



**Universidad Nacional Autónoma  
de México**

---

---

**FACULTAD DE CIENCIAS**

**DENSIDAD ELECTRONICA DENTRO DE UNA PARTICULA  
METALICA POLARIZADA**

**T E S I S**

Que para obtener el Título de

**F I S I C A**

presenta

**LUZ MARINA ZAMORA DIAZ DE LEON**

**México, D. F.**

**1988**



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 está 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.

# INDICE

	PAGINA
Intruducccion.....	1
CAPITULO 1	
Reseña Histórica.....	3
CAPITULO 2	
Formulalción Clásica.....	13
CAPITULO 3	
Formulacion Cuántica.....	25
CAPITULO 4	
Resultados.....	59
Graficas.....	67
CONCLUSIONES.....	79
BIBLIOGRAFIA.....	85

## INTRODUCCION:

El objetivo de este trabajo es estudiar algunas de las propiedades de las partículas metálicas pequeñas. En particular se enfocara el problema del calculo de la densidad de carga electronica dentro de una partícula metálica pequeña cuando esta se encuentra en presencia de un campo electrostático externo desde el punto de vista de la mecánica cuántica. Entenderemos aqui por partícula pequeña aquella cuyo diametro este comprendido entre 20 y 400 Å y la denotaremos por PP.

El interes por estudiar este tipo de sistemas bajo diferentes circunstancias esta basado en el hecho de que estos sistemas presentan características distintas a las de los sistemas grandes. Surge, entonces, el problema de entender y describir teóricamente dicho comportamiento anómalo y encontrar posibles aplicaciones.

Actualmente se conocen algunas causas por las que las PP presentan ese comportamiento extraño. Entre ellas podemos mencionar, p. ej., un valor grande en la relación superficie/volumen, espectro de energías claramente discreto, estructura cristalina distinta a la de los cristales macroscópicos, etc. Sin embargo aún existen algunos fenomenos que no se han podido explicar como es el caso del aumento desmesurado de absorción electrónica en el infrarrojo lejano, la fotoemisión anómala, etc. De hecho la mayor parte de las propiedades opticas, electrónicas, magnéticas de las PP parecen ser anomalas.

Por otra parte existe un interés práctico por estudiar las FF debido a que son una entidad muy importante en muchos campos. Tal es el caso del estudio de la cinética de los cambios de fase, existiendo, así, una interdependencia entre unas y otros. Este último aspecto tiene un gran alcance en cuanto a aplicaciones se refiere. P. e.j., el crecimiento de FF metálicas es importante para la elaboración de dispositivos de estado sólido y películas delgadas. Muchos cambios de fase atmosféricos tales como la formación de aerosoles sólidos y condensación de agua involucran FF para iniciar el proceso. Variados procesos químicos requieren de la formación de pequeños cristales o gotitas para la iniciación de una nueva fase, para favorecer reacciones catalíticas, etc.

Se ha encontrado que para realizar algunos procesos químicos las FF son mucho más efectivas que las partículas macroscópicas [1].

Las áreas de interés y de aplicación de las FF son muy extensas y variadas. Sin embargo, como se indicó anteriormente, el presente trabajo se limitará a estudiar algunas propiedades eléctricas de las FF.

En el capítulo 1 haremos una breve revisión histórica del problema; en el capítulo 2 este será tratado desde el punto de vista de la mecánica clásica; en el capítulo 3 se intentará un tratamiento cuántico y en el capítulo 4 se mostrarán los resultados numéricos. Al final del trabajo se darán algunas conclusiones de interés.

## CAPITULO 1

## RESEÑA HISTORICA

En este capítulo se discutirá brevemente los principales trabajos relacionados con el tema de esta tesis.

Posiblemente el primer trabajo en el que se hizo notar la importancia que tienen las P.F. fue el artículo de Fröhlich [2] publicado en 1937 en donde se menciona que el estudio de esos sistemas podría ser importante debido a que el espectro de energías de los electrones es discreto.

Posteriormente, en 1965, Gorkov y Eliashberg (G-E) [3] estudiaron varios aspectos de las P.F. y obtuvieron, entre otras cosas, expresiones para algunas propiedades electromagnéticas. Sus resultados predecían que la polarizabilidad estática de una P.F. era sorprendentemente grande. Sin embargo, en esa época no había ningún experimento que pudiera corroborar tal predicción. De hecho, los primeros experimentos fueron efectuados en la década siguiente.

Aunque tal predicción era muy extraña, aparentemente el modelo que habían utilizado estaba justificado. Entre las suposiciones más importantes en que basaron sus cálculos podemos mencionar las siguientes

a) En primer lugar consideraron que la energía del sistema entero era igual a la suma de energías de cuasipartículas individuales. Estas cuasipartículas eran en esencia electrones libres con una masa efectiva  $m^* = 1.4m_e$ .

siendo  $m_e$  la masa del electron y, de esta manera, las excitaciones del sistema eran simplemente excitaciones electronicas. Ademas, a bajas temperaturas y en ausencia de perturbaciones externas solo los niveles de energia menores o iguales a la energia de Fermi estuvieron ocupados.

b) Como el sistema tiene un número relativamente pequeño de electrones los niveles de energia son discretos, de hecho la distancia entre ellos es una funcion del tamaño del mismo.

De acuerdo con estos autores el número de estados por unidad de intervalo de energia es igual a

$$\gamma = \frac{V m p_0}{2\pi^2 \hbar^3}$$

donde

$V$  = volumen

$p_0$  = momento en la superficie de Fermi

y es obvio que su reciproco  $\Delta = \gamma^{-1}$  es la distancia promedio entre los niveles de energia. El valor está dado aproximadamente por

$$\Delta \sim \frac{E_F}{N}$$

donde

$E_F$  = energia de Fermi

$N$  = número de edos. hasta nivel de Fermi

c) Como en general la forma de las particulas es desconocida no se puede determinar exactamente su espectro

de energías y por lo tanto utilizaron una distribución estadística de niveles desarrollada por Meta y Dyson.

d) Si la frecuencia  $\omega$  del campo electromagnético es pequeña comparada con la del electron al viajar de pared a pared del sistema y la intensidad del campo es pequeña, de tal manera que la energía ganada o perdida por un electron al viajar de pared a pared es menor que  $\Delta$  i.e.

$$e E a \ll \Delta$$

siendo "a" el radio de la partícula, entonces la interacción de las partículas metálicas con el campo externo puede ser tratada dentro de una teoría de perturbaciones.

En este intervalo de campos la partícula se comporta en forma semejante a un átomo con una cierta polarizabilidad y no manifiesta sus propiedades metálicas.

Bajo las hipótesis anteriores la polarizabilidad estática  $\alpha_0$  encontrada por G-E fue

$$\alpha_0 = \frac{4a^3 e^2 \gamma}{5\pi} \quad (1.1)$$

que se puede escribir

$$\alpha_0 \sim \alpha_e \rho_0^2 a^2$$

con

$$\gamma = \frac{mJ}{\hbar \omega} (\text{rad})$$

$\alpha_e \equiv a^3 =$  polarizabilidad de una esfera metálica clásica.

El valor de la polarizabilidad dado en (1.1) es muy grande puesto que el valor máximo predicho por la electrodinámica clásica es (ver capítulo siguiente)  $\alpha_e = a^3$  que en nuestro



caso considerando p.ej. una partícula de radio  $25 \text{ \AA}$  es del orden de  $(25)^3$ , en cambio la ecuación anterior (1.1) predice una polarizabilidad  $\alpha^* = (25)^9$  que es  $(25)^6$  veces más grande.

Claramente el efecto predicho por estos autores es mayor mientras mayor sea la partícula, sin embargo como este efecto nunca se ha observado en partículas suficientemente grandes, supusieron que con campos más intensos o tamaños de partículas mayores, tales que  $eEa \gg \Delta$ , se provocaría una mezcla de niveles de energía del sistema de tal manera que su modelo sería inaplicable y se recuperarían, así, los resultados clásicos.

No fue sino hasta 1971 cuando Dupree y Smithard [4] hicieron algunos experimentos con el propósito de comprobar si las predicciones hechas por G-E acerca de la polarizabilidad extraordinariamente grande en una F.P. eran ciertas.

Su experimento consistió en medir la constante dieléctrica, la cual está directamente relacionada con la polarizabilidad, en una muestra que contenía grandes concentraciones de partículas de plata con radio promedio menor que  $100 \text{ \AA}$ .

Partiendo de la base de que el factor de agigantamiento  $\beta$  de la polarizabilidad predicho por G-E era del orden

$$\beta \approx \rho_0 a^3$$

Estimaron que el valor de  $\beta$ , que esperarían obtener a partir de sus experimentos, sería del orden de 120 para partículas

de plata. En la realización del experimento tomaron en cuenta las condiciones que impusieron G-E para la validez de su teoría que como hemos mencionado eran principalmente:

- a) Temperatura suficientemente baja ( $kT \ll E_F$  (para que solo los niveles abajo del nivel de Fermi estuvieran ocupados),
- b) Campo eléctrico pequeño (para que la energía potencial ganada por un electrón al atravesar la partícula fuera pequeña comparada con  $\Delta$  ).

Fue así que los resultados obtenidos no revelaron ningún factor de agigantamiento para la polarizabilidad, las predicciones de G-E no podrían ser correctas.

Dupree y Smithard no pudieron explicar el por qué no se observaba este fenómeno, aunque conjeturaron que probablemente la distribución de niveles de energía usada en la teoría de G-E no era apropiada para P.F.

En 1972 Meier y Wyder [5] realizaron nuevos experimentos para investigar nuevamente la validez de la teoría de G-E.

Sus experimentos consistieron esencialmente en medir la polarizabilidad de partículas de oro como una función del campo aplicado.

Sus resultados no mostraron ningún factor de aumento en la polarizabilidad como G-E habían descrito.

Fue también en 1972 cuando Strassler, Rice y Wyder [5-R-W] [6] encontraron dónde estaba la falla de la teoría de G-E.

Según, S-R-W, lo que G-E habían calculado era la

susceptibilidad y no la polarizabilidad.

Como se sabe, de acuerdo a la electrodinámica clásica

$$p = \alpha E_{\text{ext}}$$

$$4\pi n^2 P / 3 = \alpha E_{\text{ext}}$$

$$P = \chi E_{\text{loc}}$$

donde

$p$   $\equiv$  momento dipolar;  $\alpha$   $\equiv$  polarizabilidad;  $E_{\text{ext}}$   $\equiv$  Campo Externo

$P$   $\equiv$  polarización;  $\chi$   $\equiv$  susceptibilidad;  $E_{\text{loc}}$   $\equiv$  Campo local

y también

$$E_{\text{loc}} = E_{\text{ext}} - 4\pi P / 3 \quad (1.2)$$

en donde

$-4\pi P / 3$  es el campo depolarizante que es inducido por las cargas dentro de la esfera en respuesta y contrario a  $E_{\text{ext}}$ .

En opinión de S-R-W lo que hicieron G-E fue considerar la polarización  $P$  como una respuesta lineal al campo externo  $E_{\text{ext}}$  en lugar de haberlo considerado como respuesta lineal de  $E_{\text{loc}}$ . Al haber considerado un campo interno igual a  $E_{\text{ext}}$  no estaban tomando en cuenta el campo depolarizante y, al no tomar en cuenta este hecho, de la ec (1.2) se tiene

$$E_{\text{ext}} = E_{\text{loc}}$$

en vez de tomar

$$E_{\text{ext}} = E_{\text{loc}} + 4\pi P / 3$$

Por tanto lo que G-E calcularon fue la susceptibilidad  $\chi$ .

Ahora, como en realidad los electrones están respondiendo al campo  $E_{\text{loc}}$  y este es tal que

### $E_{ext} > E_{int}$

entonces el desplazamiento de los electrones es menor y por tanto la polarizabilidad será también menor. En realidad los resultados de G-E hubieran sido correctos si los electrones estuvieran afectados únicamente por el campo externo (i.e. para electrones sin interacción) porque, de esta manera, el momento dipolar de cada partícula sería la respuesta al campo externo  $E_{ext}$ .

Conocida la susceptibilidad es posible calcular a partir de ella la polarizabilidad. Esto fue hecho posteriormente y la polarizabilidad corregida concordaba mejor con los experimentos.

En 1973 Lushnikov y Simonov [7] publicaron un artículo en donde presentaron una forma alternativa de calcular la polarizabilidad de las P.P. correctamente. Encontraron que los cálculos de G-E no se verían aumentados por el factor  $a^2$  si se tomara en consideración la interacción de los electrones. Al hacerlo así encontraron que la polarizabilidad dada por G-E se adecuaría a su valor experimental y clásico dado por  $a^3$  y no  $(a^2)$ . En el capítulo 3 será discutido y utilizado el método de L-S de manera más amplia y exacta.

También en 1973 Rice, Schneider y Strassler [8] utilizaron la teoría de la respuesta lineal y la ecuación de Poisson para calcular de otra manera más la polarizabilidad estática de P.P. metálicas. Estos autores explicaron que el modelo de G-E es erróneo debido a que supusieron un campo

local constante dentro de la partícula y, por tanto, despreciaron el efecto de apantallamiento del sistema de electrones de conducción, el cual es independiente de si los niveles de energía son discretos o continuos y por tanto, la conjetura de Dupree y Smithard mencionada anteriormente era falsa.

En realidad, para una partícula de radio  $R$  suficientemente grande, el campo externo estará esencialmente apantallado (casi en cualquier punto en el interior de la partícula) aun si esta  $F$  es lo suficientemente pequeña como para que los niveles de energía permanezcan discretos en el sentido definido por Gorkov.

En cambio, cuando  $R$  es muy pequeña la cantidad de carga de conducción presente en el sistema no es lo suficientemente grande como para poder apantallar completamente al campo externo. En este caso el campo externo comienza a penetrar al interior del metal; el sistema es ahora menos polarizado y la polarizabilidad asumirá ahora un valor menor que su valor clásico. En esto consiste el fenómeno de la tendencia limitante de pequeños objetos de perder sus propiedades macroscópicas de apantallamiento.

En resumen, podríamos decir que en 1973 se había logrado calcular de varias maneras la polarizabilidad de una FP y los resultados estaban de acuerdo con los experimentos además se había concluido que el cálculo de G-E había sido para la susceptibilidad y no para la polarizabilidad.

Sin embargo, surgió un nuevo problema. Una vez obtenida la expresión corregida para la polarizabilidad se procedió a calcular la absorción de energía electromagnética y se comparó con los experimentos, encontrándose una discrepancia de varios órdenes de magnitud. Hasta ahora y desde 1975 [9] se ha tratado de resolver este problema sin que se haya logrado. Como los experimentos mostraron que las P.P. absorben mucha más energía que la predicha, a lo largo de los años se han propuesto un sin número de mecanismos adicionales, entre los cuales se pueden mencionar: absorción a través de la capa de óxido que rodea las partículas [10], absorción a través de excitaciones fonónicas [11], absorción a través de las corrientes de eddy [12], excitaciones de fonones superficiales [13], efectos no locales [14], etc.

Existen trabajos en que se discuten [15] y [16] se discuten, además de los anteriores, otros mecanismos y la incapacidad de los mismos para explicar el fenómeno pero ninguno de ellos ha logrado resolver satisfactoriamente el problema. Actualmente se sabe que los primeros reportes habían exagerado la cantidad de energía absorbida (el factor de absorción aceptado actualmente es, a lo máximo, del orden de  $10^2$ ). Aun así, el problema sigue sin estar resuelto. Sin embargo el objetivo de esta tesis no pretende atacar este problema, sino únicamente el de la polarizabilidad estática y comprobar explícitamente que las correcciones u objeciones de Lushnikov y Simonov por una parte y de Strassler y Rice, por otra, eran correctas y que, por

tanto, la polarizabilidad si está bien calculada. Esto es un indicio de que la absorción debida al mecanismo de polarización de cada partícula está bien calculada y no puede dar cuenta de la absorción anómala " si es que efectivamente la hay " [17].

En los capítulos siguientes estudiaremos la polarizabilidad de acuerdo a diferentes modelos. En el cap 2 se estudiará el modelo clásico y en el cap 3 dos modelos cuánticos, siendo uno de ellos el de L-S.

CAPITULO 2  
FORMULACION CLASICA

En este capítulo estudiaremos las propiedades de una partícula metálica pequeña (FMP) desde el punto de vista de la electrodinámica clásica. Este problema ha sido resuelto anteriormente; sin embargo, con el objeto de definir la notación y de tener los resultados para posteriores comparaciones, vamos a obtener los resultados más importantes.

Obtendremos una expresión para la densidad electrónica de carga dentro de una FMP cuando esta se encuentre en presencia de un campo eléctrico externo.

Sea  $\vec{E}_0$  un campo eléctrico uniforme paralelo al eje  $z$ ,  $\vec{E}_0 = E_0 \vec{k}$  siendo  $E_0$  la magnitud de  $\vec{E}_0$  y  $\vec{k}$  el vector unitario en la dirección  $z$ . El campo eléctrico resultante al colocar una esfera conductora de radio  $a$  en presencia de  $\vec{E}_0$  se puede obtener a partir de

$$\vec{E} = -\nabla U \quad (2.1)$$

donde  $U$  es el potencial electrostático y satisface a su vez la ecuación de Laplace

$$\nabla^2 U = 0. \quad (2.2)$$

Debido a que  $U$  no depende del ángulo  $\phi$ , al utilizar coordenadas esféricas (ver fig. 2.1), la solución a esta ecuación se puede expresar como [18]

$$U(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n r^n P_n(\cos\theta) + \sum_{n=0}^{\infty} C_n r^{-(n+1)} P_n(\cos\theta) \quad (2.3)$$



Más explícitamente

$$U(r, \theta) = A_0 + A_1 r \cos \theta + [A_2 r^2 / 2] [3 \cos^2 \theta - 1] + \dots + C_0 r^{-1} + C_1 r^{-2} \cos \theta + [C_2 r^{-3} / 2] [3 \cos^2 \theta - 1] + \dots + \quad (2.4)$$

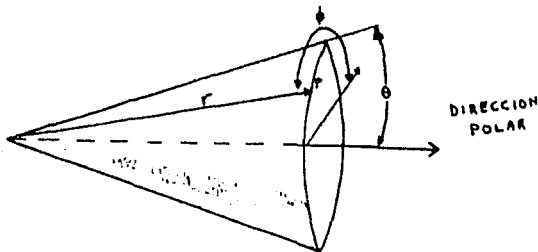


Fig. 2.1

Las constantes  $A_n$  y  $C_n$  se determinan a partir de las condiciones de frontera las cuales son:

- a) Para distancias lejanas a la esfera el campo eléctrico  $\vec{E}(r, \theta)$  será igual a  $\vec{E}_0$  i.e.

$$\vec{E}(r, \theta) \Big|_{r \rightarrow \infty} = E_0 \hat{k} \quad (2.5)$$

lo cual implica que

$$\begin{aligned} U(r, \theta) &= -E_0 z + \text{cte} \\ &= -E_0 r \cos \theta + \text{cte} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Por tanto, para que concuerden (2.4) y (2.6) para  $r$  grande  $A_0 = \text{cte}$ ,  $A_1 = -E_0$  y las demás  $A_n$  se igualan con cero.

