



INSTITUTO POLITECNICO NACIONAL
ESCUELA SUPERIOR DE FISICA Y MATEMATICAS

Superintegrabilidad
en Ecuaciones Diferenciales de la Física

T E S I S

Que para obtener el grado de

DOCTOR EN CIENCIAS FISICOMATEMÁTICAS

P R E S E N T A:

M. en C. GuoHua Sun

DIRECTOR: Dr. Eugenio Ley-Koo

MEXICO, D. F.

FEBRERO DE 2012



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL SECRETARIA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

ACTA DE REGISTRO DE TEMA DE TESIS Y DESIGNACIÓN DE DIRECTOR DE TESIS

México, D.F. a 04 de Marzo del 2011

El Colegio de Profesores de Estudios de Posgrado e Investigación de ESFM en su sesión Ordinaria No. 01 celebrada el día 26 del mes de Enero de 2011 conoció la solicitud presentada por el(la) alumno(a):

Sun
Apellido paterno

Apellido materno

Guohua
Nombre (s)

Con registro:

B	0	9	1	2	4	9
---	---	---	---	---	---	---

Aspirante de: **Doctor en Ciencias Fisicomatemáticas**

1.- Se designa al aspirante el tema de tesis titulado:
"Superintegrabilidad en ecuaciones diferenciales de la física"

De manera general el tema abarcará los siguientes aspectos:

Se anexa hoja

2.- Se designa como Director de Tesis al Profesor:
Dr. Eugenio Ley Koo

3.- El trabajo de investigación base para el desarrollo de la tesis será elaborado por el alumno en:
El Departamento de Física

que cuenta con los recursos e infraestructura necesarios.

4.- El interesado deberá asistir a los seminarios desarrollados en el área de adscripción del trabajo desde la fecha en que se suscribe la presente hasta la aceptación de la tesis por la Comisión Revisora correspondiente:

Director(a) de Tesis

Dr. Eugenio Ley Koo

Aspirante

Guohua Sun

Presidente del Colegio



Dr. Miguel Tufino Velázquez

SECRETARIA DE EDUCACION PUBLICA
ESCUELA SUPERIOR DE
FISICA Y MATEMATICAS
I. P. N.
SECCION DE GRADUADOS



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

ACTA DE REVISIÓN DE TESIS

En la Ciudad México, D. F., siendo las 13:30 horas del día 23 del mes de Enero del 2012 se reunieron los miembros de la Comisión Revisora de Tesis, designada por el Colegio de Profesores de Estudios de Posgrado e Investigación de ESFM para examinar la tesis titulada:
"Superintegrabilidad en ecuaciones diferenciales de la física"

Presentada por el alumno:

Sun Guohua
Apellido paterno Apellido materno Nombre(s)
Con registro:

B	0	9	1	2	4	9
---	---	---	---	---	---	---

aspirante de:

Doctor en Ciencias Fisicomatemáticas

Después de intercambiar opiniones, los miembros de la Comisión manifestaron **APROBAR LA DEFENSA DE LA TESIS**, en virtud de que satisface los requisitos señalados por las disposiciones reglamentarias vigentes.

LA COMISIÓN REVISORA

Director(a) de tesis

Dr. Eugenio Ley Koo

Dr. Víctor David Granados García

Dr. Francisco Javier Turrubiates Saldívar

Dr. Arturo Zúñiga Segundo

Dr. Alfonso Quejreiro Fontana

PRESIDENTE DEL COLEGIO DE PROFESORES

Dr. Miguel Tuffino Velázquez

SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO
MEXICO
ESCUELA SUPERIOR DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS
I. P. N.
SECCIÓN DE POSGRADO



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

CARTA CESIÓN DE DERECHOS

En la Ciudad de **México D.F.** el día **26** del mes de **enero del año 2012**, el (la) que suscribe **GuoHua Sun** alumno (a) del Programa de **Doctorado en Ciencias Fisicomatemáticas** con número de registro **B091249**, adscrito a **Escuela Superior de Física y Matemáticas**, manifiesta que es autor (a) intelectual del presente trabajo de Tesis bajo la dirección de **Dr. Eugenio Ley-Koo** y cede los derechos del trabajo intitulado “**Superintegrabilidad en Ecuaciones Diferenciales de la Física**”, al Instituto Politécnico Nacional para su difusión, con fines académicos y de investigación.

