenfunciones y eigenvalores dependen de  $\vec{k}$ . Una ecuación de eigenvalores para cada  $\vec{k}$  ofrece muchas soluciones, por lo que para cada valor de  $\vec{k}$  tenemos un gran número de soluciones, dando un conjunto de energías discretas  $\mathcal{E}_{1,\vec{k}}, \mathcal{E}_{2,\vec{k}}, \mathcal{E}_{3,\vec{k}}, \dots$ , (Véase Fig. 2), en donde el primer subíndice denota los niveles de energía.

El diagrama de la Fig. 2 es un bosquejo de las energías en sólo una dirección particular en el espacio  $\vec{k}$ . Un esquema en diferentes direcciones  $\vec{k}$ , es más complicado, siendo necesario utilizar las conocidas zonas de Brillouin [9, 10].

Ya que estas energías dependen de  $\vec{k}$ , ellas varían continuamente a medida que  $\vec{k}$  es variada sobre su rango de valores. Cada nivel para todo el rango de valores de  $\vec{k}$  conduce a una banda de energía. De modo que se puede escribir el eigenvalor de energía como  $\mathcal{E}_n(\vec{k})$ , en donde el subíndice  $n$  indica el índice de la banda.

El número de bandas es grande (usualmente infinito), pero sólo las más bajas son ocupadas por los electrones. Cada banda cubre un cierto rango de energía, extendido desde el más bajo hasta el más alto valor en el espacio  $\vec{k}$ . Los intervalos de energía entre las bandas constituyen las brechas de energía (*gaps*), las cuales son energías prohibidas para los electrones.

De ésta forma, podemos clasificar los estados del electrón dentro de una

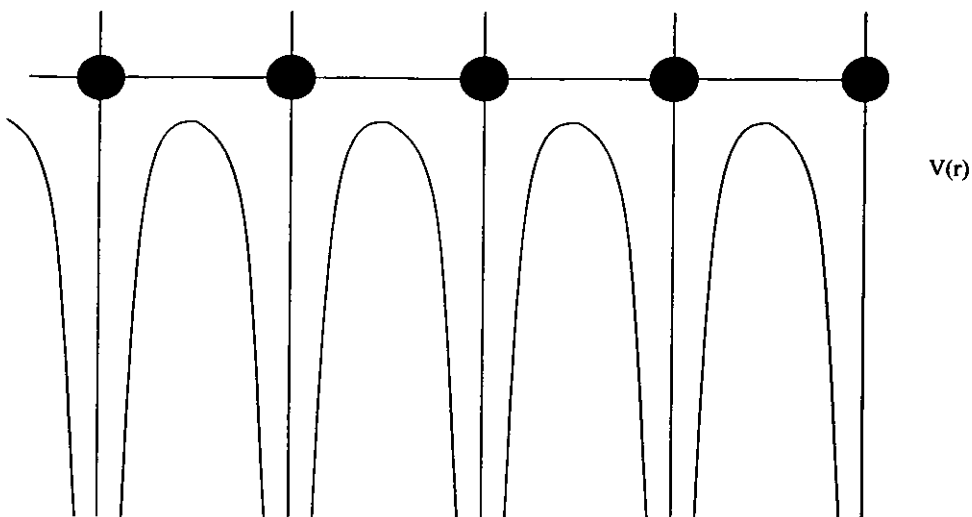


Fig. 1. El potencial periódico del cristal visto por el electrón

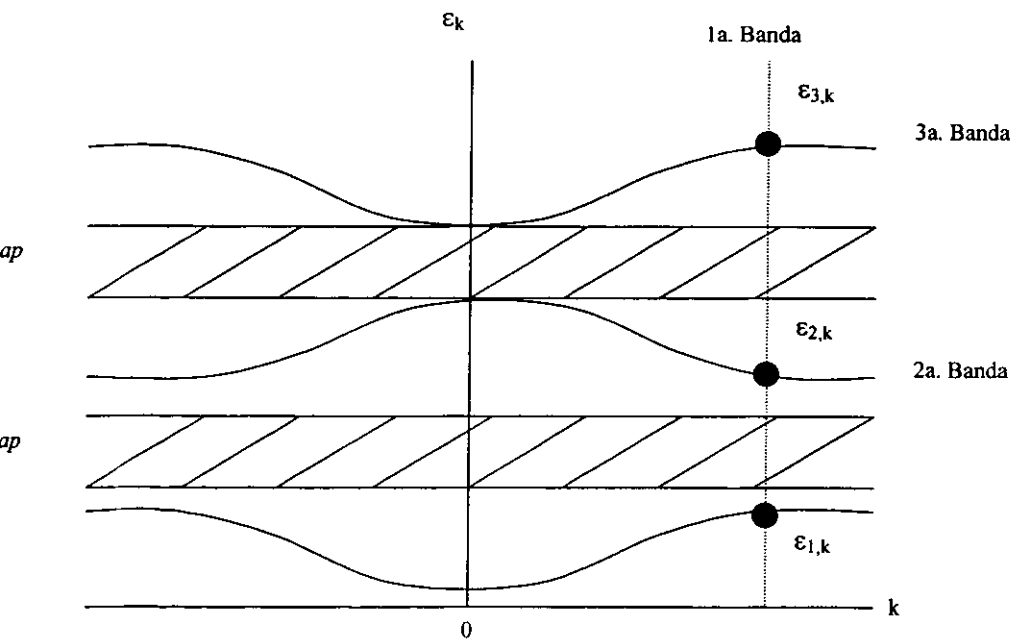


Fig 2. Bandas de energía y *gaps*. Las regiones sombreadas indican bandas prohibidas

banda de acuerdo al vector de onda  $\vec{k}$ .

A continuación explicaremos brevemente los resultados obtenidos en dos modelos diferentes propuestos para resolver explícitamente la Ec. (1.1).

**El modelo del Electrón Casi Libre.** En éste modelo se considera al potencial del cristal muy débil. La solución de la ecuación de Schrödinger muestra que el electrón se comporta esencialmente como una partícula libre, excepto cuando el vector de onda  $\vec{k}$  es muy cercano a los límites de la zona de Brillouin. En éstas regiones, el potencial nos lleva a la creación de brechas de energía. La primer brecha de energía o *gap* está dado por

$$\mathcal{E}_g = 2 \left| V_{2\pi/a} \right|,$$

en donde  $V_{2\pi/a}$  es una componente de Fourier del potencial del cristal [11]. Las funciones de onda cercanas a los límites de la zona de Brillouin están descritas por ondas estacionarias como resultado de la fuerte reflexión de Bragg de la onda del electrón por el arreglo cristalino.

**El modelo de Amarre Estrecho.** El potencial del cristal es considerado fuerte y lleva a las mismas conclusiones generadas en el modelo anterior, es decir, el espectro de energía está compuesto por un conjunto de bandas continuas. Este modelo muestra que la movilidad del electrón es más grande a medida que aumenta el traslape entre funciones atómicas vecinas.

Es necesario identificar los tipos de sólidos de acuerdo a sus propiedades eléctricas; metales, semimetales, semiconductores y aislantes. En un metal (o conductor) una gran corriente fluye bajo la aplicación de un campo eléctrico, en contraste con un aislante, en donde la aplicación del campo eléctrico no produce una corriente. Los semimetales, contienen una gran cantidad de portadores de carga, pero menor que la cantidad que poseen los metales



(más pequeña por un factor de  $\sim 10^{-4}$ ). Por otro lado, los semiconductores se comportan como un aislante a bajas temperaturas, pero incrementan en gran medida sus portadores de carga cuando se aumenta la temperatura. En términos de las bandas, un criterio para distinguir entre los extremos de los tipos de sólidos (metales y aislantes), reside en la siguiente afirmación [12]: una banda completamente llena no porta corriente eléctrica, aún en la presencia de un campo eléctrico, lo que implica que un sólido se comporta como un metal sólo cuando alguna de las bandas están parcialmente ocupadas (véase Fig. 3). Por ejemplo, el sodio se comporta como un metal debido a que su banda de valencia está solo parcialmente llena. En particular nos interesan los tipos de sólidos que no son aislantes.

Si el *gap* de energía entre la banda de valencia y la banda inmediatamente arriba de ella (primera banda de conducción) es pequeña, entonces es más fácil excitar a los electrones hacia esta última banda (véase Fig. 4). En este caso nos referimos a los semiconductores. Un ejemplo es el *Ge*, en el cual el *gap* es de alrededor de  $0.6 \text{ eV}$  [13], respectivamente.

Más adelante cuando hablemos de los excitones necesitaremos el concepto de hueco, por lo cual es importante definirlo aquí. Un hueco existe en una banda que está casi llena excepto por un estado vacante. El hueco actúa como una partícula de carga positiva de carga  $+e$ . Cuando el hueco se encuentra cerca de la banda ocupada más alta, el hueco se comporta como si tuviera una masa efectiva positiva, dada por  $m^* = \hbar^2 / (d^2\mathcal{E}/dk^2)$ , en donde  $\mathcal{E}$  es la energía en función del vector de onda  $k$ .

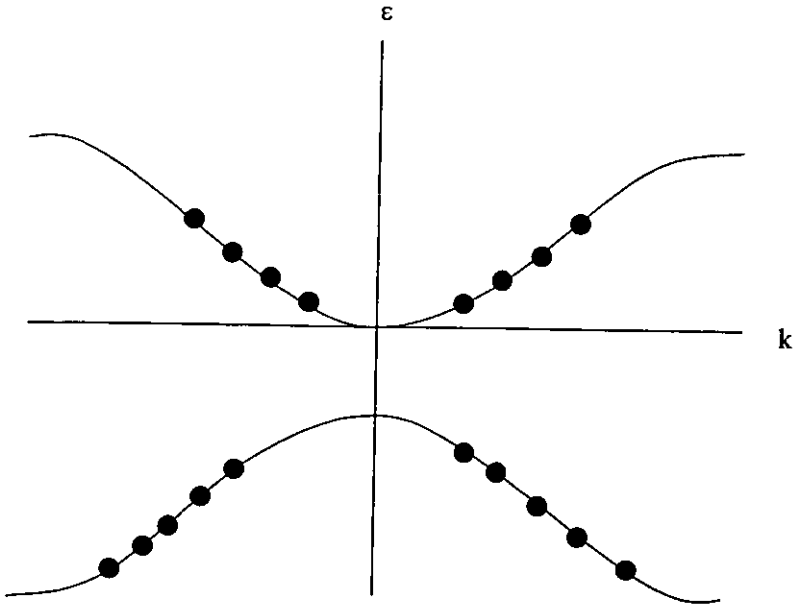


Fig. 3. La distribución de electrones en las bandas de un metal

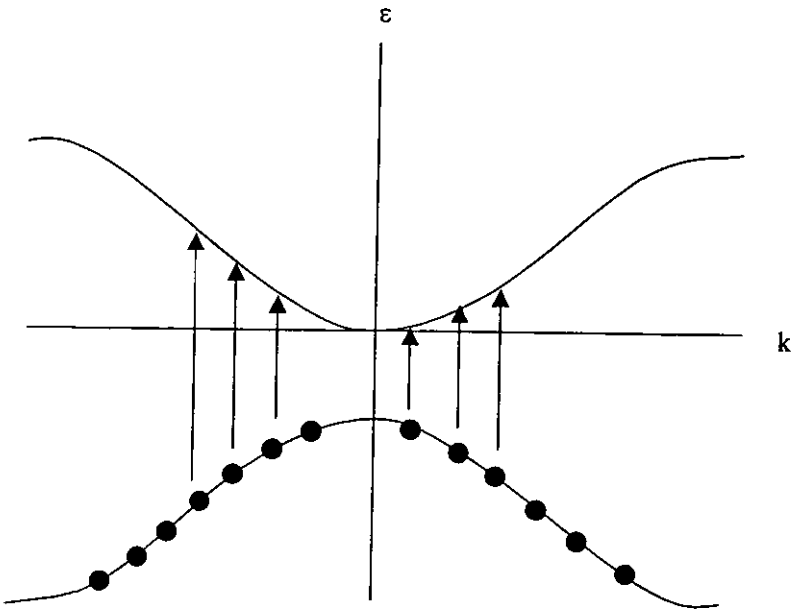


Fig. 4. La distribución de electrones en las bandas de un semiconductor

## 1.2 Excitones

Un excitón está formado por un electrón y un hueco ligados a través de un campo atractivo coulombiano. Existen dos tipos de excitones; el de Frenkel y el de Wannier Mott y es necesario distinguirlos de acuerdo al tamaño de sus órbitas (separación entre hueco y electrón). El excitón de Wannier-Mott involucra órbitas del orden de muchas veces la separación más pequeña existente entre los núcleos que conforman el sólido, por lo que el modelo no puede ser válido a menos que  $a_{exc}$  (radio de Bohr excitónico) tenga una magnitud más grande que la distancia más pequeña entre los núcleos que conforman el sólido (entre una decena o centena de parámetros de la red  $a$ ). En contraste, el excitón de Frenkel describe una órbita de dimensiones atómicas alrededor de un átomo que contenga un estado de valencia vacante.

Deduzcamos la energía de amarre  $\mathcal{E}_n$  del excitón [14, 15] de Wannier-Mott considerando el sistema hueco-electrón como partículas de masas efectivas  $m_h^*$  y  $m_e^*$ . Ellas interactúan a través de un potencial coulombiano atractivo apantallado por la constante dieléctrica  $\epsilon$  del cristal. En analogía con el problema del átomo de hidrógeno, la masa reducida  $\mu$  ( $1/\mu = 1/m_p + 1/m_e \approx 1/m_e$ ) se reemplaza ahora por la masa efectiva reducida  $m^*$  ( $1/m^* = 1/m_h^* + 1/m_e^*$ ) y la carga electrónica se reemplaza por  $e^2/\epsilon$ , de manera que en el estado  $n$  los radios de las órbitas  $a_{ex}$  y las energías  $\mathcal{E}_n$  excitónicas están dados por

$$a_{ex}(n) = n^2 \frac{\hbar\epsilon}{m^* e^2} = n^2 \frac{\epsilon m_e}{m^*} a_0, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.4)$$

y

$$\mathcal{E}_n = -\frac{1}{n^2} \frac{e^2}{2a_0\epsilon} = -\frac{1}{n^2} \frac{m^*}{m_e \epsilon^2} (13.6 \text{ eV}), \quad (1.5)$$

en donde  $a_0$  es el radio de Bohr y  $m_e$  es la masa del electrón.

Ya que para la creación de un excitón implica la excitación de un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción, la energía total del excitón  $\mathcal{E}_{exc}$ , incluyendo un término para su movimiento a través del arreglo cristalino, es

$$\mathcal{E}_{exc} = E_g + \mathcal{E}_n + \frac{\hbar^2 K_{ex}^2}{2(m_h^* + m_e^*)}, \quad (1.6)$$

donde  $E_g$  es el *gap* de energía y el tercer término es el vector de onda del excitón. Como  $\mathcal{E}_n$  es negativo, la energía total del excitón está por debajo de la energía de la banda de conducción. Cuando los excitones son generados por absorción de fotón y no participan otras partículas, la energía de conservación requiere que  $\hbar\omega(q) = \mathcal{E}_{exc}$  y la conservación del vector de onda requiere que  $K_{exc}^2 = q^2$ , en donde  $q$  representa el vector de onda del fotón incidente. Ya que  $q$  es pequeño, el término en  $K_{exc}^2$  puede ser despreciado.

La descripción del excitón de Frenkel es aplicable a los gases raros solidificados y algunos cristales iónicos, mientras que el modelo de Wannier-Mott se aplica en general al Grupo IV de semiconductores y muchos cristales iónicos y covalentes.

El excitón de Wannier-Mott es el que utilizaremos en nuestro modelo del efecto Stark unidimensional, debido que los cálculos serán aplicados a los materiales semiconductores, en donde se encuentran grandes separaciones entre hueco y electrón.