El término  $C_0/r$  es el potencial que produce una esfera cargada con carga total  $C_0$ , como nuestra esfera está desprovista de carga neta entonces  $C_0 = 0$ .

- b) El campo eléctrico dentro del conductor es cero, por tanto de (2.1)

$$U(r, \theta) = U_0 \quad \text{si } r < a$$

siendo  $U_0$  una constante. Entonces al evaluar (2.4) en  $r=a$  y sustituyendo los valores de las  $A_n$  obtendremos que

$$0 = -U_0 + \text{cte} + (-E_0 a + C_1/a^2)P_1(\cos\theta) + (C_2/a^3)P_2(\cos\theta) + \dots + \quad (2.7)$$

Esta expresion implica que los coeficientes de los polinomios de Legendre deben anularse. Asi

$$C_n = 0 \quad \text{si } n \neq 1 \quad (2.8)$$

$$-E_0 a + C_1/a^2 = 0$$

$$-U_0 + \text{cte} = 0$$

Sustituyendo estos resultados en (2.4) obtenemos la solución final

$$U(r, \theta) = U_0 - E_0 r \cos\theta + [E_0 a^3 \cos\theta / r^2] \quad (2.9)$$

utilizando (2.1) y la expresion para el gradiente en coordenadas esféricas

$$\vec{\nabla} U = \hat{r} \frac{\partial U}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial \theta} + \hat{\phi} \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial U}{\partial \phi} \quad (2.10)$$

obtenemos

$$E_r = - \frac{\partial U}{\partial r} = E_0 \cos\theta \left[ 1 + \frac{2a^3}{r^3} \right] \quad (2.11)$$

si  $r \geq a$

$$E_\theta = - \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial \theta} = - E_0 \sin\theta \left[ 1 - \frac{a^3}{r^3} \right] \quad (2.12)$$

$$\vec{E} = 0 \quad \text{si } r < a \quad (2.13)$$

Como el campo eléctrico que esta en el exterior inmediato de

un conductor esférico es [19] (en unidades electrostaticas)

$$E_r(a, \theta) = 4\pi\sigma(\theta) \quad (2.14)$$

en donde  $\sigma(\theta)$  es la densidad superficial de carga, entonces

$$\sigma(\theta) = E_r(a, \theta)/4\pi \quad (2.15)$$

$$\sigma(\theta) = (3/4\pi) E_0 \cos\theta \quad (2.16)$$

Ahora vamos a calcular la carga electrónica en el casquete superior de la esfera (ver fig 2.2)

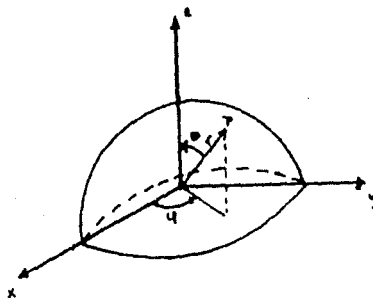


Fig 2.2

Sea  $s'$  la superficie sobre la que vamos a calcular la carga electrónica. Sabemos que

$$Q_{e.s'} = \int_{s'} \sigma(\theta) da' \quad (2.17)$$

donde  $da' = a^2 \sin\theta d\theta d\phi$  con  $0 \leq \theta \leq \pi/2$ ,  $0 \leq \phi \leq 2\pi$  y  $\sigma(\theta)$  está dada por la expresión (2.15), sustituyendo ésto en (2.16) lo que tenemos es

$$Q_{e.s'} = \int_{s'} (3/4\pi) E_0 \cos\theta a^2 \sin\theta d\theta d\phi$$

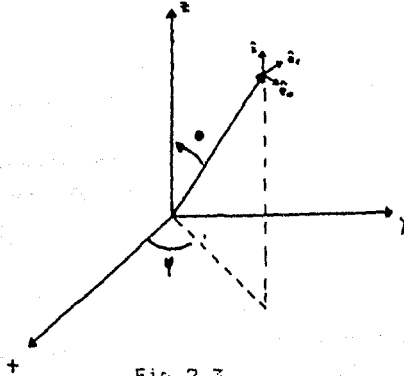
$$= (3/4\pi) E_0 a^2 \int_0^{\pi/2} \cos\theta \sin\theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$Q_a = (3/4) E_0 a^2 \quad (2.18)$$

La expresión (2.18) es la carga acumulada en la mitad superior de la esfera y ha sido calculada para compararla con posteriores resultados. El resultado que se hubiera obtenido al calcular la carga acumulada en la mitad inferior de la esfera es el mismo que el de (2.18) pero con el signo contrario de modo que la carga total es cero.

Las expresiones para las componentes del campo eléctrico total de las ecuaciones (2.11) y (2.12) constan de dos términos cuyo origen puede entenderse fácilmente. En efecto, el primer término es debido al campo externo  $\vec{E}_0$  como puede verse de la figura (2.3) en donde el vector  $\vec{k}$  expresado en coordenadas esféricas es igual a

$$\vec{k} = \cos\theta \vec{e}_r - \sin\theta \vec{e}_\theta$$



Por tanto

$$\begin{aligned}\vec{E}_0 &= E_0 \hat{k} \\ &= E_0 \cos\theta \hat{e}_r - E_0 \sin\theta \hat{e}_\theta\end{aligned}$$

lo que implica que

$$\begin{aligned}E_{0r} &= E_0 \cos\theta \\ E_{0\theta} &= -E_0 \sin\theta\end{aligned}$$

Estas dos últimas expresiones son los primeros términos de las ecuaciones que dan el valor del campo total i.e., las ecuaciones (2.11) y (2.12). El segundo término de dichas ecuaciones es el campo que produce la densidad de carga dada por 2.16 inducida sobre la superficie de la esfera en el momento en que ésta es polarizada. En efecto: el potencial en cualquier punto  $\vec{x}$  está dado por

$$U(\vec{x}) = \int \frac{\sigma(\vec{p}')}{|\vec{p}' - \vec{x}|} da' \quad (2.19)$$

en donde  $\sigma(\vec{p}')$  es la densidad de carga superficial en el punto  $\vec{p}'$ . Para evaluar esta integral colocaremos el sistema de coordenadas de la variable de integración de tal forma que el origen este en el centro de la esfera y el eje  $z$  en la línea que une el origen con el punto  $\vec{x}$ , tal y como se muestra en la figura 2.4 .

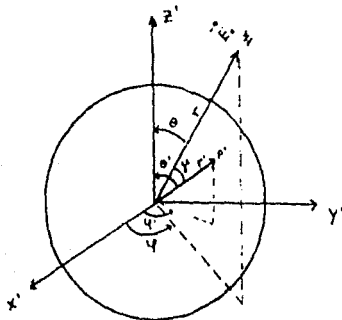


Fig 2.4

Entonces las coordenadas esféricas de  $\bar{x}$ ,  $E_0$  y  $p'$  son respectivamente  $(r, 0, 0)$ ,  $(E_0, \theta, 0)$  y  $(a, \theta', \theta')$ , siendo  $r = |\bar{x}|$ . Si denotamos con  $\gamma$  el ángulo entre  $E_0$  y  $p'$  entonces la densidad de carga de la ecuación (2.16) evaluada en  $p'$  es:

$$\sigma(p') = \sigma(\theta) = (3/4\pi) E_0 \cos\theta$$

y como el ángulo  $\gamma$  está dado por [20]

$$\cos\gamma = \cos\theta\cos\theta' + \sin\theta\sin\theta'\cos(\theta' - \theta)$$

entonces

$$\sigma(p') = (3/4\pi) E_0 [\cos\theta\cos\theta' + \sin\theta\sin\theta'\cos(\theta' - \theta)] \quad (2.20)$$

Por tanto, el potencial producido por  $\sigma$  en el punto  $\bar{x}$  es, de acuerdo a (2.19) y (2.20)

$$\begin{aligned}
 U(\bar{x}) &= \frac{3 E_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{[\cos\theta\cos\theta' + \sin\theta\sin\theta'\cos(\theta' - \theta)] a^2 \sin\theta d\theta d\theta'}{[a^2 + r^2 - 2ar\cos\theta]^{3/2}} \\
 &= \frac{3 E_0 a^2}{4\pi} \left[ \int_0^{\pi} \frac{\cos\theta\cos\theta\sin\theta d\theta}{[a^2 + r^2 - 2ar\cos\theta]^{3/2}} \int_0^{2\pi} d\theta' + \int_0^{\pi} \frac{\sin\theta\sin\theta\sin\theta d\theta}{[a^2 + r^2 - 2ar\cos\theta]^{3/2}} \right. \\
 &\quad \left. \int_0^{2\pi} \cos(\theta' - \theta) d\theta' \right]
 \end{aligned}$$

pero

$$\int_0^{2\pi} \cos(\sigma' - \rho) d\sigma = 0$$

entonces

$$U(x) = \frac{3E_0 a^2 \cos\theta}{2} \int_0^\pi \frac{\cos\theta \sin\theta d\theta}{[a^2 + r^2 - 2ar \cos\theta]^3} \quad (2.21)$$

haciendo el cambio de variable

$$x = \cos\theta \implies dx = -\sin\theta d\theta$$

y definiendo

$$\beta = -2ar \quad \text{y} \quad \alpha = a^2 + r^2$$

la ecuación (2.21) queda

$$U(x) = \frac{3E_0 a^2 \cos\theta}{2} \int_{-1}^1 \frac{(-x) dx}{[\alpha + \beta x]^3} \quad (2.22)$$

Trabajando solamente con la integral, tenemos

$$-\int_{-1}^1 \frac{x dx}{[\alpha + \beta x]^3} = \frac{1}{\beta} \int_{-1}^1 \frac{\beta x dx}{[\alpha + \beta x]^3}$$

sumando y restando  $\alpha$  en el numerador

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\beta} \int_{-1}^1 \frac{\alpha + \beta x}{[\alpha + \beta x]^3} dx - \frac{\alpha}{\beta} \int_{-1}^1 \frac{dx}{[\alpha + \beta x]^3} \\ &= \frac{2}{3\beta^2} \left[ (\alpha + \beta)^{3/2} - (\alpha - \beta)^{3/2} \right] - \frac{2\alpha}{\beta^2} \left[ (\alpha + \beta)^{-1/2} - \right. \end{aligned}$$

$$(\alpha - \beta)^n \quad \left. \vphantom{(\alpha - \beta)^n} \right\} (2.23)$$

Sustituyendo (2.23) y los valores de  $\alpha$  y  $\beta$  en (2.22) obtenemos

$$U(x) = \begin{cases} 2/\beta^2 [1/3((a-r)^3 - (a+r)^3) + 2\alpha r] & \text{si } r < a \\ 2/\beta^2 [1/3((r-a)^3 - (a+r)^3) + 2\alpha a] & \text{si } r > a \end{cases}$$

$$U(x) = \begin{cases} E_0 \cos\theta r & \text{si } r < a \\ \frac{E_0 a^3 \cos\theta}{r^2} & \text{si } r > a \end{cases}$$

Por tanto, el campo eléctrico producido por tal potencial estará dado por

$$E_r = \frac{2E_0 a^3}{r^3} \cos\theta \quad (2.24)$$

$$E_\theta = \frac{E_0 a^3 \sin\theta}{r^3}$$

para  $r > a$  y por

$$E_r = -E_0 \cos\theta$$

y

$$E_\theta = E_0 \sin\theta$$

es decir



$$\vec{E} = -\vec{E}_0 \quad (2.25)$$

para  $r < a$ . Las ecuaciones (2.24) son precisamente los segundos términos de las ecuaciones (2.11) y (2.12) como se quería demostrar. Además, la ecuación (2.25) indica que, el campo dentro de la esfera, producido por la densidad de carga inducida, es justo el negativo del campo externo  $\vec{E}_0$ , de tal manera que el campo total en el interior es igual a cero como indica la ecuación (2.13).

Hemos demostrado, entonces, que el campo total en cualquier punto  $\vec{x}$  es la suma del campo externo  $\vec{E}_0$  mas el campo producido por la densidad de carga inducida  $\sigma$ .

Finalmente conviene hacer notar que la esfera con la densidad de carga inducida  $\sigma$  se comporta como un dipolo eléctrico cuyo momento dipolar esta dado por [21]

$$\vec{p} = \int \vec{r} \rho(\vec{r}) dv \quad (2.26)$$

pero

$$\rho = \delta(r - a) \sigma(\vec{r})$$

por tanto

$$\vec{p} = \int \vec{r} \delta(r - a) \sigma(\vec{r}) dv$$

Utilizando coordenadas esféricas

$$\vec{p} = \int_0^a \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r \left[ (\sin\theta \cos\phi \hat{i} + \sin\theta \sin\phi \hat{j} + \cos\theta \hat{k}) (3/4\pi) E_0 \cos\theta r^2 \cdot \delta(r - a) \sin\theta d\theta dr d\phi \right]$$

$$\vec{p} = (3/4\pi) E_0 a^3 \left[ \int_0^\pi \sin^2 \theta \cos \theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos \phi d\phi \hat{i} + \int_0^\pi \sin^2 \theta \cos \theta \int_0^{2\pi} \sin \phi d\phi \hat{j} + \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \hat{k} \right]$$

$$\vec{p} = (3/2) a^3 E_0 \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \hat{k}$$

$$\vec{p} = a^3 E_0 \hat{k}$$

$$\vec{p} = a^3 \vec{E}_0 \quad (2.27)$$

Comparando (2.27) con la ecuación

$$\vec{p} = \alpha \vec{E}_0 \quad (2.28)$$

que define la polarizabilidad  $\alpha$ , vemos que para el caso de la esfera conductora

$$\alpha = a^3 \quad (2.29)$$

Como referencia también escribiremos las expresiones para el momento dipolar y la polarizabilidad de una esfera dieléctrica con función dieléctrica  $\epsilon$  [22]

$$\vec{p}_d = a^3 (\epsilon - 1) \vec{E}_0 / (\epsilon + 2) \quad (2.30)$$

$$\text{y} \quad \alpha_d = a^3 (\epsilon - 1) / (\epsilon + 2) \quad (2.31)$$

Vemos que para todo valor positivo de  $\epsilon$ ,  $\alpha_d \leq \alpha$  y la

igualdad se tiene solo cuando  $\epsilon = 0$ .

En el capítulo siguiente estudiaremos nuevamente estos conceptos pero desde el punto de vista de la mecánica cuántica.

## CAPITULO 3

## FORMULACION CUANTICA

Se discute estudiar el comportamiento de una pequeña esfera conductora de aproximadamente 24 angstroms de radio en un campo electromagnético desde el punto de vista de la mecánica cuántica.

Estudiar este sistema resulta complicado ya que una esfera de dicho tamaño contiene aproximadamente 5000 átomos. Por lo que se partirá de un modelo simplificado del sistema y posteriormente lo refinaremos.

Para tal objeto se supondrá lo siguiente

- 1) Cada átomo contiene electrones de valencia y electrones del caroso, en donde los electrones del carosos son los que están más cerca del núcleo y los de valencia los más alejados. Esto permite simplificar el problema si suponemos que los electrones del caroso no se mueven y que solo los electrones de valencia pueden reaccionar a la acción del campo electromagnético externo.
- 2) Como los electrones de valencia de los metales tienen mucha movilidad se desplazarán fácilmente a través de todo el material pero el potencial bajo el cual se mueven ( que es el potencial producido por los electrones del caroso, las paredes de la esfera, etc.) es muy complicado. Para simplificar este problema supondremos que los electrones se mueven a través de un potencial

uniforme dentro de la esfera y que están confinados a moverse dentro de ella mediante un potencial infinito en la superficie de la misma. Así, se desplazarán libremente y no importará el movimiento detallado en cada punto de la esfera. Debemos notar que el potencial producido por cada caroso es de la forma  $V=1/r$ , potencial de Coulomb (ver Fig. 3.1)

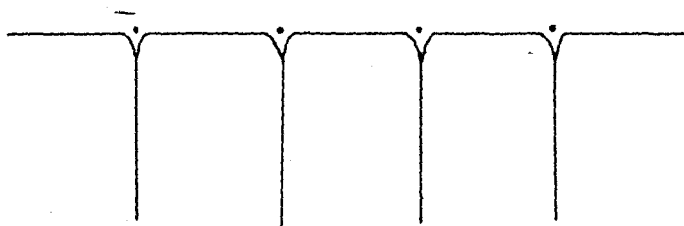


Fig. 3.1

y que los carosos están distribuidos en forma discreta dentro de la partícula; sin embargo estamos suponiendo que la suma de todos esos potenciales es uniforme y de esta manera los electrones de valencia se moverán libremente pues ya no sentirán la presencia del potencial de Coulomb.

- 3) Supondremos también, por el momento, que los electrones no interactúan entre sí, esto es, no se repelen entre sí. De esta manera podremos enfocar nuestra atención hacia un solo electrón, estudiar su comportamiento y después solamente superponer el efecto de los restantes utilizando únicamente el principio de exclusión de Pauli.
- En resumen, estudiaremos el comportamiento de un conjun-

to de electrones independientes dentro de una pequeña cavidad esférica en presencia de un campo electromagnético uniforme  $\vec{E}_0(t)$  que apunta en la dirección del eje z ( $\vec{E}_0(t) = E_0(t)\hat{k}$ ). Por tratarse de un problema cuántico se resolverá la ecuación de Schrödinger adecuada al problema.