Los usuarios de la información no deben reproducir el contenido textual, gráficas o datos del trabajo sin el permiso expreso del autor y/o director del trabajo. Este puede ser obtenido escribiendo a la siguiente dirección sunghdb@yahoo.com y eleykoo@fisica.unam.mx. Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.

M. en C. GuoHua Sun

Nombre y firma

Resumen

La tesis doctoral “Superintegrabilidad en Ecuaciones Diferenciales de la Física” está integrada por las investigaciones reportadas en los artículos publicados [1-5] y otro más enviado [6] a publicar, así como en las contribuciones presentadas en varias reuniones especializadas [7, 8, 9]. Las soluciones para el nuevo potencial anular [1] y para el potencial radial tipo Pöschl- Teller II [2] construidas por el método de Nikirov-Uvarov se presentan en el capítulo 2. La captura de un electrón por una molécula polar, que ha sido estudiada en coordenadas esféricas y esferoidales prolatas, en el tema del capítulo 3, con énfasis en el comentario [3] a la carta de Alhaidari y Bahlouli [10]. El capítulo 4 presenta sucesivamente los operadores de desplazamiento para la partícula en pozos circulares [4] y esféricos [5] como extensiones naturales a los de la caja unidimensional [11]. El trabajo recientemente completado sobre el átomo de hidrógeno confinado en ángulos diedros [6] constituye el capítulo 5, e ilustra el efecto de rompimiento por confinamiento de la simetría de rotación del sistema superintegrable y de las simetrías que sobreviven. El capítulo 6 contiene una discusión general y conclusiones específicas sobre los sistemas investigados.

Abstract

The doctoral thesis “ Superintegrability of Differential Equations of Physics” is integrated by the investigations reported in published [1-5] and submitted [6] articles, and in contributions to specialized meetings [7, 8, 9]. The solutions for a new ring potential [1] and the radial Pöschl-Teller II [2] constructed by the Nikiforov-Uvarov method are presented in Chapter 2. The capture of an electron by a polar molecule, which has been studied in spherical and prolate spheroidal coordinates. Is the subject of Chapter 3, with emphasis on the comment [3] on Alhaidari and Bahlouli’s letter [10]. Chapter 4 presents successively the displacement operators for the particle in circular [4] and spherical [5] wells, as natural extensions to those of a one-dimensional box [11]. The recently completed work on the hydrogen atom confined by a dihedral angle [6] constitutes Chapter 5, illustrating the symmetry breaking effect by confinement on the rotational symmetry breaking effect by the confinement on the rotational symmetry around the z -axis of the superintegrable system, as well as the surviving symmetries. Chapter 6 contains a general discussion and specific conclusions on the investigated systems.