# Capítulo 2

## Métodos Aproximados

Existen pocos potenciales  $V(r)$  para los cuales la ecuación de Schrödinger tiene solución exacta, por lo que es muy útil recurrir a los métodos aproximados. Para el cálculo de valores propios y funciones propias en estados estacionarios dos de los métodos más usados son la teoría de perturbaciones y la aproximación semiclásica (o método WKB). La teoría de perturbaciones es aplicable si el problema difiere poco de un problema con soluciones exactas. El método WKB es aplicable en el límite cercano al clásico. Aunque ambos métodos son aproximados permiten dar una visión general de como se comportan los sistemas cuando existen variaciones externas importantes.

### 2.1 Método WKB

Para resolver la ecuación estacionaria de Schrödinger

$$-\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + V(z)\psi(z) = \mathcal{E}_n\psi(z), \quad (2.1)$$

usando el método de aproximación WKB, procedemos de la siguiente manera.

Si  $V = \text{constante}$ , las soluciones son de la forma

$$\psi(z) = e^{\pm ikz}, \quad (2.2)$$

con  $k = \sqrt{\mathcal{E}_n - V}$ . Ahora bien, si  $V = V(z)$ , entonces  $\psi(z)$  se puede proponer la solución siguiente

$$\psi(z) = e^{is(z)}, \quad (2.3)$$

de modo que sustituyendo la expresión (2.3) en la Ec. (2.1), encontramos que  $s(z)$  satisface exactamente la ecuación diferencial no lineal

$$i \frac{d^2 s(z)}{dz^2} - \left( \frac{ds(z)}{dz} \right)^2 + \mathcal{E}_n - V(z) = 0. \quad (2.4)$$

Si suponemos que  $V$  varía lentamente con  $z$ , entonces

$$\frac{d^2 s(z)}{dz^2} \ll \left( \frac{ds(z)}{dz} \right)^2. \quad (2.5)$$

Despreciando el término de la segunda derivada en la Ec. (2.4) se obtiene que

$$\frac{ds_0(z)}{dz} = \pm \sqrt{\mathcal{E}_n - V(z)}, \quad (2.6)$$

de donde

$$s_0(z) = \pm \int^z \sqrt{\mathcal{E}_n - V(z)} dz + A_1. \quad (2.7)$$

Así, la solución propuesta (2.3) con la condición (2.5) puede escribirse

$$\psi(z) = A e^{\pm i \int^z \sqrt{\mathcal{E}_n - V(z)} dz}. \quad (2.8)$$

Si definimos  $k(z) \equiv \sqrt{\mathcal{E}_n - V(z)}$ , este término puede considerarse como el vector de onda dependiente de la posición, de modo que para  $k(z) > 0$ ,  $k(z) = 2\pi/\lambda(z) = p(z)/\alpha$ , donde  $\lambda(z)$  y  $p(z)$  son longitud de onda y momento cuántico, con  $\alpha$  una constante.

Por lo tanto, la condición (2.5) puede ser escrita de la siguiente manera

$$k'(z) \ll (k(z))^2,$$

$$\frac{\lambda(z)p'(z)}{2\pi p(z)} \ll 1. \quad (2.9)$$

La expresión (2.9) implica que el cambio de momento sobre una longitud de onda debe ser pequeño comparado con el momento en sí mismo, de modo que, la aproximación es válida lejos de los puntos de retorno clásicos, para los cuales la partícula se detiene y el momento por lo tanto se anula.

Así, la solución semiclásica de la ecuación de Schrödinger unidimensional está dada por [16]

$$\psi(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{k(z)}} e^{\pm i \int^z k(z) dz}, \quad (2.10)$$

conocida como aproximación semiclásica ó WKB.

Debido a que la aproximación WKB para  $\psi(z)$  diverge en los puntos de retorno, el problema de empalmar las soluciones a los lados de los puntos de retorno se reduce a encontrar las reglas de conexión entre estas soluciones. Para ésto, escogemos un potencial simple bien comportado con dos puntos de retorno clásicos tal que cumplen  $V(a) = V(b) = \mathcal{E}$  y suponemos que en la vecindad de cualquiera de los puntos de retorno, digamos  $a$ , podemos escribir

$$V(z) - \mathcal{E} = (z - a)V', \quad (2.11)$$

con  $V' > 0$ . La ecuación de Schrödinger equivalente tiene la forma

$$\frac{d^2 u(y)}{dy^2} + \left(1 + \frac{5}{36y^2}\right) u(y) = 0, \quad (2.12)$$

en donde se han definido las variables

$$u(y) = \sqrt{k(z)}\psi(z), \quad y = \int^z k(z)dz.$$

Para  $|y|$  grande el segundo término dentro de los paréntesis puede ser despreciado. Entonces, las soluciones asintóticas de la Ec. (2.12) son  $u(y) = e^{\pm iy}$ , proporcionando nuevamente la aproximación WKB. La Ec. (2.12) es exacta cerca del punto de retorno, así como, también es una buena aproximación a la ecuación de Schrödinger (2.1) en la region intermedia en donde  $y$  tiene valores pequeños. Esta aproximación es inválida si, por ejemplo, el valor de la energía está cerca a un extremo del potencial (máximo o mínimo), esto es, si los puntos de retorno están muy cerca entre sí, tal que no se pueda estar lo suficientemente lejos como para que sea válida la aproximación WKB [17, 18]. Usando la definición de  $k(z)$  y la expansión para  $V(z)$  de la expresión (2.11) en la condición (2.5) el método WKB es válido si se cumple  $|z - a| \gg |1/(4V')|^{1/3}$  o bien  $|z - a| \gg \lambda/(4\pi)$  en donde  $\lambda$  es la longitud de onda de de Broglie. Si por otro lado la aproximación se cumple, la Ec. (2.12) puede ser usada para conectar las funciones de onda WKB através del punto de retorno clásico, es decir, que en el punto de retorno la función de onda total sea continua al igual que su derivada. Si consideramos la región clásica en donde una partícula de energía  $\mathcal{E}$  está confinada a la región entre  $z = a$  y



$z = b$  (véase Fig. 5), la solución de la Ec. (2.12) dá las siguientes fórmulas de conexión.

El punto de retorno está a la derecha de la región clásica (véase Fig.

6):

$$\frac{2}{\sqrt{k(z)}} \cos \left( \int_z^b k(z) dz - \frac{1}{4} \pi \right) \leftarrow \frac{1}{\sqrt{ik(z)}} e^{-i \int_b^z k(z) dz}, \quad (2.13)$$

$$\frac{1}{\sqrt{k(z)}} \text{sen} \left( \int_z^b k(z) dz - \frac{1}{4} \pi \right) \rightarrow -\frac{1}{\sqrt{ik(z)}} e^{i \int_b^z k(z) dz}, \quad (2.14)$$

El punto de retorno está a la izquierda de la región clásica (véase

Fig. 7):

$$\frac{1}{\sqrt{ik(z)}} e^{-i \int_z^a k(z) dz} \rightarrow \frac{2}{\sqrt{k(z)}} \cos \left( \int_a^z k(z) dz - \frac{1}{4} \pi \right), \quad (2.15)$$

$$-\frac{1}{\sqrt{ik(z)}} e^{i \int_z^a k(z) dz} \leftarrow \frac{1}{\sqrt{k(z)}} \text{sen} \left( \int_a^z k(z) dz - \frac{1}{4} \pi \right), \quad (2.16)$$

en donde las flechas indican la dirección en que deben ser usadas para evitar errores considerables en la aproximación.

La aproximación (2.10) junto con las fórmulas de conexión pueden ser aplicadas para deducir una ecuación para las energías de estados ligados. La aproximación WKB se aplicará en las regiones 1, 2 y 3 de la Fig. 5 lejos de los puntos de retorno, y las fórmulas de conexión cerca de los puntos  $z = a$  y  $z = b$ .

Ya que  $\psi(z)$  debe ser finita, las soluciones que se incrementan exponencialmente a medida que se alejan de los puntos de retorno deben anularse. Por lo tanto, la función de onda sin normalizar en la región 1 es

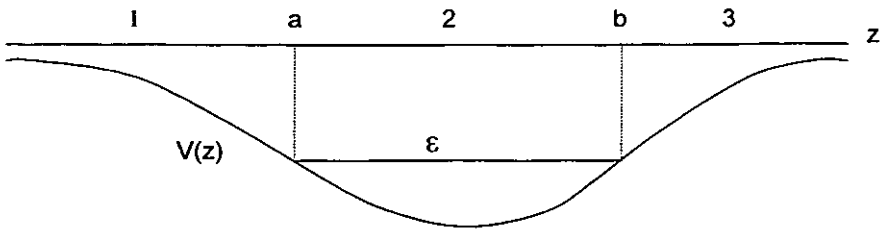


Fig. 5. Clásicamente una partícula de energía  $\epsilon$  está confinada a la región entre  $a$  y  $b$ .

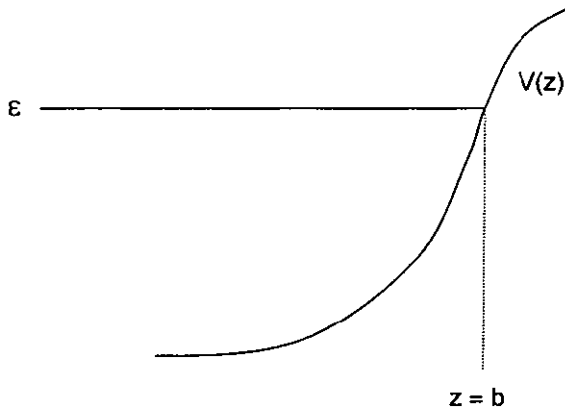


Fig. 6. El punto de retorno está a la derecha de la región clásica.

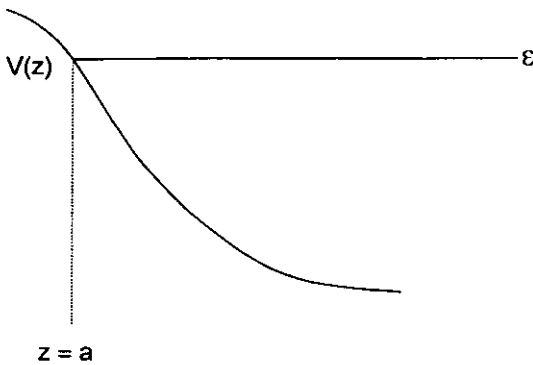


Fig. 7. El punto de retorno está a la izquierda de la región clásica

$$\psi_1(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{ik(z)}} e^{-i \int_z^a k(z) dz} \quad z < a,$$

y por la Ec. (2.15)

$$\psi_2(z) \simeq \frac{2}{\sqrt{k(z)}} \cos \left( \int_a^z k(z) dz - \frac{1}{4} \pi \right) \quad a < x < b,$$

que puede ser escrito como

$$\begin{aligned} \psi_2(z) &\simeq \frac{2}{\sqrt{k(z)}} \cos \left( \int_a^b k(z) dz - \int_z^b k(z) dz - \frac{1}{4} \pi \right) \\ &= -\frac{2}{\sqrt{k(z)}} \cos \left( \int_a^b k(z) dz \right) \text{sen} \left( \int_z^b k(z) dz - \frac{1}{4} \pi \right) \\ &\quad + \frac{2}{\sqrt{k(z)}} \text{sen} \left( \int_a^b k(z) dz \right) \cos \left( \int_z^b k(z) dz - \frac{1}{4} \pi \right), \quad (2.17) \end{aligned}$$

en donde se usó la identidad  $\cos(A + B) = \text{sen}(A + B + \pi/2)$ . Por otro lado, de las Ecs. (2.13) y (2.14) para el punto de retorno en  $z = b$ , se tiene que en la expresión (2.17) sólo el segundo término en la suma da origen a una expresión exponencial decreciente y el primero debe ser cero, entonces debe satisfacerse que  $\cos \left( \int_a^b k(z) dz \right) = 0$  y por lo tanto

$$\int_a^b k(z) dz = \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad (2.18)$$

en donde,  $n = 0, 1, 2, \dots$ . La expresión (2.18) determina los posibles valores discretos de  $\mathcal{E}_n$ , tal que los puntos de retorno cumplen  $V(b) = V(a) = \mathcal{E}_n$ .

Las condiciones para usar el método WKB implican que este método puede aplicarse sólo a pozos cuya anchura sea de varias longitudes de onda,

es decir,  $|b - a| \gg \lambda$ . Y además, ya que  $2\pi/\lambda(z) = p(z)/\hbar = k(z)$ , la Ec. (2.18) afirma que la aproximación semiclásica puede ser utilizada sólo para el estudio de estados caracterizados por un número cuántico  $n$  grande.

## 2.2 Teoría de perturbaciones aplicada al efecto Stark en 3D

A continuación presentamos algunos resultados de la teoría de perturbaciones necesarios para estudiar el átomo de hidrógeno en 3D. Como se dijo anteriormente, la teoría de perturbaciones es aplicable sólo si el problema difiere poco de un problema con soluciones exactas. En efecto, supongamos que tenemos los eigenvalores y el conjunto completo de eigenfunciones para el Hamiltoniano  $\widehat{H}_0$

$$\widehat{H}_0 \phi_n(z) = \mathcal{E}_n^0 \phi_n(z), \quad (2.19)$$

y nos preguntamos sobre los valores propios para

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \lambda \widehat{H}_1,$$

esto es, las soluciones de la ecuación

$$(\widehat{H}_0 + \lambda \widehat{H}_1) \psi_n = \mathcal{E}_n \psi_n, \quad (2.20)$$

asumiendo que cuando  $\lambda \rightarrow 0$ ;  $\mathcal{E}_n \rightarrow \mathcal{E}_n^0$  y  $\psi_n \rightarrow \phi_n$ . Aquí  $\lambda$  representa el parámetro de perturbación e indica la medida de que tan grande es la perturbación con respecto al sistema original.

Por un lado, si los estados iniciales sin perturbar  $\phi_n$  no son degenerados, se demuestra que las correcciones a primero y segundo orden en  $\lambda$  a la energía

$\mathcal{E}_n^0$  son respectivamente [1]:

$$\mathcal{E}_n^{(1)} = \langle \phi_n | \lambda \widehat{H}_1 | \phi_n \rangle, \quad (2.21)$$

$$\mathcal{E}_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \phi_k | \lambda \widehat{H}_1 | \phi_n \rangle|^2}{\mathcal{E}_n^0 - \mathcal{E}_k^0}, \quad (2.22)$$

estas correcciones son grandes si tanto el cambio en el potencial como en la densidad de probabilidad  $|\phi_n(r)|^2$  lo son también. La correspondiente corrección a primer orden a la eigenfunción  $\phi_n$  es:

$$\psi_n = \phi_n + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \phi_k | \lambda \widehat{H}_1 | \phi_n \rangle}{\mathcal{E}_n^0 - \mathcal{E}_k^0} \phi_k. \quad (2.23)$$

Por el otro lado, si el estado inicial sin perturbar de un sistema es degenerado, es decir, hay un conjunto finito de estados  $\phi_n^{(i)}$  que tienen la misma energía  $\mathcal{E}_n^0$ , la corrección a primer orden en la energía, corresponde a resolver el siguiente sistema de ecuaciones [1, 3]

$$\sum_i \alpha_i \langle \phi_n^{(j)} | \lambda \widehat{H}_1 | \phi_n^{(i)} \rangle = \lambda \mathcal{E}_n^{(1)} \alpha_j, \quad (2.24)$$

en donde los coeficientes  $\alpha_k$  deberán ser determinados. Esto es, nuevamente nos enfrentamos a resolver un problema de eigenvalores de dimensión finita. Por ejemplo, supongamos que tenemos un par de estados sin perturbar  $\phi_1^{(0)}$ ,  $\phi_2^{(0)}$  ortogonales y que tienen la correspondiente energía  $\mathcal{E}_n^0$ . La corrección a primer orden en la energía implica resolver el sistema

$$W_{11}\alpha_1 + W_{12}\alpha_2 = \mathcal{E}_n^{(1)}\alpha_1$$

$$W_{21}\alpha_1 + W_{22}\alpha_2 = \mathcal{E}_n^{(1)}\alpha_2,$$

en donde se ha definido

$$W_{ik} = \int \phi_i^{(0)*} \widehat{H}_1 \phi_k^{(1)}.$$

Resolviendo el problema de eigenvalores bidimensional la solución viene dada por [2]

$$\varepsilon_n^{(1)} = \frac{1}{2} \left\{ W_{11} + W_{22} \pm \left[ (W_{11} - W_{22})^2 + 4 |W_{12}|^2 \right]^{1/2} \right\}. \quad (2.25)$$

Ahora aplicaremos los resultados anteriores al modelo del átomo de hidrógeno en 3D. Deseamos investigar la influencia de un campo eléctrico externo sobre los niveles de energía. El Hamiltoniano sin perturbar  $\widehat{H}_0$  viene dado por

$$\widehat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(r)}{dr^2} - \frac{Ze^2}{r},$$

y la perturbación por

$$\lambda \widehat{H}_1 = -eE \cdot \vec{r} = -eEz,$$

que representa la interacción del electrón con el campo eléctrico  $E$ , tomado en la dirección  $z$ , y  $\lambda$  representa el parámetro de perturbación. Las soluciones  $\psi_{nlm}(r)$  de la ecuación de Schrödinger con el Hamiltoniano  $\widehat{H}_0$  para los dos primeros estados son [2]

$$\begin{aligned} \psi_{100}(r) &= \pi^{-1/2} a_0^{-3/2} e^{-r/a_0} \\ \psi_{200}(r) &= (8\pi)^{-1/2} a_0^{-3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0} \\ \psi_{21-1}(r) &= (64\pi)^{-1/2} a_0^{-5/2} (x - iy) e^{-r/2a_0} \\ \psi_{210}(r) &= (32\pi)^{-1/2} a_0^{-5/2} z e^{-r/2a_0} \\ \psi_{211}(r) &= (64\pi)^{-1/2} a_0^{-5/2} (x + iy) e^{-r/2a_0} \end{aligned} \quad (2.26)$$

con correspondientes energías propias de  $-1$  *Rydberg* para el estado  $n = 1$  y de  $-1/4$  *Rydberg* para el estado  $n = 2$  y  $a_0$  el radio de Bohr. Es decir, para el primer estado excitado existe una degeneración cuádruple.