A continuación vamos a obtener una expresión para la densidad de carga para el modelo de la esfera conductora que hemos descrito.

La densidad de carga debida a un electrón de carga  $e$  esta dada por

$$\rho^e(\vec{r}, t) = e |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (3.1)$$

en donde  $\Psi(\vec{r}, t)$  es la función de onda y satisface la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r}, t) + [V_{\text{eem}}(\vec{r}, t) + V_e(\vec{r})]\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \left[ \frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \right] \quad (3.2)$$

donde

$V_{\text{eem}}(\vec{r}, t) \equiv$  energía potencial del electrón en presencia de el campo externo

y

$V_e(\vec{r}) \equiv$  energía potencial del electrón dentro de la esfera sin campo eléctrico externo.

Si suponemos que el campo externo  $\vec{E}_0(t)$  no depende del tiempo, es decir,  $\vec{E}_0(t) = E_0$ , entonces  $V_{\text{eem}}(\vec{r}, t)$  tampoco dependerá del tiempo y tendrá la forma

$$V_{\text{eem}}(\vec{r}, t) = V_{\text{eem}}(\vec{r}) = e(-E_0 z) = -E_0 e r \cos\theta = -eE_0 r$$

En este caso la solución de (3.2) tiene la forma

$$\Psi(\vec{r}, t) = \exp\left[\frac{-iE_1 t}{\hbar}\right] \Psi_1(\vec{r}) \quad (3.3)$$

donde  $\Psi_1(\vec{r})$  satisface la ecuación estacionaria

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\right]\Psi_1(\vec{r}) + [V_{\text{caem}}(\vec{r}) + V_0(\vec{r}) - E_1] \Psi_1(\vec{r}) = 0. \quad (3.4)$$

El índice  $i$  asociado a  $\Psi_1(\vec{r})$  y  $E_1$  cuenta las distintas soluciones de la ecuación (3.4).

Para resolver la ecuación anterior podemos utilizar la teoría de perturbaciones independiente del tiempo (IPIT) tomando como perturbación a  $V_{\text{caem}}(\vec{r})$ . Para hacer esto es necesario empezar por resolver la ecuación

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\right]\Psi_1^{(0)}(\vec{r}) + [V_0(\vec{r}) - E_1^{(0)}] \Psi_1^{(0)}(\vec{r}) = 0 \quad (3.5)$$

la cual corresponde al problema no perturbado cuyo hamiltoniano se denotara por  $H_0$ .

Si el potencial  $V_0(\vec{r})$  está dado por

$$V_0(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{si } r < a \\ \infty & \text{si } r \geq a \end{cases}$$

entonces para  $r \geq a$   $\Psi_1^{(0)}(\vec{r}) = 0$  y para  $r < a$   $\Psi_1^{(0)}(\vec{r})$  satisface la ecuación

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 - E \right] \Psi_{i, l, m}^{(0)}(r) = 0 \quad (3.6)$$

Para resolver esta ecuación se utiliza el método de separación de variables en coordenadas esféricas (ver Fig. 3.2)

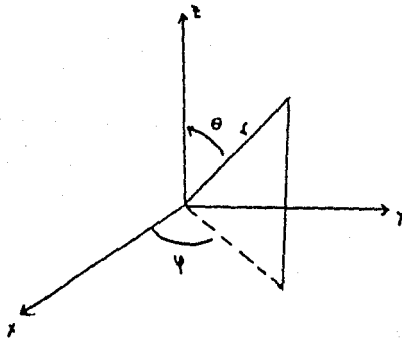


Fig. 3.2

y se encuentra que  $\Psi_{i, l, m}^{(0)}$  se puede escribir como [23]

$$\Psi_{i, l, m}^{(0)}(r) = \Psi_{nlm}^{(0)}(r) = \Psi_{nlm}^{(0)}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) \Theta_l^m(\theta) \Phi_m(\phi), \quad (3.7)$$

donde  $R_{nl}(r)$ ,  $\Theta_l^m(\theta)$  y  $\Phi_m(\phi)$  son funciones que dependen únicamente de una variable y serán discutidas más adelante. En esta expresión el índice  $i$  se ha sustituido por la terna de índices  $n, l, m$  ya que para distintos valores de  $n, l$  o  $m$  se obtienen distintas soluciones. Se encuentra que los posibles valores de estos índices son [24]

$$n = 1, 2, 3, \dots$$



$$l = 0, 1, 2, \dots$$

$$m = -l, -(l-1), \dots, 0, \dots, l-1, l.$$

Sin embargo todos los estados  $\Psi_{nlm}^{(0)}$  con  $l$  y  $n$  fijos están degenerados, es decir

$$E_{nlm}^{(0)} = E_{nlm}^{(0)}$$

y por tanto el índice  $m$  de las energías se acostumbra omitir y escribir simplemente  $E_{nl}^{(0)}$  (por conveniencia se acostumbra escribir el orden de los índices  $n$  y  $l$  invertidos, ver ecuación 3.18).

Las funciones  $R_{nl}(r)$ ,  $\Theta_l^m(\theta)$  y  $\Phi_m(\phi)$  satisfacen respectivamente las ecuaciones

$$r^2 \left[ \frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} \right] + 2r \left[ \frac{dR_{nl}(r)}{dr} \right] + \left[ K_{ln} r^2 - l(l+1) \right] R_{nl}(r) = 0 \quad (3.8)$$

$$\frac{-1}{\sin\theta} \left[ \frac{d}{d\theta} \left[ \sin\theta \frac{d \Theta_l^m(\theta)}{d\theta} \right] \right] + \frac{m^2 \Theta_l^m(\theta)}{\sin^2\theta} = l(l+1) \Theta_l^m(\theta) \quad (3.9)$$

y

$$\frac{d^2 \Phi_m(\phi)}{d\phi^2} = -m^2 \Phi_m(\phi) \quad (3.10)$$

con

$$K_{ln} = \left[ \frac{2m}{\hbar^2} \right] E_{ln}^{(0)} \quad (3.11)$$

Las soluciones de estas ecuaciones que satisfacen las condiciones de frontera apropiadas son respectivamente

$$R_{ln}(r) = j_l(rk_{ln}) \quad (3.12)$$

$$P_l^m(\theta) = P_l^m(\cos\theta) \quad (3.13)$$

y

$$I_m(\phi) = e^{im\phi} \quad (3.14)$$

ver referencias [25], [26] y [27], en donde  $j_l$  es la función de Bessel esférica de orden  $l$  y  $P_l^m$  la función asociada de Legendre dada por

$$P_l^m(\cos\theta) = \frac{[1-x^2]^{m/2}}{2^l l!} \left[ \frac{d^{l+m}(x^2-1)^l}{dx^{l+m}} \right]_{x=\cos\theta} \quad -l \leq m \leq l \quad (3.15)$$

Además  $k_{ln}$  debe ser tal que al evaluar  $R_{ln}$  en  $r=a$  sea igual a cero (ya que para  $r=a$   $\Psi_{nlm}^{(0)}(r) = 0$ ) es decir

$$R_{ln}(a) = j_l(ak_{ln}) = 0 \quad (3.16)$$

esta condición implica que el producto  $ak_{ln}$  debe ser igual a alguna de las raíces de la función  $j_l$ , o sea

$$k_{ln} = \frac{\alpha_{ln}}{a} \quad (3.17)$$

donde  $\alpha_{ln}$  es la raíz  $n$ -ésima de la función  $j_l$  y de acuerdo con (3.11)

$$E_{ln}^{(0)} = \frac{k_{ln}^2 h^2}{2m} \quad (3.18)$$

o bien

$$E_{ln}^{(0)} = \frac{\alpha_{ln}^2 h^2}{2ma^2} \quad (3.19)$$

que es la energía asociada a la eigenfunción no perturbada

$\Psi_{nlm}^{(0)}$  la cual se obtiene substituyendo (3.12)-(3.14) en (3.7). Así

$$\Psi_{nlm}^{(0)}(r, \theta, \varphi) = A_{nlm} j_l(kr) P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad (3.20)$$

donde  $A_{nlm}$  es una constante arbitraria.

Utilizando la definición de los armónicos esféricos

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \equiv (-1)^m \left[ \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}, \quad (3.21)$$

donde  $P_l^m(\cos\theta)$  está dado en (3.15), la eigenfunción se puede escribir como

$$\Psi_{nlm}^{(0)}(r) = A'_{nlm} j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (3.22)$$

La constante  $A'_{nlm}$  se elige de tal forma que  $\Psi_{nlm}^{(0)}$  esté normalizada a uno. Su valor es igual a

$$A_{nlm} = \frac{(2/a^3)^{1/2}}{j'_l(\alpha_{ln})} \quad (3.23)$$

donde  $j'_l$  es la derivada de la función de Bessel. Por tanto

$$\Psi_{nlm}^{(0)}(r) = \begin{cases} \frac{(2/a^3)^{1/2}}{j'_l(\alpha_{ln})} j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi) & \text{si } r < a \\ 0 & \text{si } r > a \end{cases} \quad (3.24)$$

Teniendo ya la eigenfunción imperturbada  $\Psi_{nlm}^{(0)}$  nos interesa ahora saber en qué se transforma al aplicarle la

perturbación para poder calcular la densidad de carga de la ecuación (3.1).

Lo primero que debemos notar es que estamos tratando con un caso degenerado ya que para una misma  $E_{1n}$  están asociadas varias funciones imperturbadas. En total, dado un valor de  $l$ , habrá asociada a cada  $E_{1n}$   $(2l+1)$  estados degenerados.

La T.F.I.T. usual no puede utilizarse en este caso puesto que su formulación está basada en la suposición de que a cada estado perturbado  $\Psi_{nlm}$  le corresponde un y solo un estado no perturbado  $\Psi_{nlm}^{(0)}$  al cual colapsará a medida que la perturbación va cesando. Sin embargo, cuando hay degeneración la correspondencia no es directa, porque dada la función perturbada  $\Psi_{nlm}$  y el conjunto de funciones no perturbadas  $(\Psi_{nlm}^{(0)}$  con  $-l \leq m \leq l$ ) no es posible saber de antemano de cuál  $\Psi_{nlm}^{(0)}$  provino  $\Psi_{nlm}$ , o bien si provino de alguna combinación lineal de ellas. No obstante, haciendo uso de la Teoría de Perturbaciones para el caso degenerado (T.F.D.), podremos determinar las combinaciones lineales apropiadas, que denotaremos por  $\Psi_{nlm}^{(0)'}$ , y utilizarlas como aproximaciones de orden cero.

Según la T.F.D. las funciones  $\Psi_{nlm}^{(0)'}$  deben ser tales que los elementos de matriz  $H_{nlm',nlm}^{(1)}$  de la perturbación  $H^1$ , (en nuestro caso  $H^1 = V_{eem}$ ) con  $m' \neq m$ , sean iguales a cero, lo cual implica que la probabilidad de que el sistema estando en el estado  $\Psi_{nlm}^{(0)'}$  pase al  $\Psi_{nlm'}^{(0)'}$  sea nula. Implica esto también que el paso del estado perturbado  $\Psi_{nlm}^{(0)'}$  sea conti-

nuo, esto es, sabemos con seguridad que  $\Psi_{nlm}$  proviene efectivamente de  $\Psi_{nlm}^{(0)}$ .

Usualmente el problema esbozado arriba se resuelve simplemente hallando la base que diagonaliza el bloque de matriz de la perturbacion y los elementos de la diagonal se toman como las correcciones a primer orden de la energia. Sin embargo, en nuestro caso, la base original  $\Psi_{nlm}^{(0)}$  que hemos obtenido ya es la apropiada, puesto que el bloque de matriz de  $H^1_{nlm, nlm}$  es diagonal. En efecto en nuestro caso tenemos que (haciendo  $H^1 = V_{eem}(\vec{r})$ )

$$\begin{aligned}
 H^1_{m'm} = H^1_{nlm, nlm} &= \langle \Psi_{nlm}^{(0)} | V_{eem}(\vec{r}) | \Psi_{nlm}^{(0)} \rangle \\
 &= \int_0^a \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left[ \frac{1}{j'_1(\alpha_{1n})} (2/a^3)^{1/2} j_1(K_{1n}r) Y_1^{m'}(\theta, \varphi) \right. \\
 &\quad \left. (-eE_0 r \cos\theta) \frac{1}{j'_1(\alpha_{1n})} (2/a^3)^{1/2} j_1(K_{1n}r) Y_1^m(\theta, \varphi) r^2 dr d\theta d\Omega \right] \\
 &= - \frac{2E_0 e}{a^3 (j'_1(\alpha_{1n}))^2} \int_0^a j_1^2(K_{1n}r) r^3 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_1^{m'}(\theta, \varphi) Y_1^m(\theta, \varphi) \cos\theta d\Omega
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

pero [28]

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_1^{m'}(\theta, \varphi) Y_1^m(\theta, \varphi) \cos\theta d\Omega = \left[ \frac{(1-m+1)(1+m+1)}{(2+1)(2+3)} \right]^{1/2} \delta_{m', m} \delta_{1', 1+1}$$

$$+ \left[ \frac{(1-m)(1+m)}{(2l+1)(2l-1)} \right]^{1/2} \varepsilon_{m'm} \varepsilon_{l', l-1} \quad (3.27)$$

por tanto haciendo  $l=1$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{1,0}^m(\theta, \varphi) Y_{1,0}^m(\theta, \varphi) \cos\theta \, d\Omega = 0 \quad (3.28)$$

y

$$H_{1,0}^m \varepsilon_{1,0}^m = 0, \quad m,m' \quad (3.29)$$

como se quería mostrar. La ecuación (3.29) nos dice además que los elementos de la diagonal también son cero y por tanto la T.P.D. a primer orden no dió ninguna corrección a la energía, i.e. no se rompió la degeneración. Mas adelante, utilizando argumentos de simetría, veremos que la perturbación exacta debe romper la degeneración y por tanto los corrimientos a la energía deben de ser distintos de cero en algún orden de perturbación, en consecuencia se podría intentar utilizar la T.P.D. a segundo orden para determinar dichas correcciones. No obstante, nuestro objetivo es calcular la densidad de carga a primer orden y no necesitamos calcular esas correcciones a la energía.

Otra forma de ver que la base  $\Psi_{1,0}^{(0)}$  es la apropiada es utilizando argumentos de simetría. En efecto, debido a que el sistema antes y después de la perturbación es invariante

bajo rotaciones alrededor del eje z, entonces los hamiltonianos  $H_0$ ,  $H^1$  y  $H_T$  deberán conmutar con el operador  $L_z$ , siendo  $H_0$  el hamiltoniano no perturbado,  $H^1$  la perturbación al hamiltoniano y  $H_T$  el hamiltoniano total. Es decir

$$H_0 L_z - L_z H_0 = H^1 L_z - L_z H^1 = H_T L_z - L_z H_T = 0. \quad (3.30)$$

En este caso se puede demostrar [29] que existen eigenfunciones de  $H_T$  que son también eigenfunciones de  $L_z$  y esto debe ser cierto para todos los valores del parámetro de perturbación  $g$ . En consecuencia, al construir la combinación lineal apropiada de eigenvectores no perturbados es necesario incluir solo aquellas funciones que pertenezcan al mismo eigenvalor  $m$  de  $L_z$ , que en nuestro caso solo hay una de ellas,  $\Psi_{n1m}^{(0)}$ . Por tanto  $\Psi_{n1m}^{(0)} = \Psi_{n1m}^{(0)}$ .

Formalmente esta simplificación se debe a que si  $L_z$  y  $H^1$  conmutan entonces

$$\langle m | H^1 | m' \rangle = \alpha_m \langle m | m' \rangle, \quad (3.31)$$

ya que la eigenfunción  $|m'\rangle$  de  $L_z$  es también eigenfunción de  $H^1$  asociada al eigenvalor  $\alpha_{m'}$ . De (3.31) se sigue que

$$\langle m | H^1 | m' \rangle = \alpha_m \delta_{mm'}. \quad (3.32)$$

y por tanto no habrá transiciones del estado  $m'$  al estado  $m$  bajo la perturbación.

El valor de  $\alpha_m$  fue determinado anteriormente y resultó ser igual a cero, lo que implicaba que la degeneración no se rompía a primer orden. Sin embargo, una vez introducida la perturbación el sistema solo es invariante bajo el grupo

$O(2)$  que es el conjunto de todas las rotaciones alrededor del eje z. Como  $O(2)$  es un grupo conmutativo se puede demostrar que la degeneración es de orden 1 y por tanto la degeneración se rompe ( las representaciones irreducibles de los grupos conmutativos son de orden  $1 \times 1$  ).