Referencias

- [1] M. C. Zhang, G. H. Sun and S. H. Dong, *Exactly complete solutions of the Schrödinger equation with a spherically harmonic oscillatory ring-shaped potential*, Phys. Lett. A **374** (2010) 704.
- [2] M. G. Miranda, G. H. Sun and S. H. Dong, *The solution of the second Pöschl-Teller like potential by Nikiforov-Uvarov method*, Int. J. Mod. Phys. E **19** (1) (2010) 123.
- [3] G. H. Sun and E. Ley-Koo, *Comment on ‘‘Electron in the Field of a Molecule with an Electric Dipole Moment’’*, Phys. Rev. Lett. **104** (2010) 118901.
- [4] G. H. Sun, S. H. Dong, *New type shift operators for circular well potential in two dimensions*, Phys. Lett. A **374** (2010) 4112.
- [5] G. H. Sun, S. H. Dong, *New type shift operators for the three dimensional infinite well potential*, Mod. Phys. Lett. A **26** (2011) 351.
- [6] G. H. Sun and E. Ley-Koo, *The hydrogen atom confined in semi finite space with dihedral angles boundaries*, enviado.
- [7] G. H. Sun y E. Ley-Koo, *Átomo de hidrógeno confinado en ángulos diedros*, P3, 1er. Taller de Dinámica y Estructura Atómica, Molecular y Óptica, Instituto de Química, UNAM, Mayo 20 y 21, 2010, México, D. F.
- [8] G. H. Sun y E. Ley-Koo, *Distribución de presión y momento dipolar eléctrico en el átomo de hidrógeno confinado en ángulo diedro*, LIII Congreso Nacional de Física, 25-29 de octubre de 2010, Boca del Río, Veracruz, México.
- [9] G. H. Sun y E. Ley-Koo, *The Hydrogen Atom Confined in Dihedral Angles*. International Meeting on Confined Quantum Systems, 7-9 de Septiembre de 2011, UAM-Iztapalapa.
- [10] A. D. Alhaidari and H. Bahlouli, *Electron in the Field of a Molecule with an Electric Dipole Moment*, Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 110401.
- [11] S. H. Dong, Z. Q. Ma, *The hidden symmetry for a quantum system with an infinitely deep square-well potential*, Am. J. Phys. **70** (2002) 520.

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer ampliamente y expresar mi profundo afecto a todas las Personas e Instituciones que contribuyeron a mi formación académica y profesional.

A mi director de Tesis Dr. Eugenio Ley-Koo por su valiosa y comprometida disposición para guiarme en mi formación doctoral y también por su amistad.

A mi consejero Dr. Víctor David Granados García por sus valiosas sugerencias.

A los miembros del jurado Dr. Alfonso Queijeiro Fontana, Dr. Arturo Zuñiga Segundo y Dr. Francisco Javier Turrubiates Saldívar.

A todos los profesores que con su empeño han contribuido a mi realización.

Al personal del posgrado de la E. S. F. M. por su valiosa labor de apoyo.

A mi familia por su gran apoyo en todo momento, por su comprensión y empeño para lograr nuestra superación.

Índice de Figuras

Figura 2. 1: Grafica de la parte angular del potencial Ec. (2.1) con los parámetros $\eta=0.003$, $A=0.2$, $B=0.04$, en función del ángulo θ en intervalo $0<\theta<\pi/2$ región angular de interés físico. Línea punteada en el intervalo $\pi/2<\theta<\pi$ excluido.....	7
Figura 2. 2: Grafica del potencial de la Ec.(2.2) con respecto a la variable r para los parámetros $v_1=20$, $v_2=-19$ y $\alpha=0.9$	8
Figura 3. 1: Parte real de la función radial completa $R(\eta r)/\eta r$ de la Ec. (13) de [8] (línea quebrada) y función de Bessel esférica modificada del tercer tipo y orden γ de [6] (línea continua) versus las variables radiales escalada de energía, para valores de los parámetros ($2E_\theta=16.25, \omega=4$). La flecha indica la posición radial $\eta r=\sqrt{4E_\theta}$ donde la energía total es igual a la energía potencial.	24
Figura 5. 1: a) Eigenvalor de la componente z del momento angular $\mu(\varphi_0/\pi)$, b) Espectro de energía $E_{n_1 n_2 n_\varphi} [e^2/2a_0]$ y las ampliaciones para c) $0.2 < E_v < 0$ y d) $0.1 < E_v < 0$ para $n_1 + n_2 = 0$ (—), $n_1 + n_2 = 1$ (---), $n_1 + n_2 = 2$ (----), $n_1 + n_2 = 3$ (-----).....	61
Figura 5. 2: Presión como función de r y φ_0/π en $\theta=\pi/6$ para los estados 001 en coordenadas esféricas.	65
Figura 5. 3: Presión como función de r y φ_0/π en $\theta=\pi/6$ en sistema de coordenadas esféricas para a) Estado 011, y para b) Estado 101.	66
Figura 5. 4: Presión como función de ξ y φ_0/π en $\eta/\sqrt{a_0}=1.2$ para el estado 011 en el sistema de coordenadas parabólicas para el estado 101, la misma figura es válida intercambiando los papeles de ξ y η	67
Figura 5. 5: Presión como función de u y φ_0/π en el sistema de coordenadas esferoidal prolata en $v=0.5$	68
Figura 5. 6: Magnitud de las componentes transversal $d_\perp(\varphi_0)$ y longitudinal $d_z(\varphi_0)$ en la unidad $[ea_0]$ con las escaleras izquierda y derecha respectivamente, para los estados 001(—), 011(----) y 101(-----) en las coordenadas a) esféricas, b), c) parabólicas y d), e) esferoidales prolatas como función de φ_0/π	74