El cambio en la energía del estado base, el cual no está degenerado, está dado por la expresión 2.21

$$\mathcal{E}_{100}^{(1)} = \langle \phi_{100} | -eEz | \phi_{100} \rangle = -eE \int d^3r |\phi_{100}(r)|^2 z,$$

cuya integral es cero, ya que el cuadrado de la función de onda es siempre una función par, y el potencial de perturbación es una función impar. Así, para el estado base no hay corrección a la energía. No así para la corrección a segundo orden, para la que se encuentra que la corrección es  $\mathcal{E}_{100}^{(2)} = -9a_0^3 E^2/4$ .

Para resolver el sistema (2.24) para el primer estado excitado  $n = 2$  tenemos que hacer las siguientes consideraciones. El estado  $l = 0$  tiene paridad par y el estado  $l = 1$  tiene paridad impar; el potencial de perturbación ( $z$ ) conmuta con el operador  $L_z$ , tal que sólo conecta estados con el mismo valor  $m$ . La paridad nos obliga a considerar sólo términos en los cuales el potencial de perturbación debe conectar términos de  $l = 1$  a  $l = 0$ , es decir,  $\langle \phi_{2l\pm 1} | z | \phi_{2l\pm 1} \rangle = 0$ . De modo que el sistema de ecuaciones (2.24) se reduce a una matriz de  $2 \times 2$

$$eE \begin{pmatrix} \langle \phi_{200} | z | \phi_{200} \rangle & \langle \phi_{200} | z | \phi_{210} \rangle \\ \langle \phi_{210} | z | \phi_{200} \rangle & \langle \phi_{210} | z | \phi_{210} \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \mathcal{E}^{(1)} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Por consideraciones de paridad, los elementos de la diagonal son cero, y los elementos fuera de la diagonal son iguales, ya que entre ellos son complejos conjugados. Por lo tanto, usando la expresión (2.25), las correcciones a la energía a primer orden en  $E$  para el estado  $n = 2$  son

$$\mathcal{E}_2^{(1)} = \pm 3ea_0E, \quad (2.28)$$

y los correspondientes estados propios propiamente normalizados

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad y \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Es decir, el efecto Stark lineal en los estados  $n = 2$  proporciona un desdoblamiento de los niveles degenerados como se muestra en la Fig. 8. Los estados  $m = 1$  y  $m = -1$  permanecen degenerados y sin alteración a su energía; los estados  $m = 0$  rompen la degeneración cuádruple para adquirir una energía extra dada por la igualdad (2.28).

## 2.3 Método de *disparo*

Debido a que las rutinas para resolver numéricamente ecuaciones diferenciales ordinarias (Runge-Kutta, Euler [19]), resuelven esencialmente problemas de condiciones iniciales, se deben de adaptar estas rutinas para resolver problemas de condiciones de frontera. Este es el papel básico que juega el método de *disparo*.

La metodología a seguir es la siguiente [20]. Para resolver un problema valuado en la frontera, se crea un problema de valor inicial suponiendo que se tiene un número suficiente de valores iniciales. (Por ejemplo, se escoge el extremo derecho del intervalo como el punto ó condición inicial). Enseguida se resuelve este problema de valor inicial, obteniendo una solución, ésta se evalúa y se compara con las condiciones dadas en la otra frontera. Cuando ambas coincidan, entonces se tendrá la solución apropiada al problema de valores en la frontera.



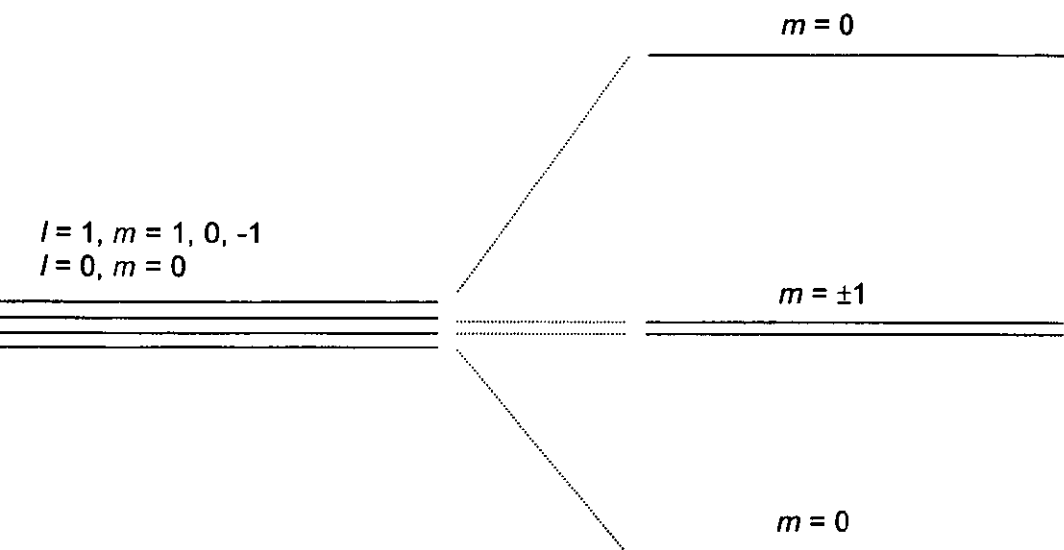


Fig. 8. La cuádruple degeneración en el estado  $n = 2$  es alterada por la perturbación del campo eléctrico. Los estados  $m = \pm 1$  permanecen degenerados y los estados  $m = 0$  rompen la degeneración inicial.

Veamos un ejemplo sencillo de como aplicar este método. Supongamos que queremos resolver la ecuación de Schrödinger para un sistema que consiste de un electrón confinado en la región  $0 < x < 1$  debido a la presencia de paredes rígidas en 0 y 1. Dentro de esta región el potencial es  $V(x) = 1$ . Fuera de ella no existe potencial alguno. La ecuación diferencial de segundo orden que describe al sistema es

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + (\varepsilon - 1)\phi(x) = 0, \quad (2.30)$$

sujeta a las siguientes condiciones a la frontera

$$\phi(0) = 0, \quad \phi(1) = 0.$$

en donde  $\varepsilon$  es el valor propio de la energía buscado. Para convertir nuestro problema a uno de condiciones iniciales, necesitamos otra condición inicial en cualquiera de los extremos, ya que estamos tratando de resolver una ecuación diferencial de segundo orden. Tomemos  $x = 0$  como punto inicial y consideramos la condición adicional en ese punto como  $\phi'(0) = 1$ . Finalmente, damos un valor al parámetro  $\varepsilon$  y resolvemos numéricamente. A la función hallada  $\phi_1(x)$  la evaluamos en el otro punto frontera  $x = 1$  y comparamos con el valor esperado (en este caso, cero). Si coincide, habremos hallado un valor y una función propia para esta ecuación, en caso contrario, se cambia el valor de  $\varepsilon$  tantas veces como sea necesario hasta encontrar la función que satisfaga la condición en el extremo derecho. En la Fig. 9 se muestran las funciones encontradas para diferentes  $\varepsilon$ ; el valor propio del estado base para este problema se encuentra en  $\varepsilon = 10.86958$ , y se observa que la función propia no tiene nodos, como era de esperarse. Nótese que las funciones no están normalizadas.

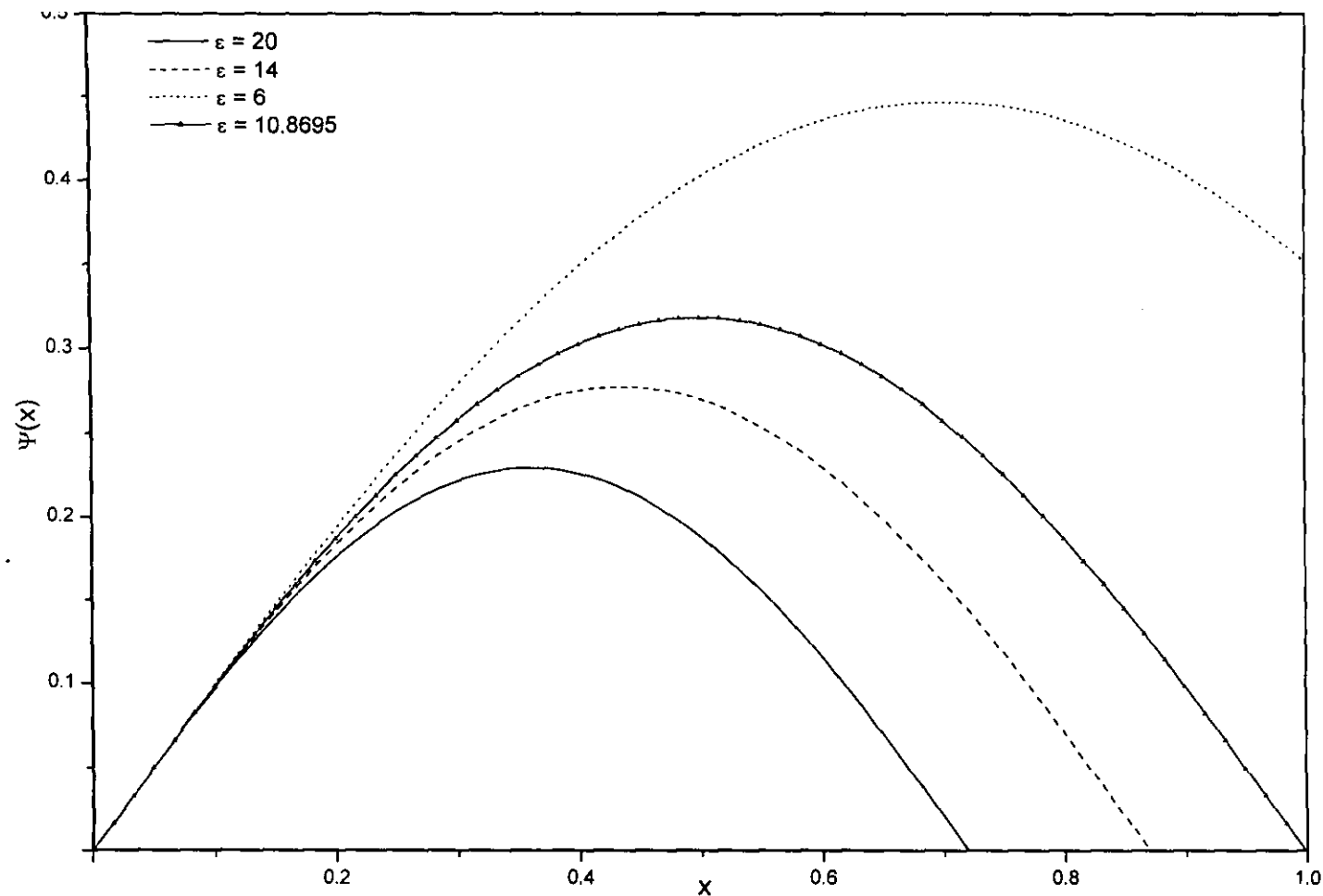


Fig. 9. Soluciones encontradas para distintos valores de  $\epsilon$ . El valor que cumple las condiciones a la frontera es  $\epsilon = 10.8695$ .

## Capítulo 3

# Efecto Stark Confinado en una Dimensión

En este capítulo estudiaremos las propiedades electrónicas de un sistema cuántico formado por dos partículas que interactúan por medio de un campo coulombiano y que está sometido a un campo eléctrico uniforme  $E$  sobre una región confinada del espacio de magnitud  $2a$  ( $-a < x < a$ ).

Plantaremos la correspondiente ecuación de Schrödinger de nuestro sistema y la expresamos en términos de variables adimensionales normalizando con respecto al radio de Bohr. Deducimos expresiones asintóticas para representar las funciones propias de la ecuación de Schrödinger en las regiones en donde no actúa el campo uniforme  $|x| \geq a$  y las utilizamos para evaluarlas como condiciones de frontera para de esta manera encontrar numéricamente la solución en la región  $-a < x < a$ .

Por otro lado, con la ayuda del método aproximado WKB estudiamos el comportamiento de nuestro sistema como función del campo eléctrico aplicado. Mostramos que existe un campo eléctrico crítico ó de ionización por arriba del cual no existen estados ligados y estimamos dicho campo de ioni-

zación.

Finalmente, y ya que se puede pensar en la posibilidad de aplicar teoría de perturbaciones a nuestro modelo, presentamos una pequeña discusión del porque no es conveniente usar esta teoría para obtener soluciones propias cuando el campo eléctrico aplicado es débil.

### 3.1 La ecuación de Schrödinger adimensional

El sistema cuántico consiste de dos partículas con cargas opuestas sometidas a la acción de un campo eléctrico  $E$  uniforme y confinado en una región del espacio de magnitud  $2a$ . Este campo es análogo al campo uniforme generado por un capacitor con paredes en  $-a$  y en  $a$  (véase Fig. 10). El electrón que se mueve en la dirección  $x$ , siente la acción del potencial coulombiano atractivo generado por la carga positiva  $|e|$  más el potencial debido al campo eléctrico  $E$ . Si éstas partículas ligadas se encuentran en una estructura cristalina (como un excitón), el potencial coulombiano se vé apantallado por la constante dieléctrica  $\epsilon$  de la estructura.

Por lo tanto, la ecuación de Schrödinger que describe al sistema es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = \mathcal{E}\psi(x), \quad (3.1)$$

en donde  $V(x)$

$$V(x) \equiv \begin{cases} -eEx - \frac{e^2}{\epsilon|x|} & |x| < a \\ eEa - \frac{e^2}{\epsilon|x|} & x < -a \\ -eEa - \frac{e^2}{\epsilon|x|} & x > a \end{cases} \quad (3.2)$$

y  $\mathcal{E}$  es el valor de la energía buscado.