Una vez obtenidas las funciones no perturbadas apropiadas  $\Psi_{nlm}^{(0)}$ , procederemos a encontrar las funciones perturbadas a primer orden  $\Psi_{nlm}^{-}$ . Estas vienen dadas por

$$\Psi_{nlm}^{-} = \Psi_{nlm}^{(0)-} + g \Psi_{nlm}^{(1)-}, \quad (3.33)$$

en donde  $g$  es el parametro de la perturbación y  $\Psi_{nlm}^{(1)-}$  es la corrección a primer orden de  $\Psi_{nlm}^{-}$ . Tomando la expresión para  $\Psi_{nlm}^{(1)-}$  de la referencia [20] tenemos que

$$\Psi_{nlm}^{-} = \Psi_{nlm}^{(0)-} + g \sum_{n'l'm'} \Psi_{n'l'm'}^{(0)-} \frac{H_{n'l'm';nlm}^+}{-[E_{l'n'}^{(0)} - E_{ln}^{(0)}]}. \quad (3.34)$$

En principio la suma  $\Sigma'$  corre sobre todos los posibles valores de  $n'$ ,  $l'$  y  $m'$  excepto el caso  $n'=n$ ,  $l'=l$  y  $m'=m$ . Sin embargo, debido a que existe una regla de selección entre los valores de los índices, la suma se puede simplificar como veremos a continuación. Tenemos que

$$H_{n'l'm';nlm}^+ = \langle \Psi_{n'l'm'}^{(0)-} | V_{\text{pert}}^{-} | \Psi_{nlm}^{(0)-} \rangle$$

$$= \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \Psi_{n'l'm'}^{(0)*}(\bar{r}) [-eE_0 r \cos\theta] \Psi_{nlm}^{(0)-}(\bar{r}) dV$$



$$= \left[ \frac{-2eE_0}{a^2 j'_1(\alpha_{1,n}) j'_1(\alpha_{1,n})} \right] \left[ \int_0^a j_1(K_{1,n} r) j_1(K_{1,n} r) r^2 dr \right. \\ \left. j_1(K_{1,n} r) r^2 dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_1^m(\theta, \varphi) Y_1^m(\theta, \varphi) \cos\theta \sin\theta d\theta d\varphi \right] \quad (3.35)$$

sea  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ , entonces, de la ecuación (3.27) tenemos que

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_1^{m'}(\theta, \varphi) \cos\theta Y_1^m(\theta, \varphi) d\Omega = \left[ \frac{(1-m+1)(1+m+1)}{(2+1)(2+3)} \right]^{1/2} \epsilon_{m',m} \epsilon_{1',1+1} + \\ \left[ \frac{(1-m)(1+m)}{(2-1)(2+1)} \right]^{1/2} \epsilon_{m',m} \epsilon_{1',1-1} \quad (3.36)$$

así, los términos de la ecuación (3.34) serán distintos de cero solo si  $m'=m$  y  $l'=l+1$  o  $l'=l-1$ . Mas explícitamente

$$H_{n,1,m,1,m} = \frac{-2E_0 e \epsilon_{m,m}}{a^2 j'_1(\alpha_{1,n}) j'_1(\alpha_{1,n})} \left[ \int_0^a j_1(K_{1,n} r) j_1(K_{1,n} r) r^2 dr \right]$$

$$\left[ \frac{(1-m+1)(1+m+1)}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{\frac{1}{2}} \varepsilon_{l', l+1} + \left[ \frac{(1-m)(1+m)}{(2l-1)(2l+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \varepsilon_{l', l-1} \quad (3.37)$$

De (3.37) y (3.34) tenemos

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = \Psi_{nlm}^{(0)}(\vec{r}) - q \sum_{n'} \Psi_{n'l'm'}^{(0)}(\vec{r}) \left[ \frac{H_{n'-1, m, nlm}}{E_{l+1, n'} - E_{ln}} \right] - q \sum_{n''}$$

$$\Psi_{n'l'm'}^{(0)}(\vec{r}) \left[ \frac{H_{n'-1, m, nlm}}{E_{l-1, n''} - E_{ln}} \right] \quad (3.38)$$

o bien

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = \Psi_{nlm}^{(0)}(\vec{r}) - q \sum_{n'=l+1}^{\infty} \sum_{l'=l-1}^{\infty} \left[ \frac{\Psi_{n'l'm'}^{(0)}(\vec{r}) H_{n'-1, m, nlm}}{E_{l+1, n'} - E_{ln}} \right]$$

(3.39)

Habiendo encontrado la expresión para  $\Psi_{nlm}(\vec{r})$ , volvamos al problema original que es el de calcular la densidad de carga de la esfera en presencia del campo eléctrico. Para ello calculemos primero la densidad de carga debida a un solo electrón en un solo estado  $\Psi_{nlm}(\vec{r})$ . De acuerdo a (3.1) tenemos que

$$\rho_{nlm}^{\pm}(\vec{r}, t) = e \left| \Psi_{nlm}(\vec{r}, t) \right|^2 \quad (3.40)$$

pero debido a la forma de  $\Psi_{nlm}(\vec{r}, t)$  dada por (3.3)

$\rho_{n1m}^{\pm}(\vec{r}, t)$  no depende del tiempo y podemos escribir

$$\rho_{n1m}^{\pm}(\vec{r}) = e \left| \Psi_{n1m}^{\pm}(\vec{r}) \right|^2 \quad (3.41)$$

sustituyendo (3.39)

$$\begin{aligned} \rho_{n1m}^{\pm}(\vec{r}) = e & \left[ \Psi_{n1m}^{(\pm)*}(\vec{r}) - g \sum_{n'+1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \left[ \frac{\Psi_{n'+1, l, m}^{(\pm)*}(\vec{r}) H_{n'+1, l, m, n1m}}{E_{l, n'}^{(\pm)} - E_{ln}} \right] \right] \left[ \Psi_{n1m}^{(\pm)}(\vec{r}) \right. \\ & \left. - g \sum_{n'+1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \left[ \frac{\Psi_{n'+1, l, m}^{(\pm)}(\vec{r}) H_{n'+1, l, m, n1m}}{E_{l, n'}^{(\pm)} - E_{ln}} \right] \right] \quad (3.42) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_{n1m}^{\pm}(\vec{r}) = e & \left[ \Psi_{n1m}^{(\pm)*}(\vec{r}) \Psi_{n1m}^{(\pm)}(\vec{r}) - g \left| \Psi_{n1m}^{(\pm)}(\vec{r}) \sum_{n'+1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\Psi_{n'+1, l, m}^{(\pm)*}(\vec{r}) H_{n'+1, l, m, n1m}}{E_{l, n'}^{(\pm)} - E_{ln}} \right. \right. \\ & \left. \left. - g \Psi_{n1m}^{(\pm)*}(\vec{r}) \sum_{n'+1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \left[ \frac{\Psi_{n'+1, l, m}^{(\pm)}(\vec{r}) H_{n'+1, l, m, n1m}}{E_{l, n'}^{(\pm)} - E_{ln}} \right] + g^2 \sum_{n'+1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{q=1}^{\infty} \left[ \frac{\Psi_{n'+1, l, m}^{(\pm)*}(\vec{r}) H_{n'+1, l, m, n1m}}{E_{l, n'}^{(\pm)} - E_{ln}} \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{\Psi_{n'+1, p, m}^{(\pm)}(\vec{r}) H_{n'+1, p, m, n1m}}{E_{p, n'}^{(\pm)} - E_{nq}} \right] \right] \end{aligned}$$

Donde a primer orden

$$\rho_{n_{1m}}^e(\vec{r}) = e \left| \Psi_{n_{1m}}^{(0)}(\vec{r}) \right|^2 - 2 \operatorname{Re} \left[ g \Psi_{n_{1m}}^{(0)*}(\vec{r}) \sum_{n' \neq n} \frac{\Psi_{n'1m}^{(0)}(\vec{r})}{E_{n'1m}^{(0)} - E_{n1m}^{(0)}} \right] + \sum_{n' \neq n} H_{n'1m, n_{1m}} \left| \right| \quad (3.43)$$

Ahora vamos a tomar en cuenta el hecho de que en realidad tenemos un conjunto de muchos electrones ocupando los distintos estados  $\Psi_{n_{1m}}(\vec{r})$ .

Sea  $\eta_{n_{1m}}$  el número promedio de electrones que están en un cierto estado perturbado  $\Psi_{n_{1m}}(\vec{r})$  (obviamente  $\eta_{n_{1m}}$  dependerá de la energía  $E_{n_{1m}}$  asociada a  $\Psi_{n_{1m}}(\vec{r})$ , del número total de electrones y de la temperatura  $T$  del sistema), entonces la densidad de carga promedio en el punto  $\vec{r}$  debida al estado  $\Psi_{n_{1m}}(\vec{r})$  es

$$\begin{aligned} \overline{\rho_{n_{1m}}^e(\vec{r})} &= \overline{\rho_{n_{1m}}^e(\vec{r})} \eta_{n_{1m}} \\ &= e \left| \Psi_{n_{1m}}(\vec{r}) \right|^2 \eta_{n_{1m}}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Por tanto, la densidad de carga promedio en el punto  $\vec{r}$  debida a todos los electrones del sistema será

$$\overline{D^e(\vec{r})} = \sum_{n_{1m}} \overline{\rho_{n_{1m}}^e(\vec{r})}$$

$$= \sum_{n, l, m} e^{-|\Psi_{n, l, m}(\vec{r})|^2} \eta_{n, l, m} \quad (3.45)$$

El valor del número  $\eta_{n, l, m}$  está dado por la distribución de Fermi

$$\eta_{n, l, m} = \frac{2}{e^{(E_{n, l, m} - E_F)/KT} + 1} \quad (3.46)$$

siendo  $E_F$  la energía de Fermi y  $K$  la constante de Boltzman. El 2 del numerador se ha introducido para tomar en cuenta la degeneración del espín.

Como a primer orden de perturbación  $E_{n, l, m} \approx E_{1n}^{(0)}$  podemos escribir

$$\eta_{n, l, m} = \eta_{n, l, m} = \frac{2}{e^{(E_{1n}^{(0)} - E_F)/KT} + 1} \quad (3.47)$$

lo cual implica suponer que los  $2l+1$  estados  $\Psi_{n, l, m}(\vec{r})$  con  $n$  y  $l$  fijos y  $-l \leq m \leq l$  tienen la misma probabilidad de estar llenos o vacíos.

Si hacemos la temperatura igual a cero obtenemos que

$$\eta_{n, l, m} = \begin{cases} 2 & \text{si } E_{1n}^{(0)} \leq E_F \\ 0 & \text{si } E_{1n}^{(0)} > E_F \end{cases} \quad (3.48)$$

Obteniéndose para (3.45)

$$D(\vec{r}) = e^{-\sum_{n, l} \eta_{n, l} \sum_{m=-l}^l |\Psi_{n, l, m}(\vec{r})|^2}$$

$$= 2e \sum_{n,l,m=0}^{e_r} |\Psi_{nlm}(\bar{r})|^2. \quad (3.49)$$

Los valores extremos de los índices  $n, l$  y  $m$ , indicados simbólicamente en esta expresión, son tales que  $m$  corre de  $-l$  a  $l$  y los índices  $n$  y  $l$  lo hacen de modo que

$$E_{01}^{(0)} = E_{10}^{(0)} = E_r$$

siendo  $E_{01}^{(0)}$  el estado electrónico de mas baja energía.

Sustituyendo el valor de  $e |\Psi_{nlm}(\bar{r})|^2$  dado en (3.43) en la ecuación (3.49)

$$D(\bar{r}) = 2e \sum_{n,l,m=0}^{e_r} \left[ |\Psi_{nlm}^{(0)}(\bar{r})|^2 - 2 \operatorname{Re} \left[ g \Psi_{nlm}^{(0)*}(\bar{r}) \sum_{\substack{n'=l+1 \\ l-1}}^{\infty} \sum_{m'} \frac{\Psi_{n'l'm'}^{(0)}(\bar{r}) H_{n'l'm',nlm}}{E_{l'n'}^{(0)} - E_{ln}^{(0)}} \right] \right] \quad (3.50)$$

$$D(\bar{r}) = 2e \sum_{n,l,m=0}^{e_r} |\Psi_{nlm}^{(0)}(\bar{r})|^2 - 2e \sum_{n,l,m=0}^{e_r} \operatorname{Re} \left[ g \Psi_{nlm}^{(0)*}(\bar{r}) \sum_{\substack{n'=l+1 \\ l-1}}^{\infty} \sum_{m'} \right]$$

$$\left. \frac{\Psi_{n'l'm}^{(0)}(\vec{r}) H_{n'l'm, nlm}}{E_{l'n'}^{(0)} - E_{ln}} \right\} \quad (3.51)$$

Pero notamos que el término  $2e \sum_{n'l'm=0}^{E_T} |\Psi_{n'l'm}^{(0)}(\vec{r})|^2$  es la densidad de carga electronica del sistema sin perturbacion i.e. antes de que se introdujera el campo externo  $E_0$  ( $e|\Psi_{n'l'm}^{(0)}(\vec{r})|^2$  es la densidad de carga debida a un solo electrón en el estado  $\Psi_{n'l'm}^{(0)}$ , pero si sumamos sobre los diferentes estados desde  $n'l'm=0$  hasta  $E_T$ , estaremos abarcando la densidad electronica total de la esfera). Por tanto, esta densidad de carga se anulará con la densidad de carga protonica pues originalmente la esfera no tenia carga neta i.e. su carga total era cero.

En consecuencia nos ocuparemos de la segunda suma que es la densidad de carga inducida por el campo y es la siguiente

$$D^e(\vec{r}) = -4\text{Re} \left[ e g \sum_{n'l'm=0}^{E_T} \sum_{n'l'+1}^{E_T} \sum_{l=1} \left[ \Psi_{n'l'm}^{(0)}(\vec{r}) \frac{\Psi_{n'l'+1,m}^{(0)}(\vec{r}) H_{n'l'+1,m, nlm}}{E_{l'n'}^{(0)} - E_{ln}} \right] \right] \quad (3.52)$$

Sin embargo, se puede demostrar que la suma sobre  $n'$  y  $l'$  puede restringirse a valores de la energia  $E_{l'n'}$  tales que

$E_{l+1, m} \neq E_r$  ya que la suma de los terminos con energias menores vale cero. En efecto, sea

$$G = \operatorname{Re} \left[ \frac{\sum_{n'l'm'=0}^{E_r} \sum_{n''l''m''=1}^{E_r} \sum_{l'-1} \Psi_{n'l'm'}^* \Psi_{n''l''m''} H_{n''l''m''}^1}{E_{n''l''m''} - E_{n'l'm'}} \right] \quad (3.53)$$

$$= \sum_{n'l'm'=0}^{E_r} \sum_{n''l''m''=1}^{E_r} \sum_{l'-1} \operatorname{Re} \left( \frac{\Psi_{n'l'm'}^* \Psi_{n''l''m''} H_{n''l''m''}^1}{E_{n''l''m''} - E_{n'l'm'}} \right)$$

En donde el argumento  $r$  de  $\Psi_{n'l'm'}$  y el superindice '(0)' de  $E_{n'l'm'}$  se han omitido por comodidad.

Como

$$H_{n''l''m''}^1 = H_{n''l''m''}^1(\varepsilon_{l+1, l} + \varepsilon_{l-1, l}) S_{mm} \quad (3.53')$$

la ecuacion anterior se puede escribir

$$= \sum_{n'l'm'=0}^{E_r} \sum_{n''l''m''=1}^{E_r} \frac{\operatorname{Re}(\Psi_{n'l'm'}^* \Psi_{n''l''m''} H_{n''l''m''}^1)}{E_{n''l''m''} - E_{n'l'm'}}$$

en donde la suma sobre los indices primados corre ahora sobre los mismos valores que los indices no primados excepto los casos  $(n'l'm') = (n''l''m'')$ , lo cual queda indicado mediante la sigma mayúscula primada. Cambiando  $n''l''m''$  por  $n'l'm'$  y viceversa



$$\begin{aligned}
 &= \sum_{n'l'm'} e_{\tau} \sum_{n''l''m''} e_{\tau'} \frac{\operatorname{Re}(\Psi_{n'l'm'}^* \Psi_{n''l''m''}^1 H_{n''l''m''})}{E_{n''l''} - E_{n'l}} \\
 &= -\sum_{n'l'm'} e_{\tau} \sum_{n''l''m''} e_{\tau'} \frac{\operatorname{Re}(\Psi_{n''l''m''}^* \Psi_{n'l'm'}^1 H_{n''l''m''})}{E_{n''l''} - E_{n'l}}
 \end{aligned}$$

pero  $H_{n''l''m''}^1 = H_{n''l''m''}^{1*}$

$$= -\sum_{n'l'm'} e_{\tau} \sum_{n''l''m''} e_{\tau'} \frac{\operatorname{Re}(\Psi_{n''l''m''}^* \Psi_{n'l'm'}^1 H_{n''l''m''})}{E_{n''l''} - E_{n'l}}$$

y como  $\operatorname{Re}(z) = \operatorname{Re}(z^*)$  para cualquier número complejo  $z$   
entonces

$$\begin{aligned}
 S &= -\sum_{n'l'm'} e_{\tau} \sum_{n''l''m''} e_{\tau'} \frac{\operatorname{Re}(\Psi_{n''l''m''}^* \Psi_{n'l'm'}^1 H_{n''l''m''})}{E_{n''l''} - E_{n'l}} \\
 &= -S
 \end{aligned}$$

lo que implica

$$S = 0. \quad (3.54)$$

Así, la ecuación (3.52) se puede escribir

$$D^{\omega}(\bar{r}) = -4\operatorname{Re} \left[ \operatorname{eg} \sum_{n'l'm'} e_{\tau} \sum_{n''l''m''} e_{\tau'} \left[ \frac{\Psi_{n''l''m''}^{(\omega)*}(\bar{r}) \Psi_{n'l'm'}^{(\omega)}(\bar{r}) H_{n''l''m''}^{(\omega)}}{E_{n''l''}^{(\omega)} - E_{n'l}^{(\omega)}} \right] \right] \quad (3.55)$$

En donde ahora los valores extremos de los índices  $n, l, m$ ,

$n'$  y  $l'$ , indicados simbólicamente en esta expresión, son tales que:  $m$  corre de  $-l$  a  $l$ ;  $n$  y  $l$  corren de modo que

$$E_{n'l} = E_{l'n} = E_r, \quad (3.56)$$

y  $n'$  y  $l'$  corren de modo que

$$E_{n'l'} = E_r. \quad (3.57)$$

Haciendo el cambio de variable  $x=r/a$  en la integral de (3.37) y sustituyendo (3.17), (3.19), (3.24) y (3.37) en (3.55) obtenemos

$$D = \bar{r} = -4Re \left[ \frac{4\pi e q}{4\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \left[ j_1(\alpha_{ln}r/a) j_{l+1}(\alpha_{l'n}r/a) \right. \right. \\ \left. \left. (-\pi) e E_0 V'_n \sum_{m=-l}^{l} \frac{Y_1^{m*}(\theta, \varphi) Y_{l+1}^m(\theta, \varphi) ((l+1)^2 - m^2)^{1/2}}{((2l+2)^2 - 1)^{1/2}} \right] + \right. \\ \left. \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \left[ j_1(\alpha_{ln}r/a) j_{l+1}(\alpha_{l'n}r/a) \right. \right. \\ \left. \left. (-\pi) e E_0 V'_n \sum_{m=-(l-1)}^{l-1} \frac{Y_1^{m*}(\theta, \varphi) Y_{l+1}^m(\theta, \varphi) (l^2 - m^2)^{1/2}}{(4l^2 - 1)^{1/2}} \right] \right]$$