Índice de Tablas

Tabla 4. 1	Los ceros de las funciones de Bessel $J_m(x)$.	33
Tabla 4. 2	Los ceros de las funciones de Bessel esféricas $j_l(x)$	38
Tabla 5. 1	Razón de constantes de normalización $N_{n_1 n_2 \mu} / N_{00\mu}$ y factores polinomiales para algunos estados excitados	56
Tabla 5. 2	Distribución de presión para estados bajos en tres sistemas de coordenadas	63
Tabla 5. 3	Magnitud de las componentes de momento dipolar eléctrico transversal $d_{\perp}(\varphi_0)$ y longitudinal $d_z(\varphi_0)$ con unidad $[ea_0]$ para los estados 001,011 y 101 en las tres coordenadas como función de φ_0/π	71

Índice General

Capítulo 1

Introducción	1
Referencias	3

Capítulo 2

Potenciales separables y sus soluciones exactas.....	6
2. 1 Introducción.....	6
2. 2 Método de Nikiforov-Uvarov.....	8
2. 3 Aplicaciones.....	11
2. 3. 1 Potencial anular nuevo	11
2. 3. 2 Potencial tipo Pöschl-Teller II.....	15
2. 4 Conclusiones.....	19
Referencias	20

Capítulo 3

Electrón en el campo de una molécula con un momento dipolar eléctrico.....	22
3. 1 Introducción	22
3. 2 Electrón en el campo de una molécula con un momento dipolar eléctrico.....	24
3. 3 Comentario acerca de “Electrón en el campo de una molécula con un momento dipolar eléctrico”	27
3. 4 Conclusiones	29
Referencias	29

Capítulo 4

Operadores de desplazamiento para pozo infinito	31
4. 1 Introducción	31
4. 2 Operadores de desplazamiento para pozo circular.....	32
4. 2. 1 Soluciones exactas.....	32
4. 2. 2 Operadores de desplazamiento.....	34
4. 3 Operadores de desplazamiento para el pozo infinito esférico.....	36
4. 3. 1 Soluciones exactas.....	36
4. 3. 2 Operadores de desplazamiento.....	38

4.4 Conclusiones	45
Referencias	46
Capítulo 5	
Átomo de hidrógeno confinado en ángulo diedro	48
5.1 Introducción	48
5.2 Separación de la ecuación de Schrödinger del átomo de hidrógeno y constantes de movimiento en coordenadas esféricas, parabólicas y esferoidales prolatas	49
5.3 Eigensoluciones exactas para el átomo de hidrógeno confinado por ángulos diedros	52
5.4 Distribuciones de presión y momento dipolar eléctrico para el átomo de hidrógeno	61
5.5 Discusión	74
Capítulo 6	
Conclusiones	78
Publicaciones	79
Apéndice A: Las funciones e integrales usadas	81

Capítulo 1

Introducción

Este capítulo tiene el propósito doble de presentar el concepto general de superintegrabilidad ilustrado con los ejemplos familiares de las ecuaciones de Laplace, de Helmholtz [1], y de Schrödinger para el oscilador armónico [2] y el átomo de hidrógeno en tres dimensiones [3, 4]; y los casos específicos de potenciales que hacen exactamente solubles a las ecuaciones de Schrödinger [5-11] en diferentes situaciones de interés físico y matemático, y que son la base del proyecto de investigación para la tesis doctoral.