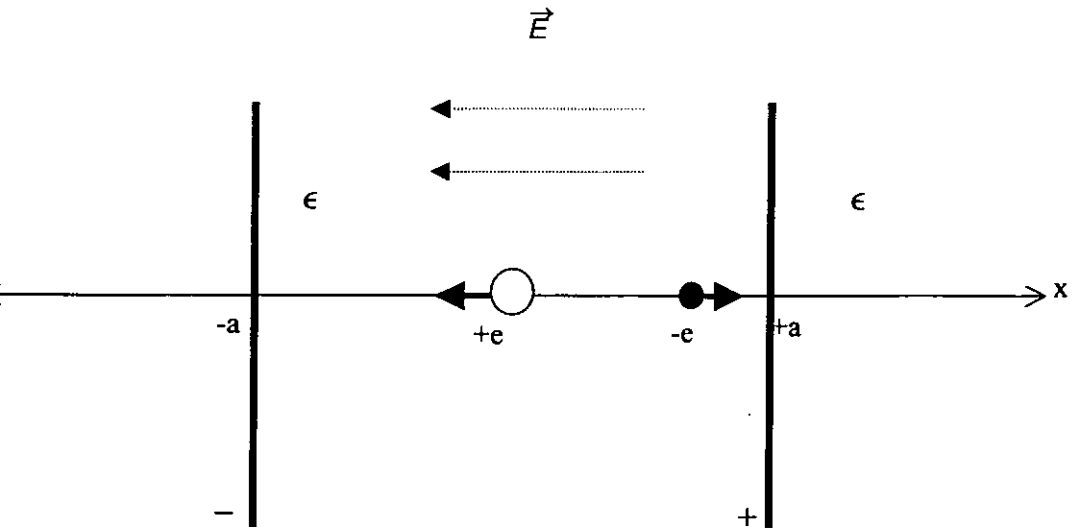


Fig. 10. Analogía de un capacitor en tres dimensiones en donde un campo eléctrico uniforme  $E$  actúa sobre dos partículas de cargas opuestas en una región confinada de tamaño  $2a$ . Las partículas interactúan entre sí por medio de un potencial coulombiano y se mueven en un material de constante dieléctrica  $\epsilon$ . La flecha sobre cada partícula indica la fuerza que actúa sobre ellas.

Para el tratamiento de la ecuación general (3.1) es conveniente introducir una nueva variable adimensional en términos del radio de Bohr  $r_B \equiv \epsilon \hbar^2 / 2mq^2$ , de modo que definiendo

$$z \equiv \frac{x}{r_B} \equiv \frac{2mq^2}{\epsilon \hbar^2} x, \quad (3.3)$$

obtenemos para el intervalo  $|x| < a$  que la Ec. (3.1) toma la forma

$$\frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} + \left[ \lambda z + \frac{1}{|z|} + \mathcal{E}_n \right] \psi(z) = 0 \quad |z| < \bar{a} \quad (3.4)$$

en donde

$$\lambda \equiv \frac{2mqEr_B^3}{\hbar^2}, \quad \mathcal{E}_n \equiv \frac{2mr_B^2 \mathcal{E}}{\hbar^2},$$

$$\bar{a} \equiv \frac{a}{r_B} \equiv \frac{2aq^2 m}{\epsilon \hbar^2}. \quad (3.5)$$

son parámetros adimensionales que corresponden al campo eléctrico uniforme, la energía propia del sistema y a la mitad del grueso del capacitor.

Por otro lado en el intervalo  $|x| > a$ , se tiene que la Ec. (3.1), también puede escribirse en términos de los parámetros adimensionales anteriores de la siguiente manera,

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{|z|} + \gamma_\delta \right] \psi(z) = 0, \quad |z| > \bar{a} \quad (3.6)$$

en donde  $\delta$  toma valores de 1 para el potencial a la izquierda de  $-\bar{a}$  y -1 para el potencial del lado derecho de  $\bar{a}$  y se ha definido el parámetro  $\gamma_\delta \equiv \mathcal{E}_n - \delta \lambda \bar{a}$ .

Ahora podemos escribir la ecuación de Schrödinger adimensional para todas las regiones de la siguiente manera

$$-\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + V(z)\psi(z) = \mathcal{E}_n\psi(z), \quad (3.7)$$

en donde  $V(z)$  está definido como (véase Fig. 11)

$$V(z) \equiv \begin{cases} -\lambda z - \frac{1}{|z|} & |z| < \bar{a} \\ \lambda\bar{a} - \frac{1}{|z|} & z < -\bar{a} \\ -\lambda\bar{a} - \frac{1}{|z|} & z > \bar{a} \end{cases} \quad (3.8)$$

## 3.2 Método de solución

### 3.2.1 Solución asintótica

Nótese que la Ec. (3.6) que describe las regiones fuera del capacitor no es más que la ecuación de Schrödinger unidimensional, cuyas eigenfunciones asociadas a los estados ligados ( $\mathcal{E}_n - \delta\lambda\bar{a} < 0$ ) han sido previamente estudiadas por Loudon [21] y están dadas por

$$W(\bar{z} = -\delta y) = \frac{e^{-\frac{1}{2}\bar{z}}}{\Gamma(-\alpha)} \bar{z} {}_1F_1(1-\alpha; 2; \bar{z}) \\ [\log(\bar{z}) + f(1-\alpha) - f(1) - f(2)] \\ - \frac{1}{\alpha} + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(1-\alpha)_r}{r!(r+1)} A_r \bar{z}^{r+1}, \quad (3.9)$$

con

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

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

en donde recordemos que por la definición de  $\delta$  se incluyen los casos de  $z$  positiva y negativa y donde  $f(s) = (\log \Gamma(s))' = \Gamma'(s)/\Gamma(s)$  es la derivada



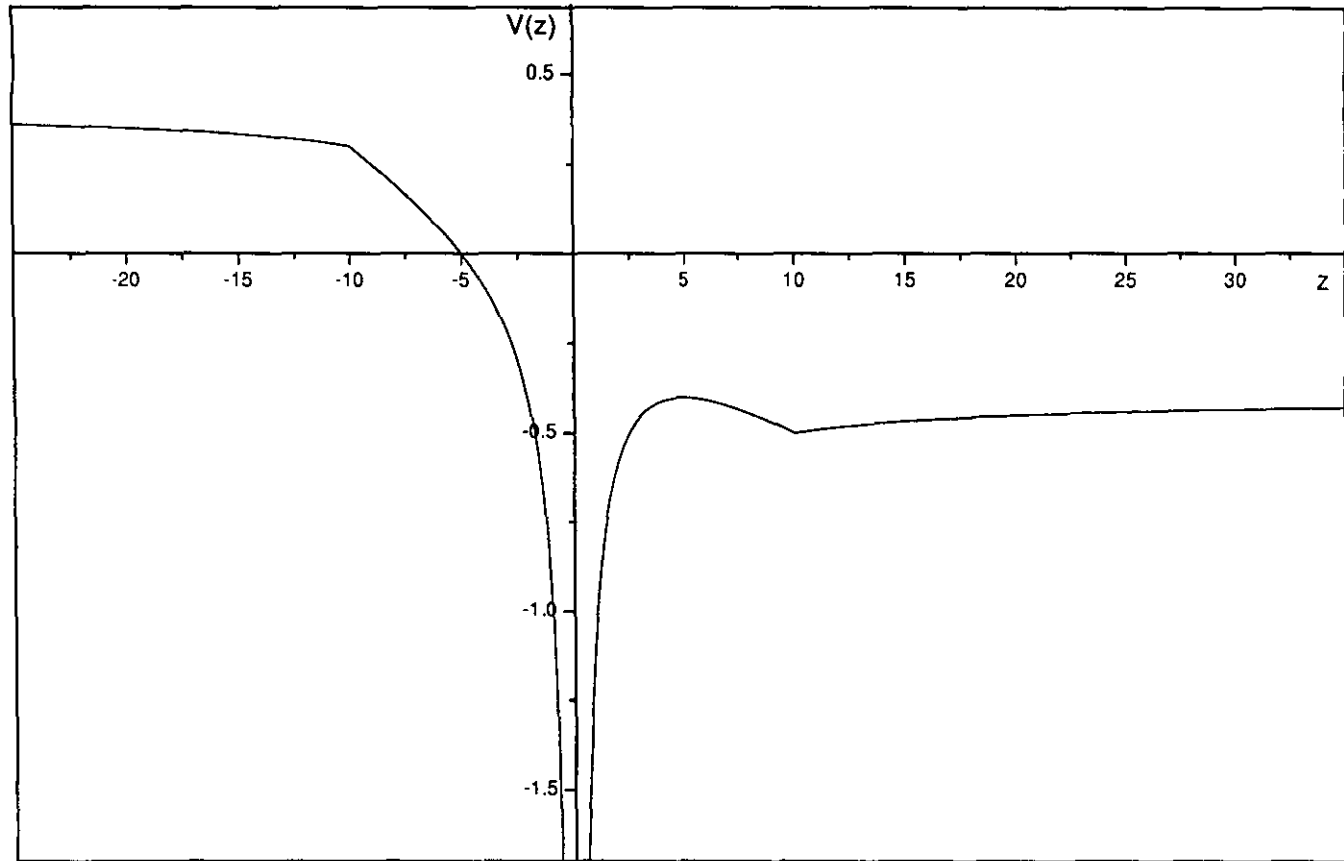


Fig. 11. El potencial  $V(z)$  para el sistema de dos partículas con cargas opuestas que interactúan entre sí por medio de un potencial coulombiano y que se encuentran bajo la acción de un campo eléctrico uniforme  $\lambda$  confinado en la región de ancho  $2\bar{a}$ . Aquí  $\lambda = 0.04$  y  $\bar{a} = 10$ .

logarítmica de la función gama  $\Gamma(s)$  [22],  ${}_1F_1(1 - \alpha; 2; \bar{z}_\delta)$  es la función hipergeométrica confluyente [23] y  $(c)_r$  es el símbolo de Pochhammer [24]. Aquí las variables adimensionales están definidas por,  $\alpha \equiv \sqrt{-\hbar^2/2ma_0^2\mathcal{E}_\delta}$ ,  $a_0 \equiv \epsilon\hbar^2/mq^2$ ,  $y \equiv 2x/\alpha a_0$ , con  $\mathcal{E}_\delta = \mathcal{E} - \delta qEa$ . Esta solución fué encontrada por Loudon usando el método de Frobenius [25] y tiene la propiedad de que en el origen es finita, pero diverge en  $\pm$ infinito excepto cuando  $\alpha$  toma los valores cuantizados correspondientes al átomo de hidrógeno.

Sin embargo para construir una solución apropiada para nuestro problema, debemos ignorar por ahora el comportamiento en el origen y solo representar el dominio  $|z| > \bar{a}$ , que es la región en donde no actúa el campo eléctrico uniforme. Debe recordarse que al igual que para el átomo de hidrógeno en 3D, podemos construir una solución proponiéndola como el producto de una exponencial decayente por una serie de potencias positivas y negativas [25, 26]. Este método es un caso particular del teorema de Frobenius en donde hemos tomado como punto de desarrollo el infinito. Así pues, tomemos la Ec. (3.6), que describe al sistema en la región fuera del capacitor para los valores del parámetro  $\gamma_\delta \equiv \mathcal{E}_n - \delta\lambda\bar{a}$  que correspondan a estados ligados.

El primer paso, como se dijo anteriormente, es proponer una solución general para  $\psi(z)$  tal que cumpla la condición que para valores grandes de  $z$  la solución tienda a cero. La función propuesta para  $z > \bar{a}$  es

$$\psi(z) = e^{-\sqrt{\gamma_\delta}z} z^k \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{z^n}, \quad (3.10)$$

en donde la función exponencial se ha incluido para separar el comportamiento de la solución para valores grandes de  $z$ . Sustituyendo (3.10) en la

Ec.(3.6) y agrupando términos tenemos

$$\sum_{n=-1}^{\infty} \frac{c_n [1 + 2\sqrt{\gamma}(n-k)]}{z^{n-k+1}} + \sum_{n=-2}^{\infty} \frac{c_n(n-k)(n-k+1)}{z^{n-k+2}} = 0,$$

y realizando el cambio  $n = m + 1$  en la primer suma y  $n = m$  en la segunda, se llega a

$$\sum_{m=-2}^{\infty} \frac{c_{m+1} [1 + 2b(m+1-k)]}{z^{m-k+2}} + \sum_{m=-2}^{\infty} \frac{c_m(m-k)(m-k+1)}{z^{m-k+2}} = 0.$$

Si se igualan los términos con la misma potencia en  $z$  obtenemos la siguiente relación de recurrencia

$$c_{m+1} = -\frac{(m-k)(m+1-k)}{1 + 2\sqrt{\gamma_\delta}(m+1-k)} c_m. \quad (3.11)$$

Para hallar el primer término se debe cumplir  $m = -1$ , con lo cual,

$$c_0 = -\frac{(1-k)(-k)}{1 + 2\sqrt{\gamma_\delta}(-k)} c_{-1}, \quad (3.12)$$

y de la Ec. (3.10) nótese que por construcción  $c_n \neq 0$  sólo para  $n \geq 0$ .

Por tanto  $c_{-1} = 0$ , pero si  $c_0 \neq 0$  se tiene que cumplir necesariamente que

$$1 + 2\sqrt{\gamma_\delta}(-k) = 0, \text{ de donde } k = 1/(2\sqrt{\gamma_\delta}).$$

Sustituyendo el valor de  $k$  en la expresión (3.11), se obtienen los primeros términos  $c_n$

$$c_{n+1} = -\frac{\left(n+1 - 1/(2\sqrt{\gamma_\delta})\right) \left(n - 1/(2\sqrt{\gamma_\delta})\right)}{2\sqrt{\gamma_\delta}(n+1)} c_n. \quad (3.13)$$

por lo que

$$c_n = \frac{(-1)^n \left(n - \frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right) \left(n-1 - \frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)^2 \left(n-2 - \frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)^2 \dots}{\left(2\sqrt{\gamma_\delta}\right)^n n!}$$

$$\dots \times \left(1 - \frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)^2 \left(-\frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right),$$

o en términos de las funciones factoriales

$$c_n = \frac{1}{n!} \left(-\frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)^n \frac{\left(n - \frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)! \left(n - 1 - \frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)!}{\left(-\frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)! \left(-1 - \frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)!} c_0 \quad (3.14)$$

y en términos del símbolo de Pochhammer se obtiene

$$c_n = \frac{1}{n!} \left(-\frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)^n \left(1 - \frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)_n \left(-\frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)_n c_0.$$

Finalmente la solución para el intervalo  $z > \bar{a}$  es,

$$\begin{aligned} \psi(z) = & c_0 e^{-\sqrt{\gamma_\delta} z} z^{1/(2\sqrt{\gamma_\delta})} \\ & \sum_{n=0}^{(1/(2\sqrt{\gamma_\delta})) + 2} \frac{1}{n!} \left(-\frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}} z\right)^n \left(1 - \frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)_n \left(-\frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)_n \end{aligned} \quad (3.15)$$

en donde  $c_0$  es la constante de normalización que se determinará más adelante cuando se obtenga la solución en todo el dominio. De igual manera, siguiendo el razonamiento anterior, se encuentra que la solución para el intervalo  $z < \bar{a}$  es

$$\begin{aligned} \psi(z) = & c_0 e^{\sqrt{\gamma_\delta} z} z^{1/(2\sqrt{\gamma_\delta})} \\ & \sum_{n=0}^{(1/(2\sqrt{\gamma_\delta})) + 2} \frac{1}{n!} \left(-\frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}} z\right)^n \left(1 - \frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)_n \left(-\frac{1}{2\sqrt{\gamma_\delta}}\right)_n \end{aligned} \quad (3.16)$$

Necesitamos calcular con precisión los valores de las expansiones asintóticas (3.15) y (3.16) ya que, como se discutirá en detalle en la sección

siguiente, estas expresiones serán usadas como condiciones de frontera para calcular numéricamente la solución dentro del capacitor. Para ello en el apéndice B analizamos la convergencia numérica de las series, lo cual nos permitirá truncar las series con la precisión deseada.