(3.58)

donde

$$V'_{R} = \frac{2}{\pi [j'_{l'+1}(\alpha_{l'+1,n}) j'_{l'}(\alpha_{l'n})]^2 [\alpha_{l'+1,n}^2 - \alpha_{l'n}^2]} \int_0^1 j_{l'+1}(\alpha_{l'+1,n} x) j_{l'}(\alpha_{l'n} x) x^2 dx \quad (3.59)$$

y

$$V''_{R} = \frac{2}{\pi [j'_{l'-1}(\alpha_{l'-1,n}) j'_{l'}(\alpha_{l'n})]^2 [\alpha_{l'-1,n}^2 - \alpha_{l'n}^2]} \int_0^1 j_{l'-1}(\alpha_{l'-1,n} x) j_{l'}(\alpha_{l'n} x) x^2 dx \quad (3.60)$$

Como en (3.58) los términos correspondientes al caso  $l'=l+1$  se pueden escribir como

$$Y_l^m(\theta, \rho) Y_{l+1}^m(\theta, \rho) \frac{((l+1)^2 - m^2)^{1/2}}{((2l+2)^2 - 1)^{1/2}} = \frac{(-1)^{2m} \left[ \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{1/2}}{\left[ \frac{(2(l+1)+1)(l+1-m)!}{4\pi(l+1+m)!} \right]^{1/2} P_l^m P_{l+1}^m \left[ \frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+2)^2 - 1} \right]^{1/2}}$$

$$= \frac{1}{4\pi} \left[ \frac{(2l+1)(2l+3)(l-m)!(l-m)!(l-m+1)((l+1)^2 - m^2)}{(l+m)!(l+m)!(l+m+1)[(2l+2)^2 - 1]} \right]^{1/2} P_l^m P_{l+1}^m$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{4\pi} \left[ \frac{((2l+2)^2-1)(l-m+1)(l+1-m)(l+1+m)}{((2l+2)^2-1)(l+m+1)} \right]^{1/2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m P_{l+1}^m \\
&= \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{(l-m+1)(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m P_{l+1}^m \\
&= \frac{(l-m+1)!}{4\pi(l+m)!} P_l^m P_{l+1}^m \quad (3.61)
\end{aligned}$$

y los correspondientes al caso  $l' = l-1$  como

$$\begin{aligned}
Y_l^m(\theta, \varphi) Y_{l-1}^m(\theta, \varphi) &= \frac{(l^2-m^2)^{1/2}}{(4l^2-1)^{1/2}} = (-1)^m \left[ \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{1/2} \\
&= \left[ \frac{(2(l-1)+1)(l-1-m)!}{4\pi(l-1+m)!} \right]^{1/2} P_{l-1}^m P_{l-1}^m \left[ \frac{l^2-m^2}{4l^2-1} \right]^{1/2} \\
&= \frac{1}{4\pi} \left[ \frac{(2l+1)(2l-1)(l-m-1)!(l-m)(l-1-m)!(l-m)(l+m)}{(l+m-1)!(l+m)(l+m-1)!(2l+1)(2l-1)} \right]^{1/2} P_{l-1}^m P_{l-1}^m \\
&= \frac{1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m-1)!} P_{l-1}^m P_{l-1}^m \quad (3.62)
\end{aligned}$$

entonces al sustituir (3.61) y (3.62) en (3.59) obtenemos

$$D(r) = +4 \frac{e^2 mg E_0}{\hbar^2} \operatorname{Re} \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\substack{m \\ > 0}} j_n(\alpha_{ln} r/a) j_{n+1}(\alpha_{l+1,n} r/a) V'_n \right]$$

$$\sum_{m=1}^{\infty} \frac{(1-m)!}{(1+m)!} P_1^m P_{1-1}^m + \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} j_1(\alpha_{1n}r/a) j_{1-1}(\alpha_{1-1n}r/a) V'_{Rn}$$

$$\left. \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(1-m)!}{(1+m-1)!} P_1^m P_{1-1}^m \right] \quad (3.63)$$

Utilizando las propiedades de las funciones  $F_1^m$  podemos reorganizar los términos de las sumas sobre el índice  $m$ , de tal manera que solo aparezcan sumas sobre  $m$  desde 1 hasta 1 mas el término correspondiente a  $m=0$ . Además, si notamos que el símbolo "Re" de (3.63) se puede omitir (debido a que las cantidades encerradas dentro del parentesis cuadrado son reales) y hacemos  $g=1$ , entonces la expresión para la densidad de carga dentro de la esfera se puede escribir finalmente como

$$D(r) = 4 \frac{e^2 m E_0}{X^2} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \sum_{m=0}^{\infty} j_1(\alpha_{1n}r/a) j_{1+1}(\alpha_{1+1n}r/a) V'_{Rn} \right]$$

$$\left[ (1+1) P_1 P_{1+1+2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(1+1-m)!}{(1+m)!} P_1^m P_{1+1}^m + \sum_{n=0}^{\infty} j_1(\alpha_{1n}r/a) \right]$$

$$j_{1-1}(\alpha_{1-1n}r/a) \cdot V'_{Rn} \left[ 1 P_1 P_{1-1+2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(1-m)!}{(1-1+m)!} P_1^m P_{1-1}^m \right]$$

Utilizando la fórmula (3.58) se calcula la polarizabilidad  $\alpha$ , que es

$$\alpha = -\frac{16me^2\pi}{3h^2} \sum_{n,l} ( \sum V_R^{(l+1)} + \sum V_R^{(l)} ) \quad (1) \quad (3.65)$$

en donde

$$V_R^{(l+1)} = V_R^{(l)} \int_0^1 a^4 x^3 j_{l,n}(\alpha_{l,n}x) j_{l+1}(\alpha_{l+1,n}x) dx$$

y utilizando (3.59) tenemos que

$$V_R^{(l+1)} = \frac{2a^4}{\pi [j'_{l+1}(\alpha_{l+1,n}) j'_l(\alpha_{l,n})]^2 [\alpha_{l+1,n}^2 - \alpha_{l,n}^2]} \left[ \int_0^1 j_{l+1}(\alpha_{l+1,n}x) j_l(\alpha_{l,n}x) x^3 dx \right]^2 \quad (3.66)$$

y además

$$V_R^{(l-1)} = V_R^{(l)} \int_0^1 a^4 x^3 j_{l,n}(\alpha_{l,n}x) j_{l-1}(\alpha_{l-1,n}x) dx$$

utilizando (3.60), tenemos que

$$V_R^{(l-1)} = \frac{2a^4}{\pi [j'_{l-1}(\alpha_{l-1,n}) j'_l(\alpha_{l,n})]^2 [\alpha_{l-1,n}^2 - \alpha_{l,n}^2]}$$

$$\left[ \int_0^1 j_{l-1}(\alpha_{l-1, n} x) j_l(\alpha_{l, n} x) x^2 dx \right]^2 \quad (3.67)$$

La carga total Q, en media esfera, esta dada por

$$Q = \int_{V/2} \rho(x) dv \quad (3.68)$$

utilizando, nuevamente (3.58) obtenemos

$$Q = A \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \sum_{l=0}^{\infty} U'_{R_1} \sum_{m=1}^{\infty} R_1 R_{-}/2 \frac{(1+m+1)!}{(1-m+1)!} \sum_{i=L^+}^{L_0} M_{i+1/2} \begin{cases} \frac{(1-i)!!}{1!!} & \text{1 par} \\ \frac{1!!}{(1+i)!!} & \text{1 impar} \end{cases} \right. \\ \left. + \sum_{l=0}^{\infty} U''_{R_1} \sum_{m=1}^{\infty} R_2 R_{-}/2 \frac{(1+m)!}{(1-m)!} \sum_{i=L^+}^{L_0} M_{i-1/2} \begin{cases} \frac{(1-i-1)!!}{(1-1)!!} & \text{1-1 par} \\ \frac{(1-1)!!}{1!!} & \text{1-1 impar} \end{cases} \right] \quad (3.69)$$

en donde A,  $U'_{R_1}$ ,  $U''_{R_1}$ ,  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $R_{+}$ ,  $R_{-}$ ,  $M_{i+1/2}$  y  $M_{i-1/2}$  son:

$$LS = \begin{cases} m-2 & \text{si } m+1 \text{ par} \\ m-1 & \text{si } m+1 \text{ impar} \end{cases}$$

$$A = - \frac{16 m e^2 \pi E_0}{k^2}$$

$$R_1 = \left[ \frac{(1+i)^k - m^k}{(2i+3)^2 - 1} \right]^{1/2}$$

$$R_2 = \left[ \frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1} \right]^{1/2}$$

$$U' = a^2 V_R' \int_0^1 j_1(\alpha_{1n}x) j_{1+i}(\alpha_{1+i}x) x^2 dx$$

$$U'' = a^2 V_R'' \int_0^1 j_1(\alpha_{1n}x) j_{1-i}(\alpha_{1-i}x) x^2 dx$$

$$R_+ = \left[ \frac{(2i+1)(1-m)!(2i+3)(1+i-m)!}{(1+m)!(1+i+m)!} \right]^{1/2}$$

y

$$R_- = \left[ \frac{(2i+1)(1-m)!(2i-1)(1-i-m)!}{(1+m)!(1-i+m)!} \right]^{1/2}$$

$$M_{11} = \frac{(1+i-1)!!(1-i-1)!!}{(1+i+2)!!(1-i)!!}$$

$$M_{1-11} = \frac{(1+i-2)!!(1-i-2)!!}{(1+i+1)!!(1-i-1)!!}$$

Los resultados que predicen estas fórmulas que, como hemos dicho, no incluyen la interacción electrónica serán mostrados en el capítulo siguiente.



Ahora vamos a discutir las modificaciones que hay que hacer en estas formulas para tomar en cuenta dicha interacción. La forma en que lo vamos a hacer será, en esencia, la misma que utilizaron Lushnikov y Simonov en la referencia [7]. Estos autores mostraron que la polarizabilidad estática correcta esta dada por

$$\alpha = - \frac{e^2}{3} \sum_{i,j} r_{i,j} \cdot R_{i,j} \frac{\eta_i - \eta_j}{E_i - E_j} \quad (3.70)$$

en donde  $R_{i,j}$  son los elementos de matriz del operador

$$R = rf(r) = r \frac{3[3Y]^{1/2}}{\sinh(3Y)^{1/2}} \alpha([3Y]^{1/2} r/a) \quad (3.71)$$

donde

$$\alpha([3Y]^{1/2} x) = \frac{\cosh([3Y]^{1/2} x)}{([3Y]^{1/2} x)^2} - \frac{\sinh([3Y]^{1/2} x)}{([3Y]^{1/2} x)^3} \quad (3.72)$$

Sin embargo, podemos ver que la ecuación (3.70) resulta de tomar una densidad de carga semejante a la que hemos utilizado nosotros pero con una pequeña modificación que consistió en sustituir el integrando

$$j_1(\alpha_{1n} x) j_1(\alpha_{1n} x) x^3 \quad (3.73)$$

que aparece en (3.59) y (3.60) de  $V'_n$  y  $V''_n$  por

$$j_1(\alpha_{1n} x) j_1(\alpha_{1n} x) x^3 \left[ \frac{\cosh([3Y]^{1/2} x)}{([3Y]^{1/2} x)^2} - \frac{\sinh([3Y]^{1/2} x)}{([3Y]^{1/2} x)^3} \right]$$

(3.74)

En efecto, de las ecuaciones (3.52) y (3.53')

tenemos que

$$D^e(\bar{r}) = -4\text{Re} \left[ e^{\gamma} \sum_{n'l'm'} \Psi_{n'l'm'}^{(0)}(\bar{r}) \frac{\Psi_{n'l'm'}^{(0)}(\bar{r}) H_{n'l'm'}^{(0)}}{E_{l'm'}^{(0)} - E_{l'm'}^{(0)}} \right]$$

En donde ahora en vez de tomar  $H^2 = -eE_0 r \cos\theta = -eE_0 \cdot r$

tomaremos

$$H^2 = -eE_0 R \cos\theta = -eE_0 \cdot R,$$

con  $R$  definida como en (3.71).

Por brevedad haremos

$$n'l'm' = j$$

$$n'l'm = i$$

entonces

$$H_{n'l'm', n'l'm} = H_{ji} = -e E_0 R_{ji} \quad (3.75)$$

y por tanto

$$D^e(\bar{r}) = 4e^2 E_0 \cdot \text{Re} \left[ \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \Psi_{i}^{(0)}(\bar{r}) \frac{\Psi_{j}^{(0)}(\bar{r}) R_{ji}}{E_j^{(0)} - E_i^{(0)}} \right] \quad (3.76)$$

Por otro lado, de la ecuación (2.26)

$$P = \int r D^e(\bar{r}) dv$$

entonces

$$\begin{aligned}
 \mathbf{p} &= \int r 4e^2 E_0 \cdot \operatorname{Re} \left[ \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \Psi_{j,1}^{(l)*}(\vec{r}) \frac{\Psi_j^{(l)}(\vec{r}) R_{j,1}}{E_j^{(l)} - E_l^{(l)}} \right] dv \\
 &= -4e^2 E_0 \cdot \operatorname{Re} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{R_{j,1}}{E_j^{(l)} - E_l^{(l)}} \int \Psi_{j,1}^{(l)*}(\vec{r}) r \Psi_j^{(l)}(\vec{r}) dv
 \end{aligned} \tag{3.77}$$

pero

$$\int \Psi_{j,1}^{(l)*}(\vec{r}) r \Psi_j^{(l)}(\vec{r}) dv = r_{j,1} = r_{1,j} \tag{3.78}$$

por tanto

$$\mathbf{p} = -4e^2 E_0 \cdot \operatorname{Re} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{R_{j,1} r_{j,1}}{E_j^{(l)} - E_l^{(l)}} \tag{3.79}$$

en donde el producto  $R_{j,1} r_{j,1}$  es un tensor. Si ahora comparamos la expresión que relaciona la polarizabilidad  $\alpha$  con el momento dipolar  $\mathbf{p}$

$$\mathbf{p} = \vec{\alpha} E_0 \tag{3.80}$$

obtenemos

$$\vec{\alpha} = 4 e^2 \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{R_{j,1} r_{j,1}}{E_j^{(l)} - E_l^{(l)}} \tag{3.81}$$

usando (3.48) podemos escribir

$$\vec{\alpha} = 2 e^2 \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{R_{j,1} r_{j,1}}{E_j^{(l)} - E_l^{(l)}} \tag{3.82}$$

$$= e^2 \sum_{j, k} \eta_j \frac{R_{j, k} r_{j, k}^*}{E_j - E_k} + e^2 \sum_{j, k} \eta_j \frac{R_{k, j} r_{j, k}^*}{E_j - E_k} \quad (3.83)$$

$$= e^2 \sum_{j, k} \eta_k \frac{R_{j, k} r_{j, k}^*}{E_j - E_k} + e^2 \sum_{j, k} \eta_j \frac{R_{k, j} r_{k, j}^*}{E_k - E_j} \quad (3.84)$$

o

$$= e^2 \sum_{j, k} \eta_k \frac{R_{j, k} r_{j, k}^*}{E_j - E_k} - e^2 \sum_{j, k} \eta_j \frac{R_{k, j} r_{k, j}^*}{E_j - E_k} \quad (3.85)$$

además

$$r_{k, j} = r_{j, k}^* \text{ y } R_{k, j} = R_{j, k}^* \implies R_{k, j} r_{k, j}^* = R_{j, k} r_{j, k}^* = (R_{j, k} r_{j, k}^*)^*$$

por tanto

$$= e^2 \sum_{j, k} \eta_k \frac{R_{j, k} r_{j, k}^*}{E_j - E_k} - e^2 \sum_{j, k} \eta_j \frac{(R_{j, k} r_{j, k}^*)^*}{E_j - E_k} \quad (3.86)$$

y como ambas sumas son números reales podemos tomar el complejo conjugado de la segunda y escribir

$$= e^2 \sum_{j, k} \frac{\eta_k - \eta_j}{E_j - E_k} R_{j, k} r_{j, k}^* \quad (3.87)$$

$$= -e^2 \sum_{j, k} \frac{\eta_j - \eta_k}{E_j - E_k} R_{j, k} r_{j, k}^* \quad (3.88)$$

$$= -e^2 \sum_{j, k} \frac{\eta_k - \eta_j}{E_k - E_j} R_{k, j} r_{k, j}^* \quad (3.89)$$

como el tensor  $\overleftrightarrow{\alpha}$  debe ser de la forma  $\alpha \overleftrightarrow{\mathbb{I}}$ , donde  $\overleftrightarrow{\mathbb{I}}$  es el tensor identidad podemos escribir

$$= -(e^2/\mathcal{C}) \sum_{ij} \frac{\gamma_i - \gamma_j}{E_i^{(0)} - E_j^{(0)}} r_{ij} \cdot R_{ij} \quad (3.70)$$

que es precisamente la expresión (3.70) que queríamos demostrar.

Entonces todas las formulas que hemos obtenido para el modelo del electron independiente pueden utilizarse para el caso de electrones con interaccion con solo sustituir el integrando (3.73) que aparece en (3.59) y (3.60) de  $V'_R$  y  $V''_R$  por (3.74). Esto era de esperarse ya que de acuerdo a la expresión (3.71) el vector  $\mathbf{R}$  es proporcional al vector  $\mathbf{r}$  lo cual implica que las integrales tridimensionales

$$\int \Psi_i \cdot \mathbf{r} \Psi_m \, dv \quad \text{y} \quad \int \Psi_i \cdot \mathbf{R} \Psi_m \, dv$$

tienen la misma forma en la parte angular, solo viéndose afectada la parte radial. Es decir, los elementos de matriz  $\mathbf{r}_{ij}$  y  $\mathbf{R}_{ij}$  solo difirieron en los factores  $V_{R'}$  y  $V_{R''}$ , como hemos demostrado explicitamente.

Los resultados, que se obtienen con las formulas modificadas tambien serán mostradas en el capitulo siguiente.