El concepto familiar de integrabilidad de las ecuaciones diferenciales parciales de la física conlleva las ideas de separabilidad de las últimas al admitir soluciones factorizables en productos de funciones de cada una de las coordenadas independientes, y de integración de las respectivas ecuaciones diferenciales ordinarias satisfechas por las funciones respectivas y que contienen constantes de separación comunes. El concepto de integrabilidad se extiende al concepto de superintegrabilidad en el caso de las ecuaciones diferenciales parciales que son separables en más de un sistema de coordenadas. Aquí podemos simplemente citar los ejemplos específicos de la ecuación de Laplace y de Helmholtz separables en 17 y 11 sistemas de coordenadas [1], respectivamente, y la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico separable en coordenadas cartesianas, cilíndricas circulares, esféricas, esferoconales, y para el átomo de hidrógeno en coordenadas en esféricas, esferoconales, parabólicas y esferoidales prolatas [3, 4].

La integración de las ecuaciones diferenciales ordinarias en que se separan las ecuaciones diferenciales parciales originales se ha realizado a lo largo de los años usando diferentes métodos alternativos. Entre ellos se encuentran: la transformada de Laplace [12], series de Fourier [13], el método de series de potencias de Fröbenius [14], la transformación de Darboux [15], el formalismo de factorización [16-18], la integral de trayectorias de Feynman [19, 20], el método de mecánica cuántica supersimétrica (SUSYMQ) [21, 22], el método de Nikiforov-Uvarov (N-U) [23], regla de cuantización

exacta [24], y regla de cuantización propia [25]. La motivación y bases matemáticas y/o físicas de estos métodos se pueden reconocer en sus historias respectivas, constituyendo parte de la fisicomatemática.

Es bien conocido que las soluciones explícitas de las ecuaciones diferenciales ordinarias de las referencias [1-4] pertenecen a las llamadas funciones especiales de la física. Algunas propiedades comunes de algunas de ellas son: ortogonalidad y completitud dentro del dominio de sus variables independientes, relaciones de recurrencia según el grado y orden o derivadas, fórmulas de Rodrigues, representaciones integrales de Schläfli, representaciones como funciones hipergeométricas o funciones hipergeométricas confluentes, y funciones generadoras [26].

También reconocemos la existencia de funciones generadoras comunes para las soluciones completas de las ecuaciones diferenciales parciales respectivas en los diversos sistemas de coordenadas en que se separan: El inverso de la separación entre dos puntos o potencial de Coulomb es la función generadora de las funciones armónicas en los 17 sistemas de coordenadas y la onda plana es función generadora de las ondas de los 11 sistemas de coordenadas en que se separan las ecuaciones de Laplace y Helmholtz, respectivamente [27]; las referencias [2] y [4] identifican las funciones generadoras comunes para las funciones de onda completas del oscilador armónico [2] y del átomo de hidrógeno [4].