Antes de cerrar esta sección haremos una digresión que nos permitirá verificar la consistencia de los desarrollos asintóticos (3.15) y (3.16) con desarrollos en serie de potencias que son más comunmente usados para representar las soluciones de la ecuación de Schrödinger. Nótese que si extendemos el dominio de la Ec. (3.6) para incluir el origen ( $z = 0$ ), entonces los desarrollos (3.15) y (3.16) deben reducirse a la solución del átomo 1D en el caso en el que reducimos el tamaño del capacitor hasta cero. En efecto, si  $\psi(z)$  en la solución (3.15) es finita en  $z = 0$ , entonces sólo hay potencias positivas en esta serie, con lo cual de la relación (3.13) se observa que si  $1/2\sqrt{\gamma} = N$ , con  $N$  entero positivo, los coeficientes  $c_n$  son nulos para  $n > N$  y por ende la expresión (3.15) solo contiene potencias positivas en este caso. Usando las definiciones de los parámetros  $\mathcal{E}_n$ ,  $\lambda$  y  $\bar{a}$ , junto con la condición anterior, tenemos,

$$1/(4N^2) = \frac{2mr_B^2 \mathcal{E}}{\hbar^2} = \frac{2mr_B^2}{\hbar^2} \mathcal{E},$$

de donde

$$\mathcal{E} = \frac{mq^d}{2\epsilon^2 \hbar^2 N^2}. \quad (3.17)$$

### 3.2.2 Solución dentro del capacitor

Obsérvese de la Ec. (3.4) que en el intervalo  $|z| < \bar{a}$ , además del potencial coulombiano entre cargas, se tiene un potencial asociado a un campo eléc-

trico uniforme  $E$ . Puesto que la Ec. (3.4) no tiene solución analítica, la resolveremos numéricamente con la ayuda del método de *disparo* (véase su descripción en la Sec. 2.3), sujeto a las siguientes condiciones a la frontera

$$\psi_n(\mp \bar{a}) = \psi_\delta(\mp \bar{a}), \quad (3.18)$$

$$\psi'_n(\mp \bar{a}) = \psi'_\delta(\mp \bar{a}), \quad (3.19)$$

en donde  $\psi_\delta(\mp \bar{a})$  y  $\psi'_\delta(\mp \bar{a})$  son la solución asintótica y su derivada respectivamente, dadas por las Ecs. (3.15) y (3.16). En este caso se impone, por ejemplo, las dos condiciones a la frontera en  $-\bar{a}$ ,  $\psi_n(-\bar{a}) = \psi_\delta(-\bar{a})$  y  $\psi'_n(-\bar{a}) = \psi'_\delta(-\bar{a})$ , como condiciones iniciales y se va variando el parámetro  $\gamma$ , el cual contiene a su vez el parámetro de eigenenergía  $\mathcal{E}$  buscado, hasta que el valor  $\psi'_n(\bar{a})/\psi_n(\bar{a})$  obtenido por métodos numéricos coincida con el respectivo valor analítico en el mismo punto, como lo indican las Ecs. (3.18) y (3.19). La razón para considerar el cociente  $\psi'_n(\bar{a})/\psi_n(\bar{a})$ , es que las soluciones usadas no necesariamente están normalizadas y dicha constante de normalización es la misma para la función derivada, de modo que el cociente es independiente de esta constante. Una vez que se tienen los valores de  $\gamma_n$  apropiados, cada uno de ellos se sustituye en la Ec. (3.1) para obtener las eigenfunciones  $\psi_n$  correspondientes numéricamente para un cierto valor del campo eléctrico adimensional  $\lambda$  y de la posición de las paredes del potencial en  $-\bar{a}$  y  $\bar{a}$ . Finalmente las eigenfunciones se normalizan, pidiendo que  $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(z)|^2 dz = 1$ .

Para corroborar que el método de *disparo* proporciona los resultados correctos comparamos los resultados numéricos obtenidos por este método con

los resultados analíticos exactos en el caso de campo eléctrico nulo que han sido dados previamente por Loudon [21].

### 3.2.3 Resultados

Aplicando el método de *disparo* mencionado en la sección anterior al problema definido por la Ec. (3.7) y las condiciones (3.18), (3.19), encontramos el valor propio  $\mathcal{E}_n$  y función propia  $\psi_n$  del estado base para diferentes anchos del capacitor  $2\bar{a}$ , y distintos valores de la intensidad del campo eléctrico  $\lambda$  (véase Tabla 1 y Figs. 12, 13 y 14). Una vez calculados los parámetros adimensionales, usamos las definiciones de  $\gamma_n$ ,  $\lambda$  y  $\mathcal{E}_n$  para obtener finalmente los valores con dimensiones físicas. El ancho del capacitor  $2\bar{a}$  se dá en términos del radio de Bohr  $r_B$ ; los valores de energía y campo eléctrico en  $meV$  y  $kV/m$  respectivamente.

$\bar{a} = x/r_B$	Campo Eléctrico Adimensional $\lambda$	Campo Eléctrico $E$ en $kV/m$	Energía del Edo. Base $\mathcal{E}$ en $meV$
5	0	0	-3.0274
	0.005	7.628	-3.1146
	0.01	15.256	-3.2746
	0.02	30.513	-3.6391
	0.06	91.538	-5.3333
	0.16	244.101	-10.7557
	0.32	488.203	-20.281
10	0	0	-3.0274
	0.005	7.628	-3.1258
	0.01	15.256	-3.3079
	0.02	30.513	-3.7581
	0.025	38.141	-4.0465
	0.03	45.769	-4.4315
	0.08	122.051	-10.2471
15	0	0	-3.0274
	0.005	7.628	-3.1263
	0.01	15.256	-3.3104
	0.013	19.833	-3.4381
	0.017	25.936	-3.6556
	0.018	27.461	-3.7635
	0.025	38.141	-4.9728

Tabla 1. Energías del estado base para tres distintas  $\bar{a}$  y distintos campos eléctricos  $\lambda$ .

Se presentan los respectivos valores en cantidades físicas para la  $GaAs$  para el cual la masa reducida es  $m^* = 0.05m_e$ ,  $\epsilon = 15$  y  $r_B = 79.3 \text{ \AA}$ .

Nótese que a medida que aumentamos el campo eléctrico externo, la energía total del sistema se hace más negativa. Analizando las Figs. 12, 13 y 14, vemos que las funciones de onda cuando el campo eléctrico externo es nulo son antisimétricas; al igual como ocurre en el átomo de hidrógeno en 1D. Pero, al momento de aplicar un campo no nulo, la función de onda pierde su simetría, pues el campo la "empuja" hacia la derecha y empieza a crecer en la región  $x > 0$ , es decir. es más probable encontrar a las partículas en



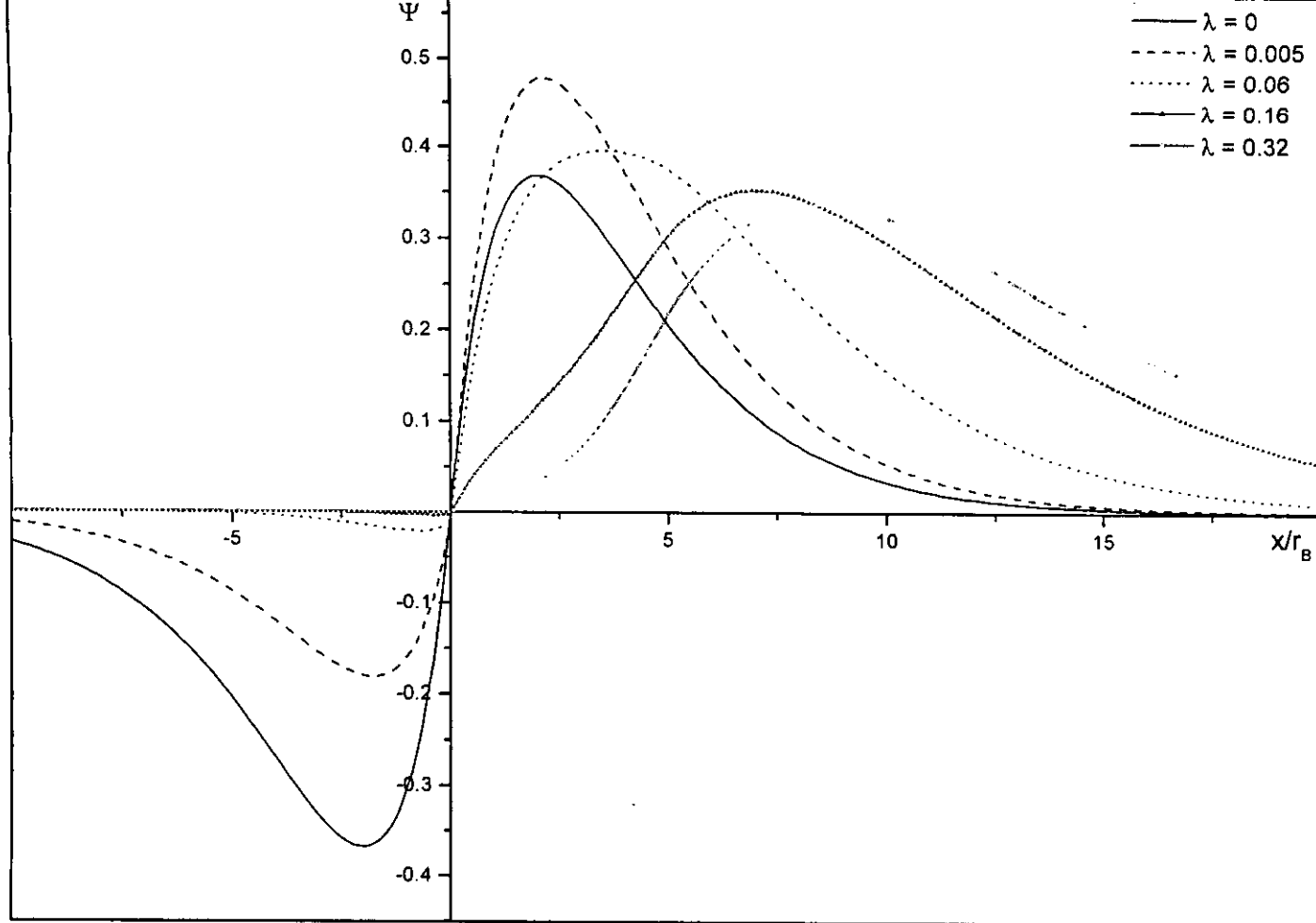


Fig. 12. Funciones del estado base para  $\bar{a} = 5$  y diferentes campos eléctricos  $\lambda$ .

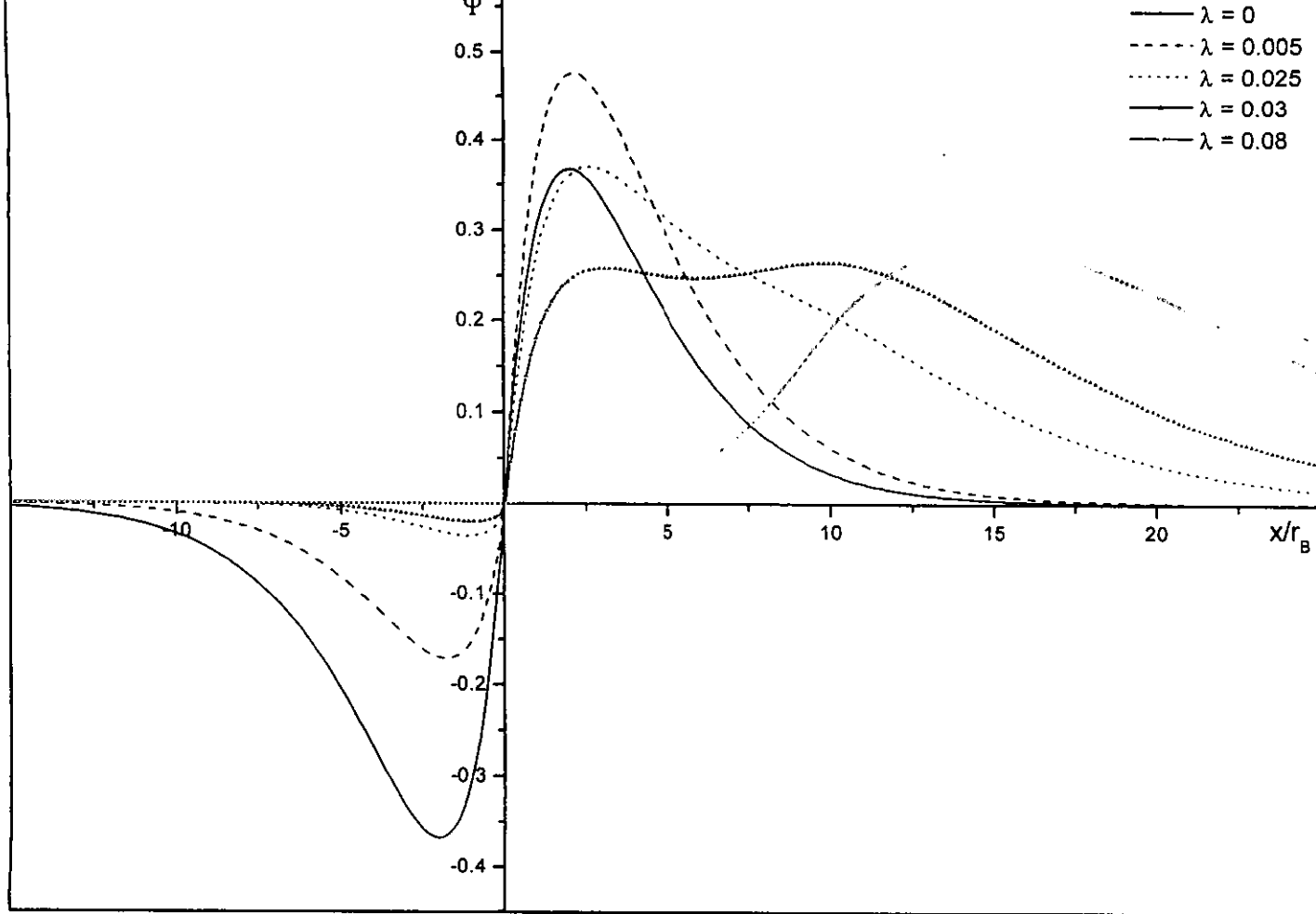


Fig. 13. Funciones del estado base para  $\bar{a} = 10$  y diferentes campos eléctricos  $\lambda$ .