## CAPITULO IV

## RESULTADOS

Antes de pasar a la descripción de las figuras conviene recalcar que debido a la simetría del problema, lo cual se refleja en la ecuación (3.67), bastará estudiar la densidad de carga para valores de  $\theta \in [0, \pi/2]$ . Obviamente los valores de la misma en  $[\pi/2, \pi]$  serán los mismos que en el intervalo anterior solo que con signo opuesto por tanto, las figuras que describiremos a continuación se referirán únicamente al hemisferio superior de la esfera. Además, debido a la simetría azimutal del problema, no nos preocuparemos por la dependencia del ángulo  $\psi$ . También es necesario aclarar que solo se graficarán los valores del incremento en la densidad de carga electrónica producida por la acción del campo. Para obtener la densidad de carga electrónica total habría que sumar la densidad de carga negativa que existe antes de introducir el campo. Sin embargo, como se explicó en el párrafo anterior a la ecuación (3.52) solo nos ocuparemos de la carga inducida por el campo.

Lo primero que se hizo fue calcular un número suficientemente grande de las primeras raíces de la función Bessel (420 de ellas) lo que equivale a calcular las primeras 420 energías propias de una cavidad esférica (ver ec. 3.19). Después se ordenaron y se almacenaron en una tabla junto con la información del orden de la función de Bessel a la que pertenecen (valores de  $l$ ), el número de raíz que es de la  $j$ , (valor  $n$ ) y su degeneración asociada ( $2(2l+1)$ ). Poste-

riormente se eligió uno de esos niveles como el nivel de Fermi y conociendo la degeneración de todos los niveles anteriores se calculó el número de electrones del sistema.

Finalmente se eligió el material de la esfera y conociendo el número de electrones de valencia por átomo se calculó la masa, el volumen y radio de la partícula esférica. Para construir las figuras 1-6 se eligió como nivel de Fermi el número 135 que comprende a la raíz número  $n=2$  de la función Bessel de orden  $l=23$  que tiene una degeneración  $(2(2l+1))=94$ .

Bajo estas condiciones la partícula resulta tener 5006 electrones y si se supone que la partícula es de cobre se obtiene que el radio es  $a=24.18 \text{ \AA}$ . En las figuras restantes el nivel de Fermi se varió pero el material siguió siendo cobre.

Las figuras 1 y 2 nos muestran la variación de la densidad de carga en función de la distancia medida desde el centro de la esfera a lo largo del eje  $z$ , solo que la figura 2 se ha obtenido por medio del modelo de [G-E] (nuestra fórmula (3.64) y la figura 1 por medio del modelo de [L-S] (la misma fórmula (3.64) pero con la sustitución de (3.74) por (3.73)).

Comparando las figuras 1 y 2 podemos advertir lo siguiente:

a) En ambas notamos una densidad de carga que se anula en el centro de la esfera. Esto se debe a que la expresión para la densidad de carga dada por la Ec. (3.64), es una suma de

productos de la forma

$$J_1(\alpha_{1n}r/a) J_1(\alpha_{1n}r/a) \quad \text{para } r < a$$

por tanto, si  $r=0$  tal suma será igual a cero. Físicamente esto era de esperarse debido a que la acción del campo eléctrico sobre la esfera hace que las cargas positivas se desplacen " hacia arriba " y las negativas " hacia abajo " quedando anulada la densidad de carga en el centro.

También en la superficie de la misma se observa que la densidad es nula. Esto se debe a que la función de onda es cero en la superficie (puesto que ahí el potencial es infinito) y a que

$$\rho = e \Sigma |\Psi|^2$$

y por tanto

$$\rho = 0$$

b) Observamos que la densidad de carga, obtenida en diversos puntos sobre el eje  $z$  desde  $r=0$  hasta  $r=a$ , fluctúa entre valores positivos y negativos en la figura 1 debido a que esta se obtuvo bajo el modelo de [L-S], en donde los electrones interactúan entre sí, entonces al haber un exceso de cargas negativas estas se empezarán a repeler y, eventualmente, se producirá un conglomerado de iones positivos, que también, al haber un excedente empezarán a atraer cargas negativas dando lugar a otro conglomerado de cargas negativas y así sucesivamente.

Estas fluctuaciones contribuyen a que la carga total acumulada en cada hemisferio no aumente desmedidamente de



valor, aunque advertimos un valor moderadamente grande cerca de la superficie de la esfera, justo como la electrodinámica clásica lo predice.

En cuanto a la figura 2 advertimos que la densidad de carga siempre tiene el mismo signo, debido a que esta se obtuvo bajo el modelo del electron independiente, en donde estos no " sienten " la presencia de los otros, produciéndose así una aglomeración de carga de  $10^4$  ordenes de magnitud mas grande que en el caso de [L-S], podemos notar que esta figura es semejante a la figura 2 de la referencia [31], en donde se analiza el mismo problema pero para el caso de un cubo.

Tanto en la figura 1 como en la 2 advertimos que la densidad de carga adquiere fluctuaciones mas o menos uniformes en puntos cercanos al centro de la esfera ( aproximadamente hasta 0.7 del radio), luego el valor de la densidad aumenta hasta obtener un máximo cerca de la superficie de la esfera ( 0.9 del radio). Esto nos habla de una independencia de tal densidad a lo largo del eje z, excepto en puntos cercanos a la superficie de la esfera, que es donde clásicamente esperaríamos obtener una acumulacion de carga mayor.

En las figuras 3 y 4 hemos obtenido la grafica de la densidad de carga sobre un plano perpendicular al eje z, situado a  $3a/4$  del centro de la esfera, bajo los modelos de [L-S] y [G-E], respectivamente. En ambas figuras podemos notar que la densidad de carga es casi independiente del eje

$x$  y del eje  $y$  y excepto para la región cercana a la superficie de la esfera, en donde adquiere un valor ligeramente mas grande, lo cual es también semejante a las figuras 3 y 4 de la referencia [31]. Sin embargo, nuevamente la densidad de carga obtenida bajo el modelo de [G-E] es  $10^3$  veces mas grande que la obtenida bajo el otro modelo.

En las figuras 5 y 6 se han graficado, como función de  $\theta$  los valores de la densidad de carga en un casquete de radio  $a/2$ , concéntrico a la superficie de la esfera. El ángulo  $\theta$  se varia entre 0 y  $\pi/2$ . En ambas figuras se observa que la densidad de carga decrece conforme  $\theta$  aumenta a  $\pi/2$ . Como ya se dijo anteriormente, si se graficaran los valores de la densidad conforme  $\theta$  varia de  $\pi/2$  a  $\pi$  esta volverá a aumentar. Resta observar, que la magnitud de la densidad de carga vuelve a ser del orden de  $10^3$  veces mas grande en la figura 6 que en la 5.

Pasemos ahora a estudiar el comportamiento de la polarizabilidad estática  $\alpha$ . En la figura 7 se muestran los valores de  $\alpha/a^3$  en función de  $Y$  ( $Y = [4e^2mp_+ / 3h^2\pi]a^2$ ), calculados a partir de la expresión 3.65 que, como hemos discutido en el capítulo 3, es válida tanto en el modelo de [G-E] como en el de [L-S], la única diferencia es la de que en el segundo debe utilizarse (3.74) sustituyendo a (3.73). La línea curva representa el cálculo aproximado que obtuvieron [L-S] a partir de su expresión 1 para  $\alpha$  (ver referencia [7]) y la línea recta representa el cálculo aproximado que obtuvieron [G-E] a partir de su expresión 6

para  $\alpha$  (ver referencia [30]). Los círculos representan nuestros cálculos numéricos obtenidos a partir de nuestra ecuación (3.65) que es otra forma de escribir las expresiones 1 y 6 mencionadas. Los círculos negros corresponden al modelo de [L-S] y los otros al modelo de [G-E]. En primer lugar, vemos que los cálculos aproximados que hicieron dichos autores para sus respectivas expresiones concuerdan bastante bien con los cálculos numéricos nuestros.

Como se puede apreciar, bajo el modelo de [G-E] la polarizabilidad es proporcional a  $a^3$  (ya que  $\alpha/a^3$  es proporcional a  $Y = \epsilon a^2$ ), en cambio en el de [L-S] la polarizabilidad presenta un comportamiento más complejo pero siempre menor o igual a  $a^3$ . Para partículas suficientemente grandes se obtiene que  $\alpha = a^3$ , que es el resultado clásico, en cambio para partículas muy pequeñas los dos modelos predicen resultados del mismo orden y la polarizabilidad es mucho menor que  $a^3$  ya que, en este caso, el desplazamiento de carga es menor que el permitido clásicamente e independiente de si las cargas tienen o no repulsión electrostática, debido a que el principio de Pauli impide que ellas se aglomeren en la superficie de la pequeña esfera. En estos casos la esfera conductora no es capaz de apantallar al campo externo que penetrará en su interior y este es un efecto bien conocido para partículas pequeñas [34].

Sin embargo, la principal discrepancia entre los resultados de un modelo y otro radica en que para partículas

suficientemente grandes ( $\gamma \gg 15$ ) hay un factor de agigantamiento para la polarizabilidad obtenido por [G-E] el cual es del orden de  $a^2$  con respecto al valor de [L-S], que es muy semejante al valor clásico de  $a^3$ , y se debe a que [G-E] no tomaron en cuenta la interacción coulombiana entre los electrones de conducción.

Por otro lado, si se integra la Ec. (3.64) sobre la mitad superior del volumen de la esfera se obtendrá la Ec. (3.69) que nos da la carga total  $Q$  inducida en su hemisferio superior. Esta expresión también es válida tanto en el modelo de [G-E] como en el de [L-S], la única diferencia es que en el segundo debe utilizarse (3.74) sustituyendo a (3.73).

Si graficamos, mediante círculos oscuros, la suma que aparece en (3.69) en función de  $a^4$  para el caso de [G-E] y de  $a^2$  para el de [L-S] se obtienen las figuras 8 y 9, respectivamente.

En cada una de estas figuras también se muestra, mediante líneas continuas, el resultado que predice la electrodinámica clásica y que es

$$Q/E_0 = (3/4)a^2$$

En la figura 9 se observa que los círculos se ajustan casi perfectamente al resultado clásico. Esto nos habla de una dependencia proporcional de la carga  $Q$  respecto a  $a^2$  i.e.

$$Q \sim a^2$$

y que está relacionado con el hecho importantísimo de que la polarizabilidad  $\alpha$  sea proporcional a  $a^2$  i.e.

$$\alpha \sim a^3$$

(comparar Ecs. (2.17) y (2.2b)).

Por otro lado, los puntos negros en la figura 8, nos hablan de una proporcionalidad entre la carga  $Q$  con respecto a  $a^4$  i.e.

$$Q \sim a^4$$

y una desproporción respecto a la curva obtenida utilizando el modelo clásico, la cual ha quedado muy por debajo de los valores que tales puntos nos indican. Un hecho importante de que  $Q$  mantenga esta proporcionalidad respecto a  $a^4$  tiene que ver con que la polarizabilidad  $\alpha$  sea proporcional a  $a^3$ , que es justamente el resultado que G-E predicen para la misma.

Finalmente mediante la integral

$$E(r) = \int \frac{\rho(r') (r-r')}{|r-r'|^3} dv \quad (4.1)$$

se puede calcular el campo eléctrico en el punto  $r$  producido por la densidad de carga  $\rho(r')$ . En nuestro caso la expresión general que resulta al sustituir (3.64) en (4.1) resulta ser muy complicada por lo cual solo nos ocuparemos de la componente  $E_x(r)$  del campo. Además, solo calculamos los valores de  $E_x$  en el centro de la esfera, que es donde esperamos tenga el valor máximo (ver figura 5 de la referencia [31]).

La expresión para  $E_x(0)$  es

$$\frac{E_x(0)}{E_0} = \frac{16 a \pi}{3a_0} \left| \sum U_1^{(1)}(1+1) + \sum U_1^{(2)}(1) \right| \quad (4.2)$$

donde  $a_0$  es el radio de Bohr, dado por  $a_0 = \hbar^2/me^2$

$$U_1^{(1)} = V'_R \int_0^1 J_1(\alpha_{10}x) J_{1+1}(\alpha_{1+10}x) dx \quad (4.3)$$

y

$$U_1^{(2)} = V'_R \int_0^1 J_1(\alpha_{10}x) J_{1-1}(\alpha_{1-10}x) dx \quad (4.4)$$

la cual nuevamente es válida para los dos modelos, basta con hacer las sustituciones pertinentes ya indicadas anteriormente.

En la figura 10 se han graficado los valores de  $E_x(0)$  como función de  $a$ . La línea punteada corresponde al modelo de [G-E] y la continua al de [L-S]. Se puede apreciar que en el modelo de [G-E], conforme el tamaño de la partícula aumenta, la desigualdad

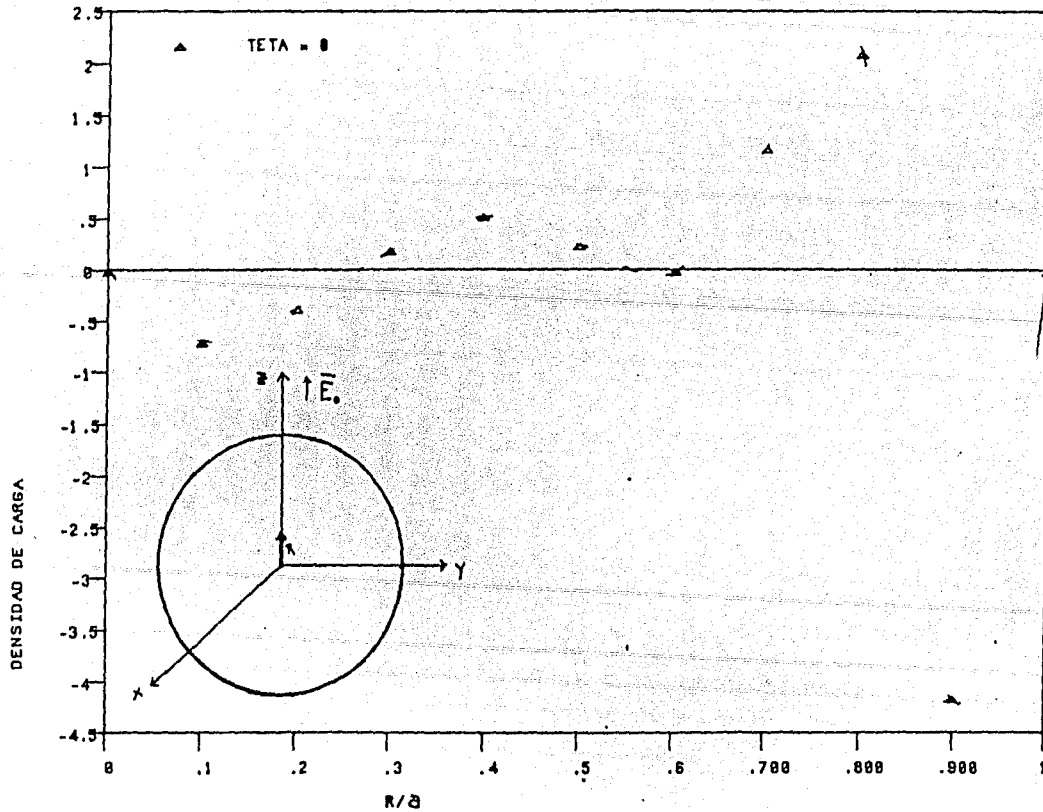
$$|E_x(0)| \gg E_0$$

se hace mas evidente. En cambio en el modelo de [L-S] siempre se tiene que

$$|E_x(0)| < E_0$$

Comparando estos resultados con los de la electrodinámica clásica observamos una discrepancia muy marcada con respecto a los resultados de [G-E], ya que clásicamente se predice un valor del campo inducido igual a  $-E_0$  (recordar Ec. 2.24) para que en el interior del conductor el campo total sea cero. En cambio la comparación con los resultados de [L-S] es muy satisfactoria, sobre todo para partículas suficientemente grandes.