Cuando la autora decidió iniciar sus estudios de doctorado, consultó con sus posibles asesores sobre los temas de investigación que le podrían ofrecer para su tesis. El profesor Dong sugirió temas relacionados con el método de Nikiforov- Uvarov que probablemente es el menos conocido en la comunidad de físicos. Esto condujo a los problemas que se presentan en el capítulo 2, en que se identificó un nuevo potencial anular angular separable, la Ec. (2.1), y un potencial radial tipo Pöschl-Teller II, la Ec. (2.2), sugeridos por el método N-U mismo, y se construyeron las soluciones de las ecuaciones de Schrödinger respectivas. El profesor Ley-Koo sugirió algunos problemas que él había anticipado en el capítulo 3 de la referencia [28] dedicado a sistemas cuánticos confinados. Uno de ellos está relacionado con la captura de un electrón en el campo eléctrico dipolar de una molécula, y otro con el átomo de hidrógeno confinado por un ángulo diedro, que se reportan en los capítulos 3 y 5 de esta tesis, respectivamente. En su momento, el profesor Dong sugirió el problema de

extender su trabajo previo sobre operadores de ascenso y descenso para la partícula libre confinada en una dimensión cartesiana [29] al caso de la partícula en un pozo circular en dos dimensiones que se presenta en detalle en el capítulo 4, en el mismo también se da a conocer la extensión para la partícula en un pozo esférico. Los diversos problemas quedan apropiadamente enmarcados dentro del esquema de superintegrabilidad de la ecuación de Schrödinger para potenciales diversos de interés en física atómica, molecular y matemática.

Referencias

- [1] C. P. Boyer, E. G. Kalnins and W. Miller Jr., *Symmetry and separation of variables for the Helmholtz and Laplace equations*, Nagoya Math. J. **60** (1976) 35.
- [2] L. Chaos-Cador and E. Ley-Koo, *Common generating functions of complete harmonic oscillator wave functions and transformation brackets in D dimensions*, Int. J. Quant. Chem. **97** (2004) 844.
- [3] E. G. Kalnins, W. Miller Jr. and P. Winternitz, *The group $O(4)$, separation of variables and the hydrogen atom*, SIAM J. Appl. Math **30** (1976) 630.
- [4] E. Ley-Koo and A. Góngora, *Common generating function for three-dimensional hydrogen atom complete wave functions*, Int. J. Quant. Chem. **109** (2009) 790.
- [5] M. C. Zhang, G. H. Sun and S. H. Dong, *Exactly complete solutions of the Schrödinger equation with a spherically harmonic oscillatory ring-shaped potential*, Phys. Lett. A **374** (2010) 704.
- [6] M. G. Miranda, G. H. Sun and S. H. Dong, *The solution of the second Pöschl-Teller like potential by Nikiforov-Uvarov method*, Int. J. Mod. Phys. E **19** (1) (2010) 123.
- [7] G. H. Sun and E. Ley-Koo, *Comment on ‘‘Electron in the Field of a Molecule with an Electric Dipole Moment’’*, Phys. Rev. Lett. **104** (2010) 118901.
- [8] G. H. Sun and S. H. Dong, *New type shift operators for circular well potential in two Dimensions*, Phys. Lett. A **374** (2010) 4112.
- [9] G. H. Sun and S. H. Dong, *New type shift operators for the three dimensional infinite well Potential*. Mod. Phys. Lett. A **26** (2011) 351.