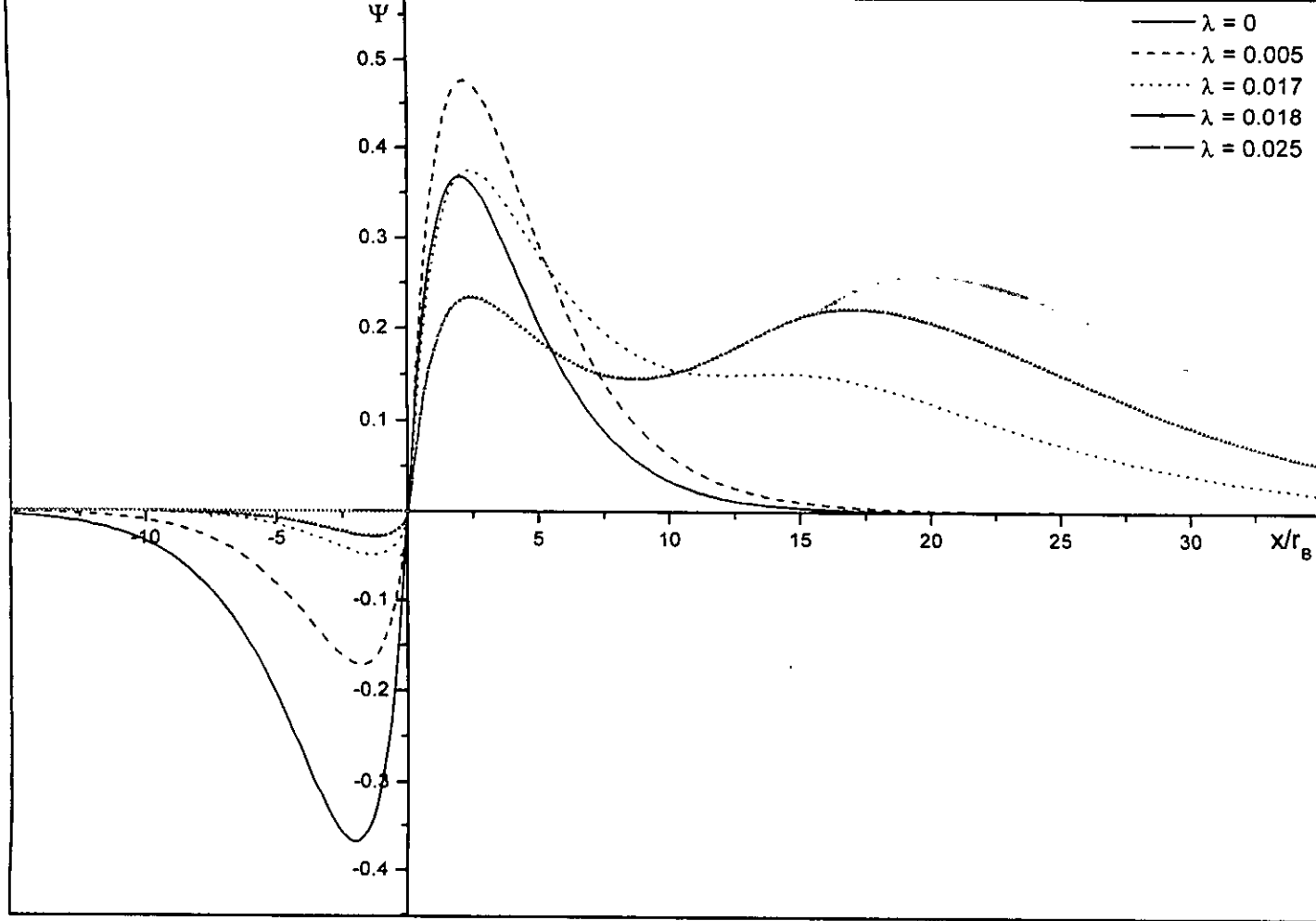


Fig. 14. Funciones del estado base para  $\bar{a} = 15$  y diferentes campos eléctricos  $\lambda$ .

esta región. Este comportamiento puede notarse directamente analizando el potencial dado por la igualdad (3.2). Si usamos el hecho de que el campo eléctrico  $E$  es tomado siempre positivo, a medida que  $E$  aumenta, la pendiente del potencial externo ( $-eEx$ ) en el capacitor se hace cada vez más pronunciada provocando que el potencial atractivo total sobre las partículas dado por  $-eEx - e^2/\epsilon|x|$  en la región  $x > 0$ , sea mayor que para  $x < 0$ , confiando el movimiento de las partículas a una región más pequeña del espacio. Por esta razón  $\mathcal{E}_n$  es más negativa al aumentar el campo  $E$ . Además, vemos que para un campo eléctrico aplicado lo suficientemente grande, la mayor parte de la función de onda se encuentra localizada fuera del capacitor, esto es, aunque las partículas se encuentren todavía ligadas, la probabilidad de encontrarlas dentro del capacitor es casi nula. Cabe señalar que aunque el campo eléctrico sea muy grande, por éste método, no es posible hallar un campo de ionización.

El método de *disparo* nos proporcionó numéricamente las funciones propias y los valores propios del estado más bajo de energía del sistema para distintos campos eléctricos  $E$  aplicados. Pero no sabemos en cuantos estados de energía pueden estar las partículas, ni tampoco si el número de estados es finito o infinito. Tampoco pudimos obtener el valor del campo eléctrico aplicado para el cual es posible ionizar a las partículas. Por ello aplicaremos el método aproximado WKB a nuestro modelo para hallar dicho número, así como el campo de ionización.

### 3.3 Campo de Ionización

El método WKB nos ofrece una manera aproximada de encontrar analíticamente el número de estados ligados que existen antes de que las partículas sean liberadas, así como para que campo umbral el sistema se ioniza.

Sustituyendo la Ec. (3.7) en la expresión (2.18) con el potencial  $V(z)$  dado por la identidad (3.8), se tiene

$$\int_{z_1}^{z_2} \sqrt{\mathcal{E}_n - V(z)} dz = (n + \frac{1}{2})\pi. \quad (3.20)$$

Cuando la partícula se encuentra en cualquiera de los puntos retorno, su momento clásico es cero, por lo tanto, debe cumplirse que

$$\mathcal{E}_n + \lambda z + \frac{1}{|z|} = 0. \quad |z| < \bar{a} \quad (3.21)$$

$$\mathcal{E}_n + \delta\lambda a + \frac{1}{|z|} = 0. \quad |z| > \bar{a} \quad (3.22)$$

en donde  $\delta$  toma valores de  $-1$  para el potencial a la izquierda de  $-\bar{a}$  y  $1$  para el potencial del lado derecho de  $\bar{a}$ .

Resolviendo estas ecuaciones, los posibles puntos de retorno están dados por

$$z = \frac{\mathcal{E}_n}{2\lambda} \left( -1 \pm \sqrt{1 - \text{sig}(z) \frac{4\lambda}{\mathcal{E}_n^2}} \right) \quad |z| < \bar{a} \quad (3.23)$$

$$z = \frac{\text{sig}(z)}{-(\mathcal{E}_n + \delta\lambda a)} \quad |z| > \bar{a} \quad (3.24)$$

en donde  $\text{sig}(z)$  es la función signo definida como  $-1$  si  $z < 1$ ,  $0$  si  $z = 0$  y  $1$  si  $z > 0$  [27]. Para discernir cuales son los puntos auténticos de

retorno, analizaremos el comportamiento de  $V(z)$  y supondremos sin pérdida de generalidad que  $\lambda > 0$ .

Nótese de la Ec. (3.8) que a la izquierda de  $z = 0$  el potencial es

$$V(z) \equiv \begin{cases} -\lambda z + \frac{1}{z} & -\bar{a} < z < 0 \\ \lambda a + \frac{1}{z} & z < -\bar{a} \end{cases} \quad (3.25)$$

que es una función decreciente en todo su dominio, ésto es, no existe ningún mínimo ni máximo local en la región  $z < 0$ , por lo que no es posible tener más de un punto de retorno negativo. De esta manera, y ya que  $\mathcal{E}_n < 0$ , dicho punto estará dado por

$$z = \frac{\mathcal{E}_n}{2\lambda} \left( -1 + \sqrt{1 + \frac{4\lambda}{\mathcal{E}_n^2}} \right) \quad -\bar{a} < z < 0 \quad (3.26)$$

o bien

$$z = \frac{1}{\mathcal{E}_n - \lambda a} \quad z < -\bar{a}. \quad (3.27)$$

En contraste, para  $z > 0$  el potencial es

$$V(z) \equiv \begin{cases} -\lambda z - \frac{1}{z} & 0 < z < \bar{a} \\ -\lambda \bar{a} - \frac{1}{z} & z > \bar{a} \end{cases} \quad (3.28)$$

y es interesante notar que se encuentra un máximo dentro del capacitor que cumple

$$V'(z_c) = -\lambda + \frac{1}{z_c^2} = 0,$$

$$z_c = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}, \quad (3.29)$$

en donde descartamos la solución negativa por estar fuera del dominio de la Ec. (3.28).

Adicionalmente se encuentra un mínimo justo en el borde derecho del capacitor ( $z = \bar{a}$ ) que se puede exhibir directamente a partir de la expresión (3.28), calculando el cambio de pendiente.

En consecuencia, para  $4\lambda/\mathcal{E}_n^2 < 1$  las tres raíces positivas siguientes son puntos de retorno

$$z = \frac{\mathcal{E}_n}{2\lambda} \left( -1 + \sqrt{1 - \frac{4\lambda}{\mathcal{E}_n^2}} \right), \quad z = \frac{\mathcal{E}_n}{2\lambda} \left( -1 - \sqrt{1 - \frac{4\lambda}{\mathcal{E}_n^2}} \right) \quad \text{para } 0 < z < \bar{a} \quad (3.30)$$

o

$$z = \frac{1}{-(\mathcal{E}_n + \lambda a)} \quad \text{para } z > a, \quad (3.31)$$

y por tanto se forman dos pozos contiguos dentro de  $V(z)$ .

Para comparar la profundidad de ambos pozos evaluamos

$$V_c = V(z = z_c) = -2\sqrt{\lambda}, \quad (3.32)$$

que representa el valor de la barrera que separa a ambos pozos y fuera del capacitor y muy lejos en  $z \rightarrow \infty$ , el valor máximo alcanzado por  $V(z)$  es

$$V_\infty = V(z \gg a) = -\lambda \bar{a}, \quad (3.33)$$

que no es otra cosa que la barrera del último pozo de la derecha (véase Fig. 15).

Existen tres posibles casos al comparar  $V_c$  y  $V_\infty$ . El caso I cuando  $V_c < V_\infty$ , ejemplificado en la Fig. 15, se observa que si las partículas logran rebasar la barrera del pozo izquierdo, ellas serán atrapadas por el pozo derecho y el sistema continuará ligado. En el caso II si  $V_c$  supera a  $V_\infty$ , entonces las

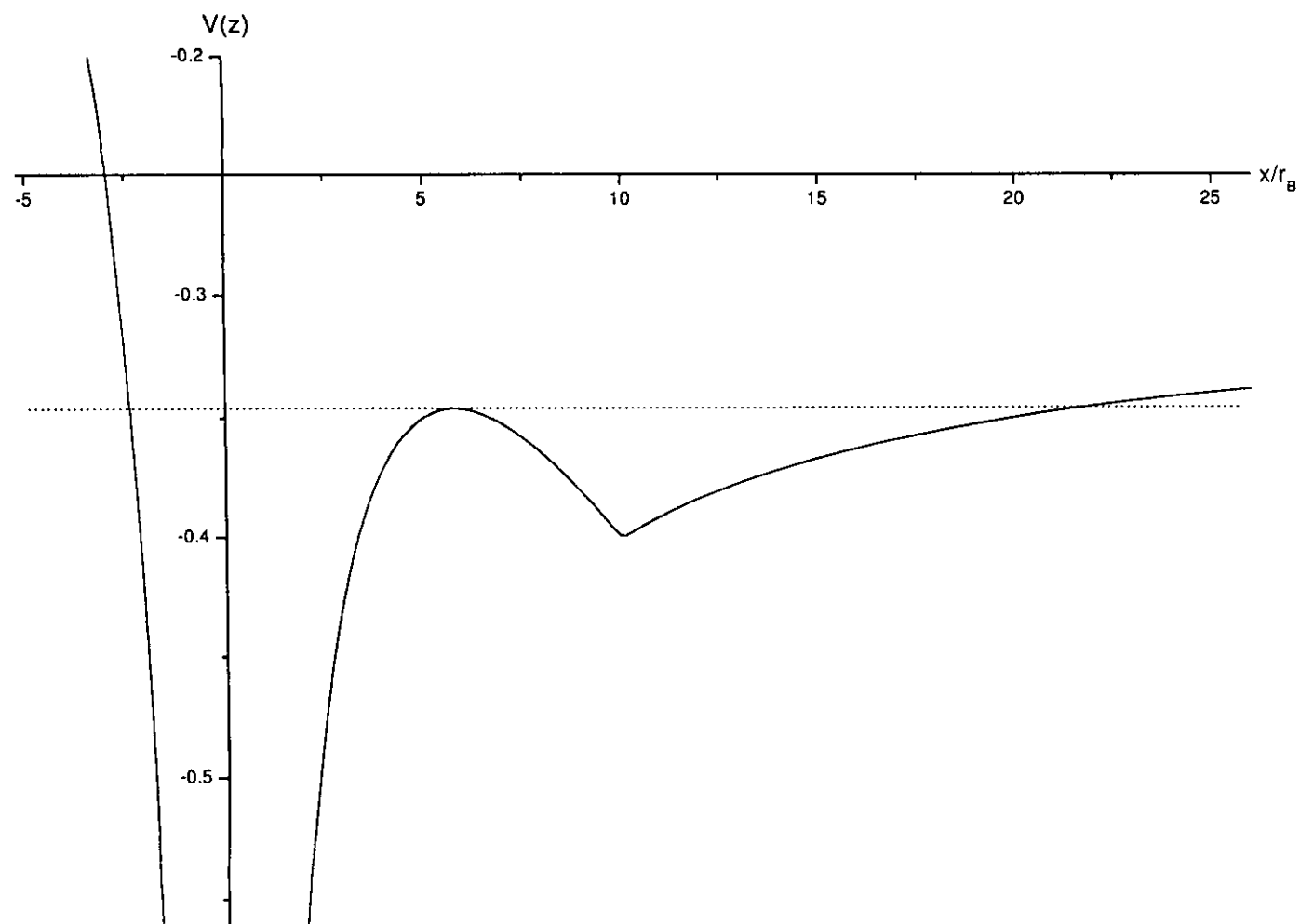


Fig. 15. Formación de dos pozos en  $V(z)$ . Aquí los parámetros tienen valores de  $\bar{a} = 10$  y  $\lambda = 0.03$ . La línea horizontal punteada indica el umbral del pozo izquierdo.



partículas que rebasen la primera barrera no podrán ser atrapadas por el segundo pozo (véase Fig. 16). por lo que tomando el caso III cuando  $V_c = V_\infty$ , notamos de las Ecs. (3.32) y (3.33) que el valor del campo de ionización es el siguiente

$$\lambda = \frac{4}{\bar{a}^2}, \quad (3.34)$$

Por otro lado, de las Ecs. (3.30) y (3.31), notamos que dos puntos de retorno convergen a uno solo cuando  $\mathcal{E}_n^2 = 4\lambda$ , situado en  $z = -\mathcal{E}_n / 2\lambda = 1/\sqrt{\lambda} = z_c$ . Es decir, se unen justo en la barrera máxima. De ésta manera la energía de ionización estará dada por (véase Fig. 17)

$$\mathcal{E}_{ion} = -2\sqrt{\lambda} = -\frac{4}{\bar{a}}, \quad (3.35)$$

y la posición de la mencionada barrera resulta ser

$$z = \frac{\bar{a}}{2}. \quad (3.36)$$

Para estimar el número de estados ligados, sustituimos la energía de ionización en la Ec. (3.20) e integramos sobre los pozos de potencial. Cuando  $V_c = V_\infty$ , justo en el campo de ionización  $\lambda = 4/\bar{a}^2$ , el punto de retorno positivo se localiza en la barrera del pozo derecho (en infinito), en donde  $V_c = V_\infty = -4\bar{a}$  y por lo tanto la integral está dada por

$$\begin{aligned} (n + \frac{1}{2})\pi &= \int_{-\bar{a}/2(\sqrt{2}-1)}^{\infty} \sqrt{-\frac{4}{\bar{a}} + \frac{4}{\bar{a}^2}z + \frac{1}{|z|}} dz \\ &= \int_{-\bar{a}/2(\sqrt{2}-1)}^{\infty} \sqrt{\frac{4}{\bar{a}^2}z} dz = \frac{4}{3\bar{a}} z^{3/2} \Big|_{-\bar{a}/2(\sqrt{2}-1)}^{\infty}, \quad (3.37) \end{aligned}$$