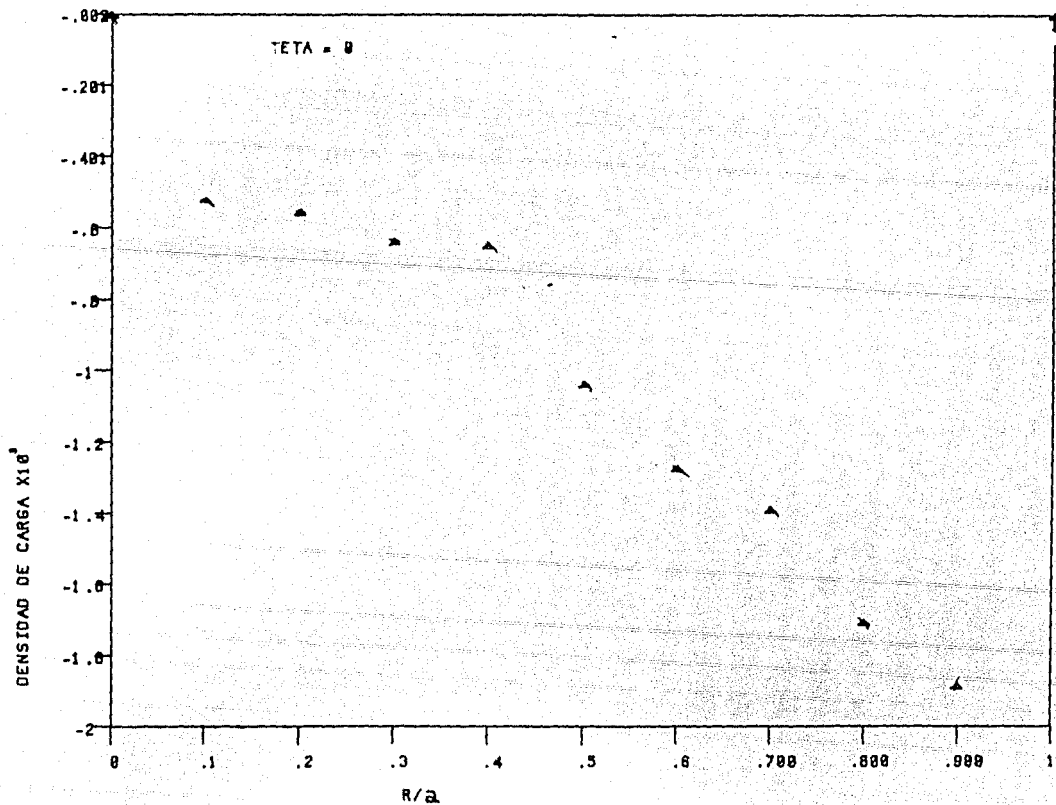
FIGURA #1



DENSIDAD DE CARGA EN EL CASQUETE SUPERIOR DE LA ESFERA A LO LARGO DEL EJE Z PARA  $\theta = 0$  CALCULADA CON LA FORMULA DE L-S

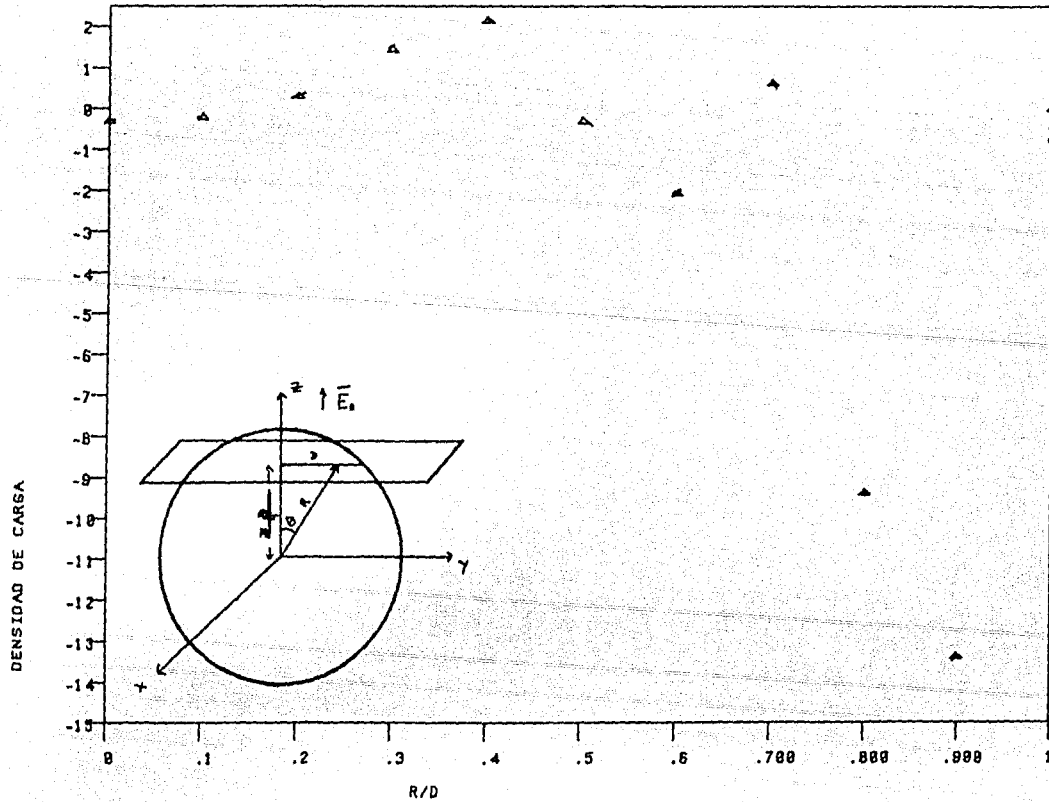


FIGURA #2



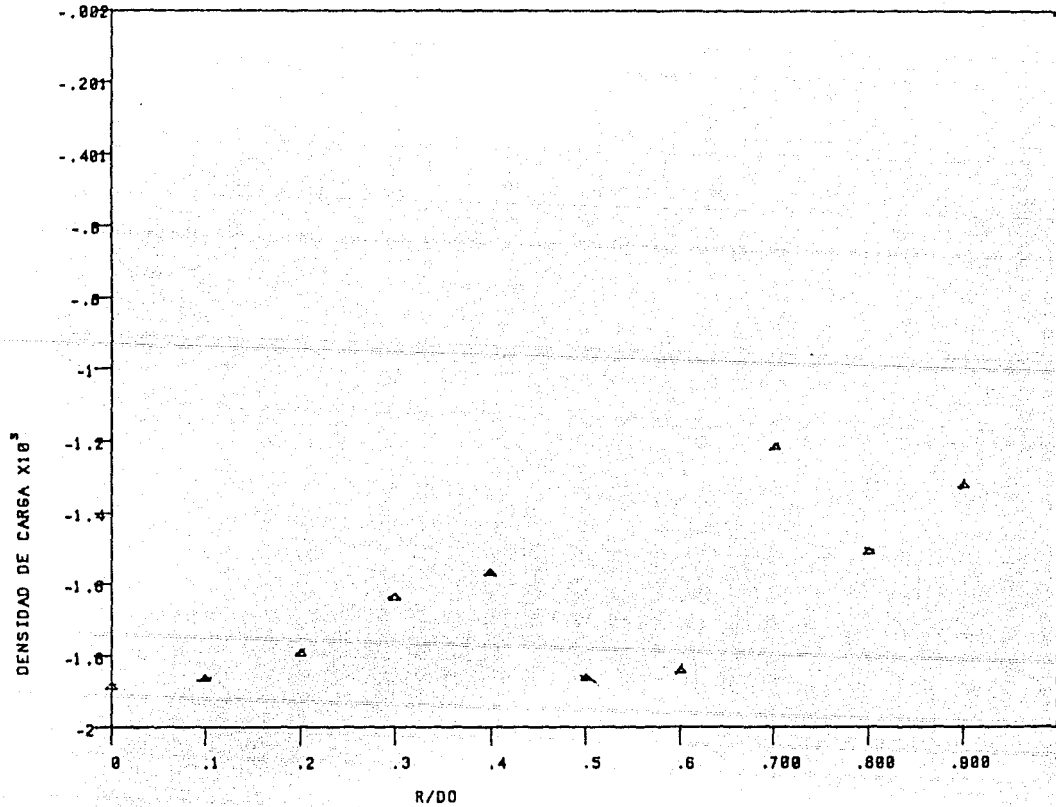
DENSIDAD DE CARGA EN EL CASQUETE SUPERIOR DE LA ESPERA A LO  
 LARGO DEL EJE Z PARA  $\theta = 0$  CALCULADA CON LA FORMULA DE G-E

FIGURA #3



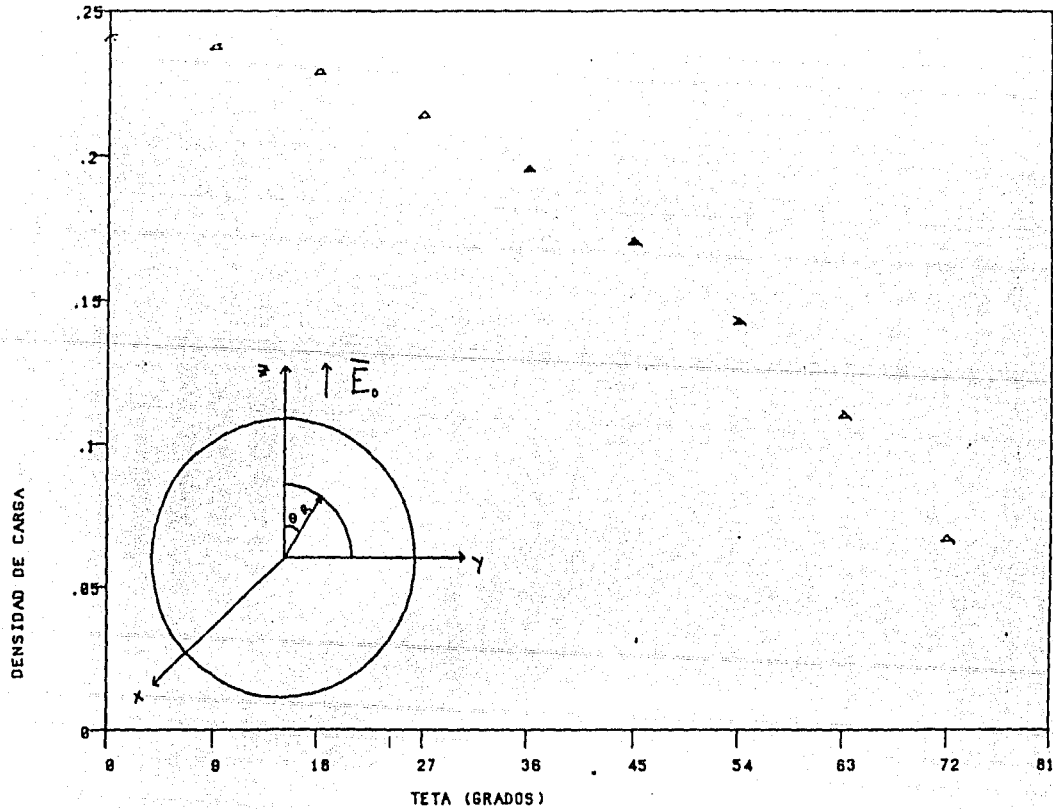
R/D  
 DENSIDAD DE CARGA SOBRE EL PLANO X-Y QUE ATRAVIESA AL EJE Z EN  
 EL PUNTO  $3a/4$  CALCULADA CON LA FORMULA DE L-S

FIGURA #4



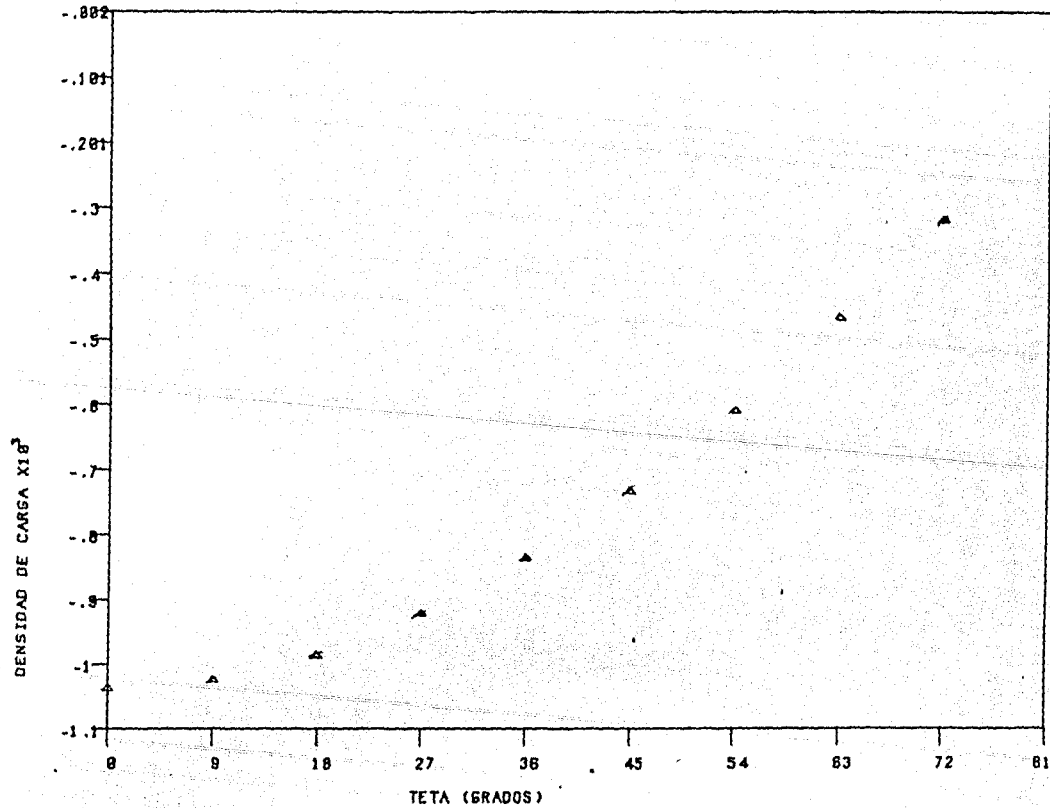
DENSIDAD DE CARGA SOBRE UN PLANO X-Y QUE ATRAVIESA AL EJE Z EN  
 EL PUNTO  $3a/4$  CALCULADA CON LA FORMULA DE G-E

FIGURA #5



DENSIDAD DE CARGA SOBRE UN CASQUETE DE RADIO  $a/2$  VARIANDO  $\theta$  DE  
 0 A  $\pi/2$  CALCULADA CON LA FORMULA DE L-S

FIGURA #6



DENSIDAD DE CARGA SOBRE UN GASQUETE DE RADIO  $a/2$  VARIANDO  $\theta$  DE  
 0 A  $\pi/2$  CALCULADA CON LA FORMULA DE G-E

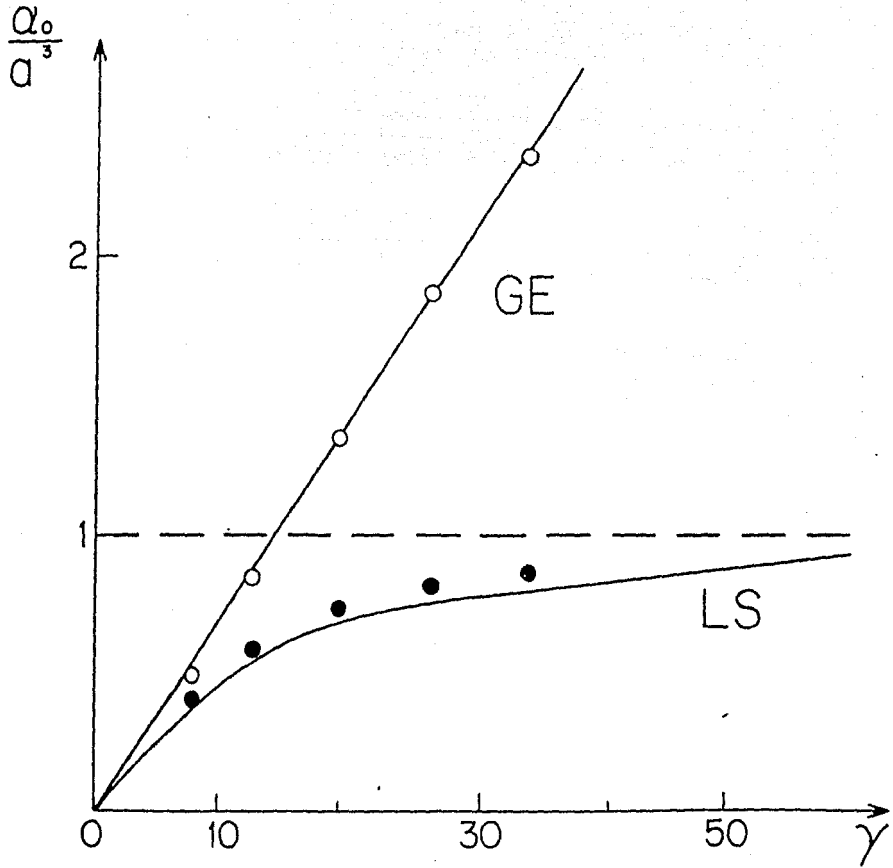
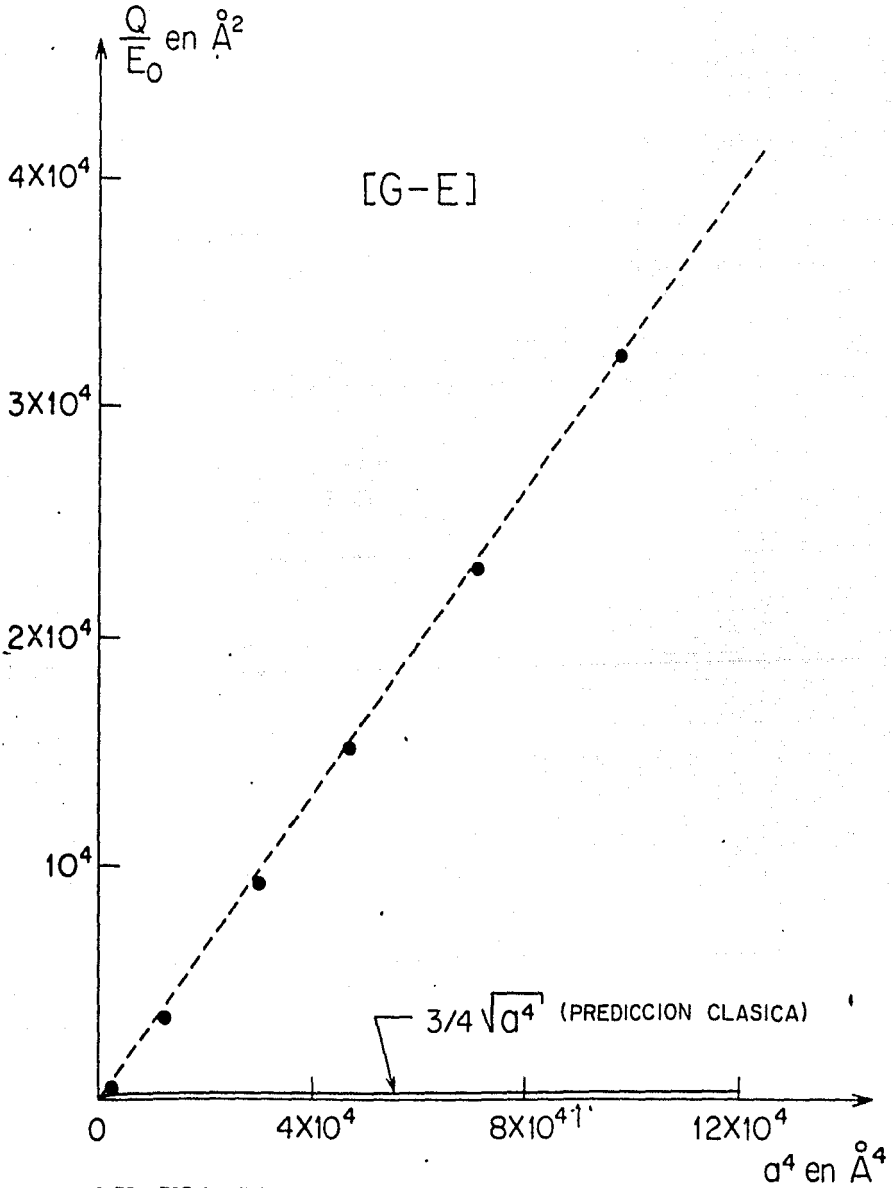


FIGURA 7

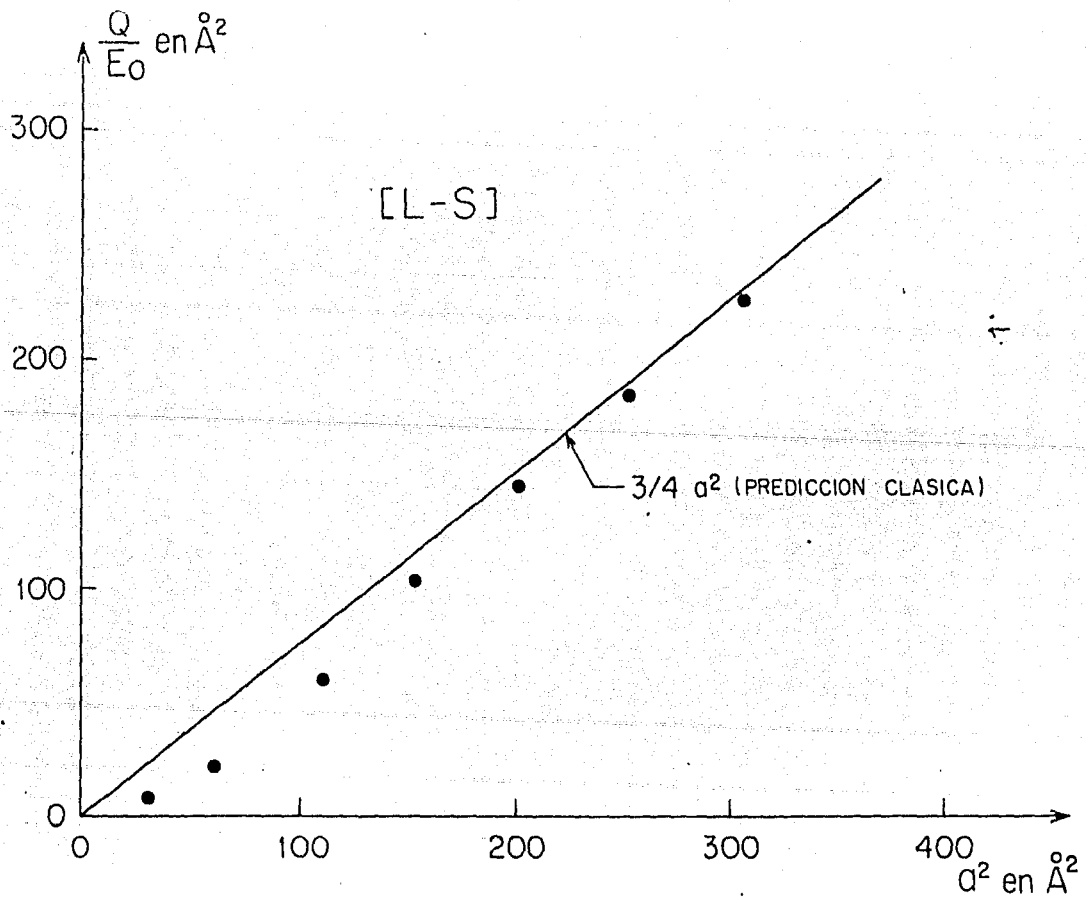
GRAFICA DE LA POLARIZABILIDAD  $\propto \frac{Q_0}{a^3}$  EN FUNCION DE  $a^2$  CALCULADA  
 CON LAS FORMULAS DE G-E y L-S

FIGURA 8



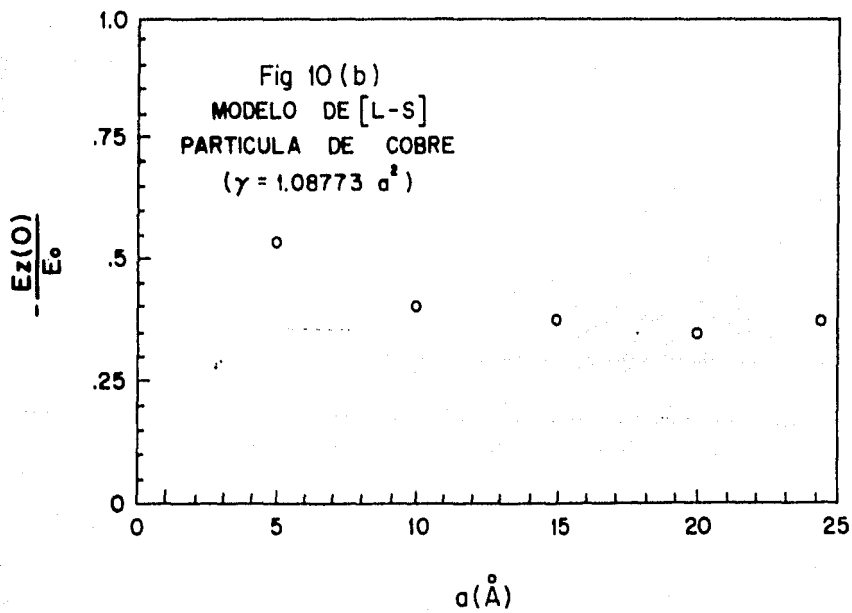
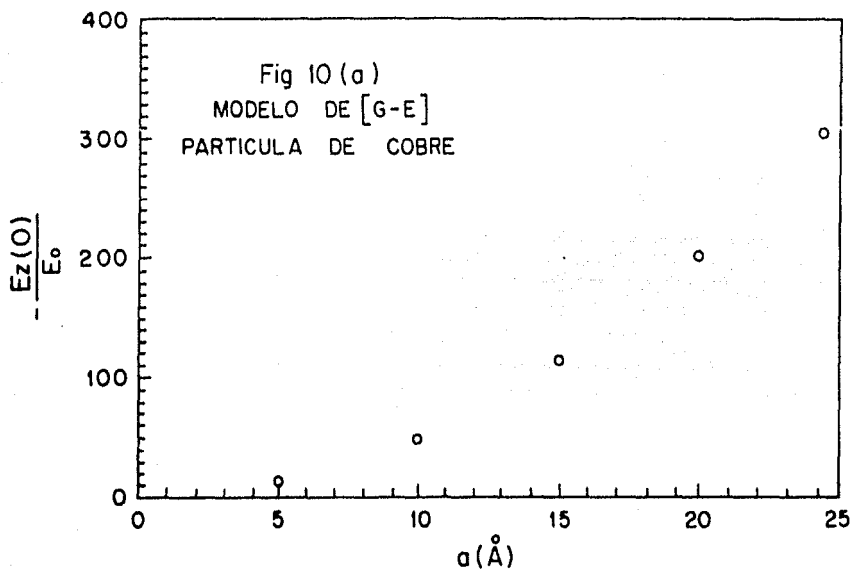
CARGA TOTAL EN EL CASQUETE SUPERIOR DE LA ESPERA EN FUNCION DE  $a^4$   
CALCULADA CON LA FORMULA DE G-E

FIGURA 9



CARGA TOTAL EN EL CASQUETE SUPERIOR DE LA ESFERA EN FUNCION DE  $a^2$   
CALCULADA CON LA FORMULA DE L-S





### CONCLUSIONES

Se han visto, en el desarrollo de este trabajo, dos diferentes tratamientos al problema de la pequeña esfera metálica dentro de un campo electromagnético bajo dos distintos modelos

- a) Modelo del Electron Independiente, trabajado por G-E.
- b) Modelo del Electron con Interaccion, trabajado por L-S.

Dentro de cada uno de estos modelos, los autores mencionados habian obtenido formulas para la polarizabilidad  $\alpha$  relativamente complicadas de evaluar por lo que hicieron aproximaciones subsecuentes para estimar sus valores. En el presente trabajo se realizo un calculo numerico de las ecuaciones exactas obtenidas por ellos, así como de otras expresiones exactas que derivamos aqui para calcular la densidad de carga, la carga total, la polarizabilidad y el campo eléctrico inducido.

Mediante las cifras arrojadas al hacer los calculos numericos se obtuvieron 10 figuras que nos muestran los valores de las magnitudes físicas mencionadas en función de algunos parámetros de la esfera, encontrándose una discrepancia acentuada entre los resultados de ambos modelos. De la observacion y análisis de estas figuras podemos decir

- i) En las figuras 1 y 2 hemos graficado la densidad de carga para un ángulo  $\theta$  igual a cero y sobre el eje z, variando unicamente la distancia del centro de la esfera hasta su superficie, observando un orden de magnitud  $10^3$  veces mas

grande al haber utilizado la fórmula de G-E con respecto a la de L-S. Esto se debe al hecho de que G-E están trabajando con electrones independientes, esto es, electrones que no reaccionan ante la presencia de los otros electrones. Esto no toman en cuenta la repulsión coulombiana y en el momento en que es introducido el campo eléctrico se origina una aglomeración de cargas desmedida, en los polos de la pequeña esfera. En cambio, L-S sí tomaron en cuenta la repulsión coulombiana y como consecuencia se obtiene que la densidad en los polos de la esfera ya no es tan grande ya que, debido a esta repulsión, las cargas del mismo signo no pueden estar muy juntas, produciendo una disminución en la densidad de carga con respecto a la obtenida por G-E. Además pudimos observar que la densidad de carga es independiente del eje  $z$ , excepto para puntos cercanos a la superficie de la esfera en donde, es de esperarse, según la electrodinámica clásica debe adquirir su valor máximo.

ii) De las figuras 3 y 4 concluimos que la densidad de carga es casi independiente del eje  $x$  y del eje  $y$  ya que no se observan grandes fluctuaciones en la densidad de carga excepto cerca de la superficie de la esfera, en donde es de esperarse que la densidad asuma su máximo valor. El hecho de que se haya asegurado que la densidad de carga es independiente tanto del eje  $x$  como del eje  $y$ , habiéndola calculado solamente sobre una recta paralela al plano  $x$ - $y$ , se debe a la simetría azimutal que presenta este problema, i.e. lo que suceda en un punto situado a una cierta

distancia del eje  $z$  sobre un plano perpendicular al mismo va a suceder en otro punto situado a esa misma distancia sobre ese mismo plano, aunque se haya girado cierto ángulo  $\Phi$ .

Sin embargo, independientemente de esto, observamos aquí también que la densidad de carga obtenida con la fórmula de G-E se ve engrandecida en un orden de  $10^3$  con respecto a la obtenida con la de L-S.

iii) En las figuras 5 y 6 observamos que la densidad de carga medida sobre una superficie esférica es máxima en  $\theta=0$  y se va haciendo cada vez menor conforme el ángulo  $\theta$  tiende a  $\pi/2$ , esto parece obvio si tomamos en cuenta que la máxima densidad ocurre justo en la dirección paralela al campo electromagnético ya que las cargas positivas se desplazan en el sentido que lleva tal campo y las cargas negativas en el sentido opuesto, siendo esta densidad nula en un plano perpendicular al eje  $z$  en  $z=0$ . De nueva cuenta observamos que ambas figuras tienen estas mismas características excepto que en la figura 6 la densidad de carga vuelve a ser  $10^3$  veces mayor que la obtenida en la figura 5.

iv) En la figura 7 graficamos la polarizabilidad  $\alpha$  dividida entre  $a^3$  en función de  $Y$  y observamos que en el modelo de G-E

$$\alpha/a^3 \sim a^2 \quad (Y = ka^2)$$

lo cual implica que la polarizabilidad es proporcional a  $a^5$ . Por otro lado, de la curva correspondiente al modelo de [L-S] podemos advertir que para partículas suficientemente grandes

$$\alpha/a^3 \sim 1$$

lo que implica que

$$\alpha \sim a^3$$

como clásicamente es de esperarse. Sin embargo para partículas muy pequeñas el comportamiento es más complejo.

La discrepancia existente ahora entre la polarizabilidad obtenida con la ecuación de G-E respecto a la de L-S es del orden de  $a^2$  y, como hemos indicado, este factor de agigantamiento aparece por el hecho de no tomar en cuenta la interacción coulombiana. Sin embargo, para partículas muy pequeñas la polarizabilidad es casi del mismo orden de magnitud en ambos modelos y resulta ser mucho menor a  $a^3$ .

v) En las figuras 8 y 9 se muestra el comportamiento de la carga total  $Q$  en la mitad superior de la esfera en función de su tamaño utilizando la fórmula de L-S y la de G-E, respectivamente, en la figura 8 se ha graficado  $Q$  en función de  $a^2$  y en la 9 en función de  $a^4$ . Los puntos negros que aparecen en ambas figuras se obtuvieron mediante el cálculo numérico de la fórmula (3.68) y las líneas continuas representan la predicción clásica

$$Q \sim a^2$$

dada por la ecuación (2.26). En la figura 8 podemos apreciar que los puntos se ajustan casi exactamente con la curva clásica, sobre todo para partículas suficientemente grandes, lo cual está relacionado con el hecho de que la polarizabilidad  $\alpha$  crece como

$$\alpha \sim a^3$$

Por otro lado, de la figura 9 observamos que, en el modelo de G-E,  $Q$  crece en proporción directa con respecto a  $a^4$  i.e.

$$Q \sim a^4$$

quedando muy por encima de la curva clásica que se ha graficado mediante la curva continua. De nueva cuenta podemos relacionar esta funcionalidad de  $Q$  respecto de  $a^4$  con el hecho de que la polarizabilidad  $\alpha$  crezca en función de  $a^5$  i.e.

$$\alpha \sim a^5$$

vi) En la figura 10 vemos que, según G-E, conforme el tamaño de la esfera aumenta, se induce un campo eléctrico opuesto a  $E_0$  pero mucho mayor a  $|E_0|$ , sin embargo, los electrones no interactuantes no reaccionan ante este campo, puesto que éste es el producido por los otros electrones. Este fenómeno no es posible que se de con electrones que si interactúan entre sí, ya que a éstos si les afectaría el campo producido por los otros electrones y obligaría necesariamente a un decremento en el dipolo eléctrico. Es por esto que bajo el modelo de L-S, en donde si están interactuando los electrones el campo inducido es igual o menor a  $E_0$  pero en sentido contrario, lo que ocasiona que en el interior de la esfera el campo total sea casi cero.

Al comparar este trabajo con el de la referencia [31], en donde se analizó el mismo problema para el caso de un cubo, vemos que por un lado la utilización de coordenadas esféricas tiene la desventaja de que las expresiones son

mucho mas complicadas que las que resultan de utilizar coordenadas cartesianas pero, por otro lado, tienen la ventaja de que es posible utilizar las formulas de [L-S] que están calculadas en coordenadas esfericas. Si se escribieran sus resultados en coordenadas cartesianas las expresiones resultantes serian sumamente complicadas.

De hecho en la referencia [31] solo se analizó el modelo de [G-E], en cambio aqui, gracias al hecho de haber utilizado coordenadas esfericas, pudimos analizar también el modelo de L-S con relativa facilidad y los resultados obtenidos nos permiten concluir que en general los valores correspondientes al modelo de [G-E] son de varios órdenes de magnitud mas grandes que los obtenidos mediante el de [L-S]. Por otra parte, encontramos que bajo el modelo de [L-S] se obtienen resultados muy semejantes a los que la electrodinámica clásica predice, sobre todo para particulas suficientemente grandes ( $a > 50 \text{ \AA}$ )

Finalmente, como se dijo en un principio, el presente trabajo solo pretende recalcar las diferencias obtenidas utilizando un modelo y otro y compararlas con lo que clásicamente se esperaria obtener, sin pretender, en ningún momento tratar de explicar el por que las PP presentan una absorción anómala cuando son sometidas a un campo eléctrico variable en el tiempo. En nuestro tratamiento nos limitamos siempre a campos estáticos.

## BIBLIOGRAFIA

- 1.- Stein Gilbert 1979 The Physics Teacher 503-12
- 2.- Frohlich H. 1937 Physics 6 406-12
- 3.- Gor'kov L. and Eliashberg G. 1965 Sov. Phys. 21 920-7
- 4.- Dupree R. and Smithard M. 1971 J. Phys. 5 408-14
- 5.- Meier F. and Wyder P. 1972 Phys. Letters 39A 51-2
- 6.- Strassler, Rice and Wyder 1972 Phys. Rev. 6 2575-6
- 7.- Lushnikov A. and Simonov A. 1973 Phys. Letters 44A 45-6
- 8.- Rice, Schneider and Strassler 1973 Phys. Rev. 8 474-82
- 9.- Tanner, Sievers and Buhrman 1975 Phys. Rev. 11 1330-41
- 10.- E. Simanek Phys. Rev. Let. 38, 1161 (1977)
- 11.- A. J. Glick and D. York Phys. Rev. B 18, 2490 (1978)
- 12.- H.J. Trodahl J. Phys. C 15, 7245 (1982)
- 13.- R. Montreal, J. Giraldo, F. Flores and P. Apell Solid State Comm. 54, 661 (1985)
- 14.- P. Apell and A. Ljungbert Physica Scripta 26, 113 (1982)
- 15.- P.N. Sen and D.B. Tanner Phys. Rev. B 26, 3582 (1982)
- 16.- C. G. Granquist Z Physik B 30, 29 (1978)
- 17.- R.P. Devaty and Sievers Phys. Rev. Let. 52, 1344 (1984)
- 18.- Reitz-Milford Fundamentos de la Teoria Electromagnetica p. 54
- 19.- J.D. Jackson Classical Electrodynamics p. 36
- 20.- Ref. 19 p. 63
- 21.- Ref. 19 p. 44
- 22.- Ref. 19 p. 151
- 23.- Eisberg R. and Resnick R. Introducci3n a la Mecanica



Cuántica p. 263

- 24.- Ref. 23 p. 287
- 25.- Arfken G. Métodos Matemáticos para Fisicos p. 600
- 26.- Ref. 25 ecs. (12.83) y (12.147)
- 27.- Ref. 25 ecs. (12.142) y (12.143)
- 28.- Ref. 25 ec. (12.216)
- 29.- Merzbacher E. Quantum Mechanics p. 428 7ª ed.
- 30.- Ref. 29 ec. (17.36)
- 31.- Monsivais and Flores Kinam 6, 199 (1984)
- 32.- Ref. 7 ec. 10
- 33.- Ref. 7 p. 46
- 34.- D.M. Wood y N.W. Ashcroft, Phys. Rev. B 25, 6255 (1982)