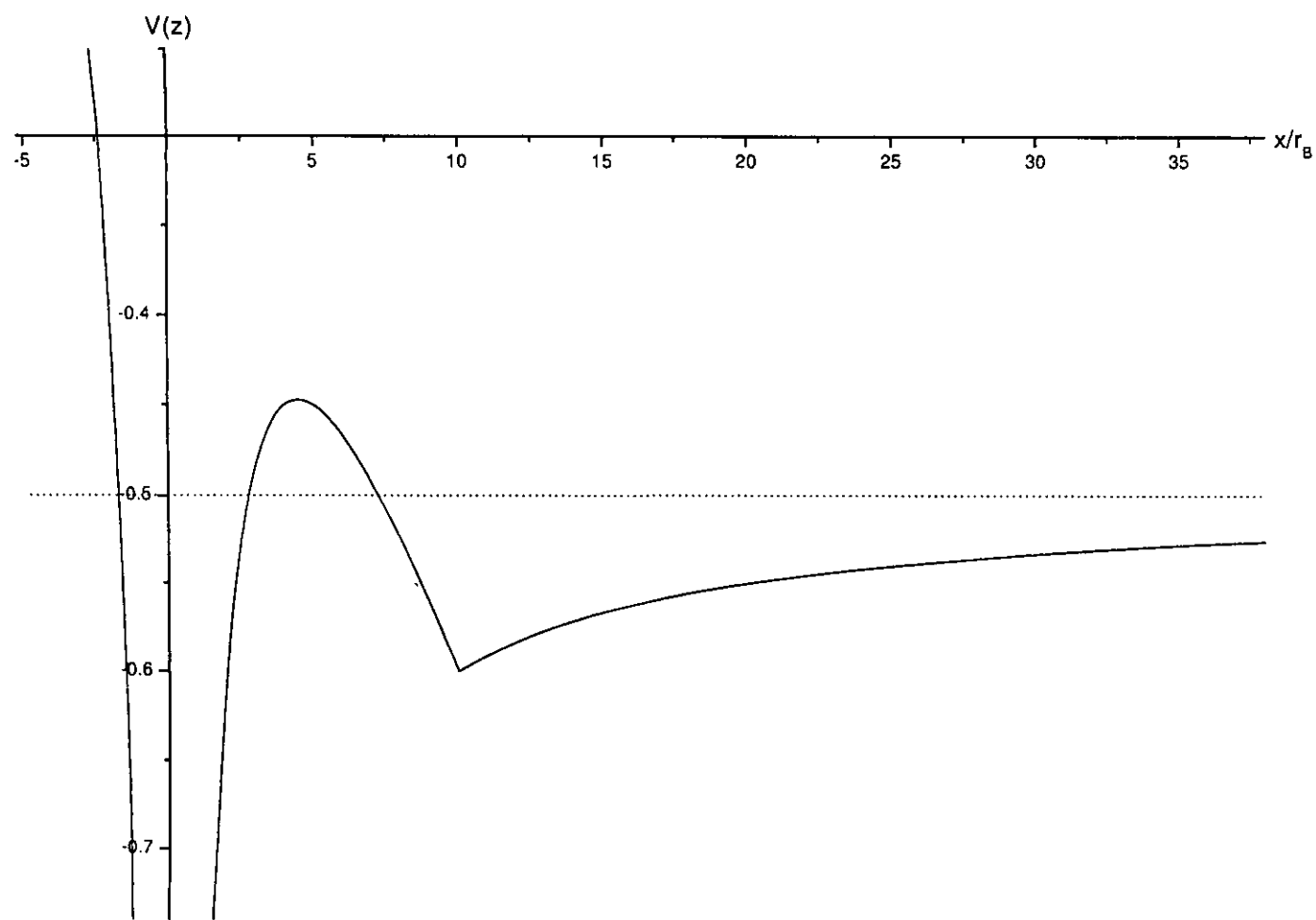


Fig. 16. El umbral del pozo izquierdo es más grande que el umbral del pozo derecho. La línea horizontal punteada indica el valor del umbral del pozo derecho. Aquí los valores de los parámetros son:  $\bar{a} = 10$  y  $\lambda = 0.05$ .

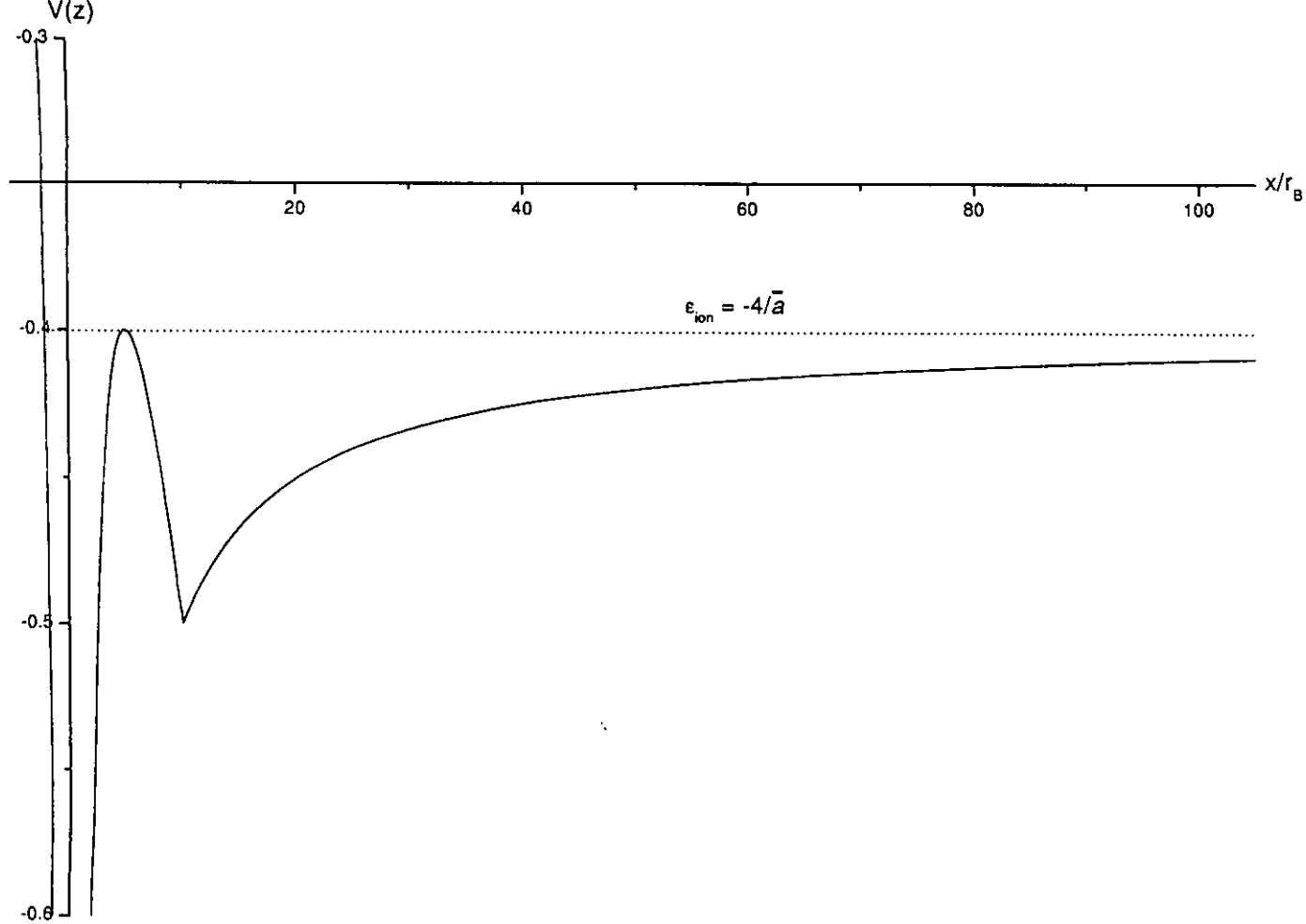


Fig. 17. Cuando  $V_c = -4/\bar{a}$  se obtiene el campo umbral de ionización. La línea horizontal punteada indica la correspondiente energía de ionización  $\epsilon_{\text{ion}} = V_c$ . Aquí los valores de los parámetros son:  $\bar{a} = 10$  y  $\lambda = 0.04$ .

la cual no es acotada y con ello el número de estados ligados en los que puede estar la partícula antes de ser liberada es infinito.

Por otro lado, si

$$\lambda > 4/\bar{a}^2, \quad (3.38)$$

el umbral del pozo izquierdo es siempre más grande que el del pozo derecho. Este umbral se encuentra, como se dijo anteriormente, en  $z_c = 1/\sqrt{\lambda}$  y correspondiente  $V(z_c) = V_c = -2\sqrt{\lambda}$ , pero ahora la energía de ionización se encuentra por encima de este umbral en  $\mathcal{E}_n = -4/\bar{a} > -2\sqrt{\lambda} = V_c$  (véase Fig. 18). De manera que ahora sólo tenemos un punto de retorno a la izquierda del origen y nada que confine a la partícula del lado derecho. Esto indica la ausencia de estados ligados cuando el campo excede el valor dado por la expresión (3.38).

### 3.4 Discusión de resultados

En la Tabla 2 se presentan los resultados obtenidos al usar el método WKB, dado por la expresión (3.34), para tres distintos valores de  $\bar{a}$ . Se proporcionan los valores de campo adimensionales  $\lambda$  y los valores en cantidades físicas  $E$ .

$\bar{a} = x/r_B$	Campo de Ionización $\lambda$	Campo de Ionización $E$ en $kV/m$
5	0.16	244.101
10	0.04	61.025
15	0.0177	25.935

Tabla 2. Campos de ionización para tres distintas  $\bar{a}$  y distintos campos eléctricos  $\lambda$ .

Se presentan los respectivos valores en cantidades físicas para el *GaAs* para el cual la masa reducida es  $m^* = 0.05m_e$ ,  $\epsilon = 15$  y  $r_B = 79.3 \text{ \AA}$ .

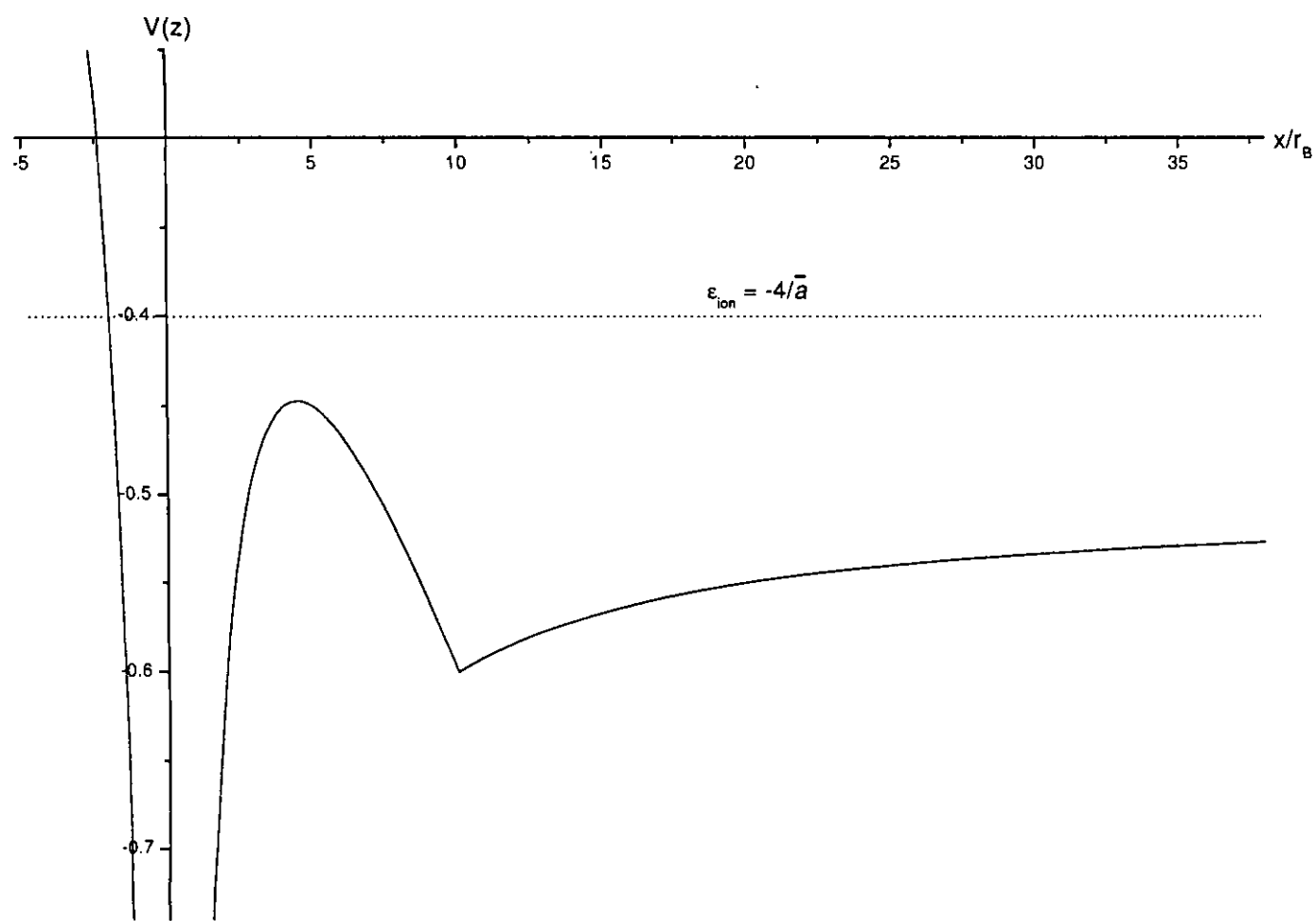


Fig. 18. El umbral del pozo izquierdo es más grande que el umbral del pozo derecho. La línea horizontal punteada indica la energía de ionización  $\epsilon_{\text{ion}} = -4/\bar{a}$ . Esta energía se encuentra por encima del umbral más grande. Aquí los valores de los parámetros son:  $\bar{a} = 10$  y  $\lambda = 0.05$ .

Es necesario recordar que el método WKB es sólo una aproximación semiclásica en el que el potencial debe ser bien comportado sin cambios bruscos en la pendiente de punto a punto, situación desafortunada en nuestro sistema en donde existe una discontinuidad en el origen ( $z = 0$ ). Sin embargo, con ayuda de los resultados numéricos, podemos hacer un análisis cualitativo del comportamiento del sistema.

Como se dijo anteriormente y se aprecia en la Fig. 15, el potencial  $V(z)$  contiene dos pozos; un pozo de profundidad infinita situado alrededor del origen y otro colocado a la derecha del primer pozo con profundidad máxima en el límite derecho del capacitor (en  $z = \bar{a}$ ), profundidad que depende directamente del campo eléctrico externo aplicado. La forma de este potencial hace que cuando se aumenta el campo eléctrico,  $V(z)$  es más intenso en la región  $z > 0$  y por tanto, la función de onda tiende a concentrarse en ésta región (véase Figs. 12, 13 y 14), incluso fuera del capacitor. Adicionalmente, como se aprecia más claramente en la Fig. 14, hay un valor de  $\lambda$  para el cual se forman dos máximos, uno cerca del origen y otro alrededor del límite derecho del capacitor. Esto es de esperarse, ya que el potencial  $V(z)$  contiene dos pozos y para ciertos valores de  $\lambda$  la profundidad del pozo derecho es tal que la probabilidad de encontrar a la partícula en ambos pozos es la misma. Es interesante notar que esta coexistencia se da para valores de  $\lambda$  cercanos a los campos de ionización obtenidos por el método WKB. Por arriba de estos campos, la función de onda se concentra en mayor parte fuera del capacitor.

A primera instancia, usando el método de shooting, esperaríamos encontrar un campo de ionización del sistema, pero no es así, no importa cuanto se aumente el campo eléctrico externo, siempre encontraremos un estado ligado para el sistema. mientras que en un laboratorio si es posible hallar dicho

campo, al igual que usando el método WKB. Ambos resultados son correctos, pero las condiciones iniciales son distintas. Al resolver la ecuación de Schrödinger con el método de shooting, la condición inicial se obtiene preparando un campo eléctrico tan intenso como se quiera (sistema inicial) y luego se colocan a las partículas bajo la acción de este campo, así siempre obtendremos estados ligados. Cuando usamos la aproximación semiclásica, las partículas forman parte del sistema inicial con campo eléctrico cero y luego este campo aumenta hasta encontrar el valor de ionización.

Cuando el campo eléctrico aplicado es débil, es viable pensar en utilizar la teoría de perturbaciones para resolver nuestro problema, sin embargo, no es conveniente usar este método como se explica a continuación. Como se dijo en la sección 2.2, para resolver el problema perturbado es necesario conocer el conjunto completo de eigenfunciones y eigenvalores del Hamiltoniano sin perturbar, es decir, necesitamos las eigenfunciones y eigenvalores del átomo de hidrógeno en 1D. La ecuación de Schrödinger para este problema ha sido estudiada y resuelta por distintos métodos, sin embargo, debido a la discontinuidad en el origen, las diversas formas de resolver el problema ofrecen conclusiones distintas. Por ejemplo, Flugge [26], concluye que las únicas soluciones que ofrecen estados ligados, son los estados impares, mientras que Loudon [21] asegura que el estado base tiene energía infinita y el resto de estados ligados están doblemente degenerados (soluciones pares e impares). Andrews [28] hace una objeción al estado base de Loudon usando la desigualdad de Schwarz, pero recientes autores están de acuerdo con Loudon que para ciertos sistemas, el estado base debe ser tomado en cuenta. Por su parte Xianxi [29], al igual que Reyes y del Castillo-Mussot [30], concluyen que solo los estados con paridad impar pueden existir. En conclusión, mientras

no se tenga el argumento definitivo que determine el conjunto completo de estados del átomo de hidrógeno en 1D, no podemos confiar en los resultados que puedan obtenerse al usar la teoría de perturbaciones.



# Capítulo 4

## Conclusiones

Hemos presentado el estudio de un sistema unidimensional conformado por dos partículas de cargas opuestas con interacción coulombiana entre sí, bajo la acción de un campo eléctrico uniforme externo  $E$  en una región finita  $2a$ . Las partículas interactúan a través de un potencial apantallado con una constante dieléctrica  $\epsilon$ .

Se resolvió por métodos numéricos (método de *disparo*) la ecuación de Schrödinger y se encontraron las funciones y energías propias del sistema en el estado base para varios valores del campo eléctrico  $E$  y distintos valores de  $a$ . Se explicó la razón de porque este método no es útil para encontrar un campo eléctrico necesario para ionizar al sistema.

Por otro lado, mediante el uso del método WKB, mostramos además en forma general pero aproximada, que existe un campo de ionización por arriba del cual no existen estados ligados.

Finalmente, un análisis cualitativo de los distintos métodos aquí usados permite explicar el comportamiento general del sistema, comportamiento que debe ser explicado tomando en cuenta las condiciones iniciales usadas para resolver la ecuación de Schrödinger.

Ya que el desarrollo que aquí presentamos fué realizado de manera general, nuestros resultados teóricos pueden ser aplicados no solamente a un sistema excitónico (en el que una partícula es un electrón y la otra un hueco), sino a cualquier sistema que esté conformado de dos partículas con cargas opuestas y cuya interacción sea puramente coulombiana (como un electrón ligado por una impureza).

El modelo aquí utilizado es estrictamente unidimensional, lo cual no representa fielmente a un alambre cuántico. Sin embargo, el comportamiento cualitativo encontrado debe ser el que obedece un alambre cuántico realista. Un tratamiento de los alambres cuánticos más elaborado, deberá tomar en cuenta el ancho finito de los alambres.

# Apéndice A

## Técnicas de fabricación de heteroestructuras de baja dimensionalidad

La fabricación de una heteroestructura semiconductor requiere de la preparación de un sustrato semiconductor, tal que se puedan observar propiedades ópticas o electrónicas en posiciones preseleccionadas de la estructura. La característica principal del sustrato es que permite remover o añadir material de la superficie, además de proteger a la estructura de ataques químicos o eléctricos. A continuación describiremos algunas de las técnicas usadas en la fabricación de heteroestructuras semiconductoras [31].

### Litografía

La superficie semiconductor se cubre con una capa dura de un material orgánico polimérico, controlando el espesor de la película (de 0.5 a 2  $\mu m$ ) a través de la concentración del monómero en un solvente y el endurecimiento de la capa se efectúa calentando el material a unos 160° durante unos 10 minutos. Hay dos tipos de películas; resistentes positivas (sales comunes) y resistente negativas (compuestos calcogenuros  $As - S, Ge - Se$ ). Cuando se

expone la película a la luz o a un haz de electrones, las películas resistentes positivas se descomponen en partículas orgánicas más pequeñas (que se pueden disolver con gran facilidad con solventes adecuados que no atacan a las zonas no expuestas) mientras que las negativas se endurecen más, por lo que los solventes atacan aquellas zonas que han sido expuestas a la luz. La finalidad de los solventes es remover, hasta donde sea posible, todo el material debilitado de la película resistente y producir un patrón copia en la superficie para su posterior grabado o depósito de materiales (metales, dieléctricos, semiconductores) en el material subyacente.

### **Grabado**

Cuando se trata con rasgos gruesos y separados en un circuito integrado, el grabado por soluciones químicas es simple y confiable; algunas soluciones atacan al material de manera isotrópica, otras son muy sensibles a los planos cristalinos y en algunos casos producen capas delgadas de película resistente que pueden producir franjas en experimentos de interferencia que sirven como guía para saber cuando se ha removido completamente la película.

Por otro lado, cuando se exige calidad de grabado, el método del plasma es el más conveniente, para el cual se utiliza un cámara que contiene un gas en estado de plasma (cloro, metano, etc.). Los radicales atacan tanto al semiconductor como al material resistente.

### **Implantación de iones**

Con esta técnica se crean capas conductoras de una polaridad deseada (para favorecer transporte de huecos o electrones), o bien, capas no conductoras (mediante implantación de hidrógenos). Es necesario recocer la muestra lo suficiente cuando se han implantado iones pesados debido a la pérdida de periodicidad en la red por causa de ellos; ésto permite el reacomodo de los

iones. Un inconveniente al usar esta técnica es la gran penetración de los iones pesados hasta las capas sensibles del material, lo cual puede provocar su destrucción.

### **Metalización**

Es una forma de depositar un metal en un área seleccionada, se conoce como desprendimiento. Aquí, se deposita por evaporación una película metálica sobre el patrón grabado en la superficie. El metal hace contacto con la superficie subyacente en áreas donde la resistencia ha sido removida. Enseguida se usa un poderoso solvente para remover el material resistente y levantarlo junto con el metal que lo cubre. Es necesaria una buena adhesión del metal al material por lo que puede ser necesario un recocimiento posterior.

# Apéndice B

## Convergencia de la serie asintótica

En este apéndice se presentan algunos de los valores numéricos de la serie asintótica dadas por las Ecs. (3.15) y (3.16) que satisfacen la ecuación de Schrödinger del sistema. En los siguientes resultados escogimos los valores adimensionales de  $\bar{a} \equiv 2bq^2m/\epsilon\hbar^2$ ,  $\lambda \equiv 2mqEr_B^3/\hbar^2$  y  $\mathcal{E}_n \equiv 2mr_B^2\mathcal{E}/\hbar^2$  y evaluamos la serie asintótica en las fronteras del capacitor (que corresponden a  $z = \pm\bar{a}$ ) incluyendo diferentes números de sumandos  $\alpha$  de potencias inversas de  $z$ .

$\bar{a} = 5, \lambda = 0, \mathcal{E}_n = 0.25$			$\bar{a} = 5, \lambda = 0.005, \mathcal{E}_n = 0.2572003$		
--	--	--	---	--	--

$\alpha$	$\psi(-\bar{a})$	$\psi(\bar{a})$	$\alpha$	$\psi(-\bar{a})$	$\psi(\bar{a})$
1	-0.4104239	0.410424	1	-0.3107061	0.4735314
2	-0.4104239	0.410424	2	-0.3106869	0.4735333
3	-0.4104239	0.410424	3	-0.3106843	0.4735333
6	-0.4104239	0.410424	6	-0.3106829	0.4735331

$\bar{a} = 5, \lambda = 0.01, \mathcal{E}_n = 0.270417$			$\bar{a} = 5, \lambda = 0.06, \mathcal{E}_n = 0.4404215$		
---	--	--	--	--	--

$\alpha$	$\psi(-\bar{a})$	$\psi(\bar{a})$	$\alpha$	$\psi(-\bar{a})$	$\psi(\bar{a})$
1	-0.2240747	0.5229147	1	-0.0084431	1.1548129
2	-0.2240269	0.5229212	2	-0.0084346	1.1542714
3	-0.2240202	0.5229208	3	-0.0084335	1.1542056
6	-0.2240200	0.5229202	6	-0.0084331	1.1542068

$\bar{a} = 10, \lambda = 0, \mathcal{E}_n = 0.25$			$\bar{a} = 10, \lambda = 0.005, \mathcal{E}_n = 0.2581326$		
$\alpha$	$\psi(-\bar{a})$	$\psi(\bar{a})$	$\alpha$	$\psi(-\bar{a})$	$\psi(\bar{a})$
1	-0.0673780	0.0673781	1	-0.0291750	0.1287048
2	-0.0673780	0.0673781	2	-0.0291738	0.1287052
3	-0.0673780	0.0673781	3	-0.0291737	0.1287051
6	-0.0673780	0.0673781	6	-0.0291737	0.1287051

$\bar{a} = 10, \lambda = 0.01, \mathcal{E}_n = 0.2731745$			$\bar{a} = 10, \lambda = 0.025, \mathcal{E}_n = 0.3341592$		
$\alpha$	$\psi(-\bar{a})$	$\psi(\bar{a})$	$\alpha$	$\psi(-\bar{a})$	$\psi(\bar{a})$
1	-0.0121718	0.2405919	1	-0.0009919	2.2724195
2	-0.0121705	0.2405959	2	-0.0009916	2.2726379
3	-0.0121704	0.2405953	3	-0.0009916	2.2726106
6	-0.0121704	0.2405954	6	-0.0009916	2.2726164

$\bar{a} = 15, \lambda = 0, \mathcal{E}_n = 0.25$			$\bar{a} = 15, \lambda = 0.005, \mathcal{E}_n = 0.2581695$		
$\alpha$	$\psi(-\bar{a})$	$\psi(\bar{a})$	$\alpha$	$\psi(-\bar{a})$	$\psi(\bar{a})$
1	-0.0082957	0.0082957	1	-0.0016449	0.0379485
2	-0.0082957	0.0082957	2	-0.0016449	0.0379486
3	-0.0082957	0.0082957	3	-0.0016448	0.0379486
6	-0.0082957	0.0082957	6	-0.0016448	0.0379486

$\bar{a} = 15, \lambda = 0.01, \mathcal{E}_n = 0.2733768$			$\bar{a} = 15, \lambda = 0.017, \mathcal{E}_n = 0.3018791$		
$\alpha$	$\psi(-\bar{a})$	$\psi(\bar{a})$	$\alpha$	$\psi(-\bar{a})$	$\psi(\bar{a})$
1	-0.0003421	0.2291231	1	-0.0000425	11.096581
2	-0.0003421	0.2291278	2	-0.0000425	11.096436
3	-0.0003421	0.2291273	3	-0.0000425	11.096456
6	-0.0003421	0.2291274	6	-0.0000425	11.096452

En todos los casos, dado el valor de  $\lambda$  y  $\bar{a}$ , el valor tomado de  $\mathcal{E}_n$ , es el correspondiente al eigenvalor base dado en la Tabla 1. Nótese como en los datos anteriores se obtiene convergencia en tantas cifras significativas al tomar tantos términos de la serie asintótica para  $z = \pm\bar{a}$ , esto permite determinar cuantas cifras significativas son válidas en nuestros cálculos. Nótese que a medida que el ancho  $\bar{a}$  aumenta, la convergencia de la serie es más rápida, es decir, la cantidad de cifras significativas para un mismo número de sumandos

$\alpha$  es mayor. Esto es debido a que para obtener las expresiones asintóticas (3.15) y (3.16) tomamos como punto de desarrollo el infinito, así que para valores pequeños de  $\bar{a}$ , la serie converge más lentamente, aún cuando tomemos los valores propios. De lo anterior podemos asegurar que los resultados obtenidos en la Tabla 1 para la energía  $\mathcal{E}_n$ , son correctos hasta la tercera cifra decimal.



# Bibliografía

- [1] S. Gasiorowicz, *Quantum Physics*, 2a. Ed., John Wiley and Sons, U.S.A., 1995, Pág. 266.
- [2] D. Park, *Introduction to the Quantum Theory*, 2a. Ed., Mc-Graw Hill, U.S.A., 1974, Págs. 275-7.
- [3] L. de la Peña, *Referencia* [16], Cap. 14.
- [4] C.B. Duke y M.E. Aleriff, *Phys. Rev.* **145**, Pág. 583 (1966).
- [5] A.J. Shields, J.L. Osborne, M.Y. Simmons, D.M. Whittaker, F.M. Bolton, D.A. Ritchie y M. Pepper, *Physica E* **2**, 87 (1998).
- [6] D.A.B. Miller, D.S Chemla, T.C. Damen, A.C. Gossard, W. Wiegmann, T.H. Wood y C.A. Burrus, *Phys. Rev. Lett.* **53**, Pág. 2173 (1984).
- [7] H. Sun, *Phys. Rev. B* **58**, Pág. 15381 (1998).
- [8] S.L. Pokitniǐ, *Semiconductors* **34**, Pág. 1079 (200).
- [9] M. A. Omar, *Elementary Solid State Physics*, Addison-Wesley, 1975, Sec. 5.4.
- [10] R. Dalven, *Introduction to Applied Solid State Physics*, Plenum Press, New York, 1981, Cap. 1.

- [11] M. A. Omar, *Referencia* [9], Sec. 5.6.
- [12] M. A. Omar, *Referencia* [9], Sec. 5.13.
- [13] W. A. Harrison, *Solid State Theory*, McGraw-Hill-Kogakusha, Tokyo, Japón, 1970, Pág. 92.
- [14] N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston, 1976, U.S.A., Págs. 616 y 626.
- [15] R.J. Elliot y A.F. Gibson, *An Introduction to Solid State Physics*, Macmillan, Londres, Inglaterra, 1974, Sec. 6.5.
- [16] L. de la Peña, *Introducción a la Mecánica Cuántica*, 2a. ed., Fondo de Cultura Económica, México D.F, 1991, Cap. 7.
- [17] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 2a. Ed., John Wiley & Sons, U.S.A., 1970, Pág.116.
- [18] F. Schwabl, *Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, U.S.A, 1992, Sec. 11.3.
- [19] C.F. Gerald, *Análisis Numérico*, 2a. Ed., Alfaomega, México D.F, 1991, Sec. 5.4.
- [20] C.F. Gerald, *Referencia* [19], Sec. 6.1.
- [21] R. Loudon, *One-Dimensional Hydrogen Atom*, Am. J. Phys. **27**, Pág. 649 (1959).
- [22] P.M. Morse y H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, Mc-Graw Hill, U.S.A., 1953, Sec. 4.5.

- [23] G.B.Arften, *Mathematical Methods For Physicists*, Academic Press, U.S.A., 1968, Sec. 13.4.
- [24] G.B.Arften y H.J. Weber, *Mathematical Methods For Physicists*, 4a. Ed., Academic Press, U.S.A., 1995, Pág. 461.
- [25] S. Redheffer, *Mathematics of Physics and Modern Engineering*, 2a. Ed., Mc Graw-Hill-Kogakusha, Tokio, Japón, 1958, Cap. 3, Sec. 21.
- [26] S. Flügge y H. Marschall, *Rechenmethoden der Quantentheorie*, Springer-Verlag, Berlin, 1952, Pág. 69.
- [27] R. Courant y F. John, *Calculus and Analysis*, Vol. I, John Wiley and Sons, U.S.A., 1965, Pág. 31.
- [28] M. Andrews, *Am. J. Phys.* **27**, Pág 1194 (1966).
- [29] D. Xianxi y J. Dai, *Phys. Rev. A* **55**, Pág. 2617 (1997).
- [30] J. A. Reyes y M. del Castillo-Mussot, *J. Phys. A* **32**, Pág. 2017 (1999).
- [31] M.A. Molero Milo. *Excitón de Wannier-Mott en alambres cuánticos perpendiculares*, TESIS, Facultad de Ciencias, UNAM, México D.F, 1999, Pág. 8.