-
- [10] G. H. Sun y E. Ley-Koo, *Átomo de hidrógeno confinado en ángulos diedros*. P3, 1er. Taller de Dinámica y Estructura Atómica, Molecular y Óptica, Instituto de Química, UNAM, Mayo 20 y 21, 2010, México, D. F.
- [11] G. H. Sun y E. Ley-Koo, *Distribución de presión y momento dipolar eléctrico en el átomo de hidrógeno confinado en ángulo diedro*. LIII Congreso Nacional de Física, 25-29 de octubre de 2010, Boca del Río, Veracruz, México.
- [12] P. S. Laplace, *Mémoire sur les suites*, Mem. Acad. Roy. Sci. (Paris) (1779, 1782).
- [13] J. B. J. Fourier, *Théorie analytique de la chaleur*, Paris: Firmin Didot père et fils, 1822.
- [14] F. G. Fröbenius, *Ueber die Integration der linearen Differentialgleichungen durch Reihen*, J. Reine Angew. Math. **76** (1873) 214.
- [15] G. Darboux, *Lecons sur la théorie générale des surfaces et les application géométriques du calcul infinitésimale*, Compt. Rend. Acad. Sc. (Paris) **94** (1882) 1456.
- [16] E. Schrödinger, *Further studies on solving eigenvalue problems by factorization*, Proc. R. Irish Acad. A **46** (9) (1940) 183.
- [17] L. Infeld and T. E. Hull, *The factorization method*, Rev. Mod. Phys. **23** (1951) 21.
- [18] S. H. Dong, *Factorization Method in Quantum Mechanics*, Springer, Netherlands, 2007.
- [19] R. P. Feynman, *A Space-Time Approach to Quantum Mechanics*, Rev. Mod. Phys. **20** (1948) 367.
- [20] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, 1965.
- [21] E. Witten, *Dynamical breaking of supersymmetry*, Nuclear Physics B **188** (1981) 513.
- [22] F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme, *Supersymmetry in Quantum Mechanics*, Phys. Rep. **251** (1995) 267.
- [23] A. F. Nikiforov and V. B. Uvarov, *Special Functions of Mathematical Physics*, Birkhäuser, Basel, 1988.
- [24] Z. Q. Ma and B. W. Xu, *Quantum correction in exact improved quantization rules*, Europhys. Lett. **69** (2005) 685.
- [25] W. C. Qiang and S. H. Dong, *Proper quantization rule*, EPL **89** (2010) 10003.

-
- [26] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York, 1965.
- [27] P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill Science, 1953.
- [28] E. Ley-Koo, *The Hydrogen Atom confined in Semi-Infinite Spaces Limited by Conoidal Boundaries*, *Advances in Quantum Chemistry* **57**, Chap. **3** (2009) 79.
- [29] S. H. Dong and Z. Q. Ma, *The hidden symmetry for a quantum system with an infinitely deep square-well potential*, *Am. J. Phys.* **70** (2002) 520.

Capítulo 2

Potenciales separables y sus soluciones exactas

2.1 Introducción

De los métodos de solución de la ecuación de Schrödinger mencionados en la primera parte de la introducción, el método de Nikiforov-Uvarov (N-U) [1] es uno de los más recientes. En este capítulo se emplea este método para construir las soluciones de dos potenciales específicos que a continuación se describen.

El primer potencial corresponde a un potencial no-central,

$$V(r, \theta) = \frac{1}{2} M \omega^2 r^2 + \frac{\hbar^2}{2M r^2} \left[\frac{\eta + A \cos^2 \theta + B \cos^4 \theta}{\sin^2 \theta \cos^2 \theta} \right], \quad \theta \in \left(0, \frac{\pi}{2} \right), \quad (2.1)$$

donde M denota la masa y ω , la frecuencia de la partícula. Los parámetros η , A y B describen propiedades del potencial y las condiciones de frontera son $\psi(\theta=0)=0$ y $\psi(\theta=\pi/2)=0$. El potencial es la superposición de un oscilador armónico isotrópico y un potencial centrífugo modulado por una función angular en el intervalo $0 < \theta < \pi/2$, que le da la característica de potencial angular. Este potencial se ilustra en la Figura 2. 1.

Los potenciales no-centrales con modulación angular han adquirido un interés creciente en áreas de física molecular [2-5]. Debe de mencionar que al potencial novedoso con dependencia angular de Berkdemir [4] es matemáticamente equivale al investigado en [5]; sin embargo, mientras [4] no define explícitamente el intervalo en que se resuelve la ecuación de Schrödinger, aquí se destaca la importancia del mismo. En caso de que se toma el intervalo completo $0 < \theta < \pi$, el potencial doblemente anular admite soluciones con paridad definida con respecto a reflexiones en el plano ecuatorial $\theta = \pi/2$. Las

soluciones de la ecuación de Schrödinger son diferentes de las reportadas en esta tesis, pero son de interés para investigaciones futuras.

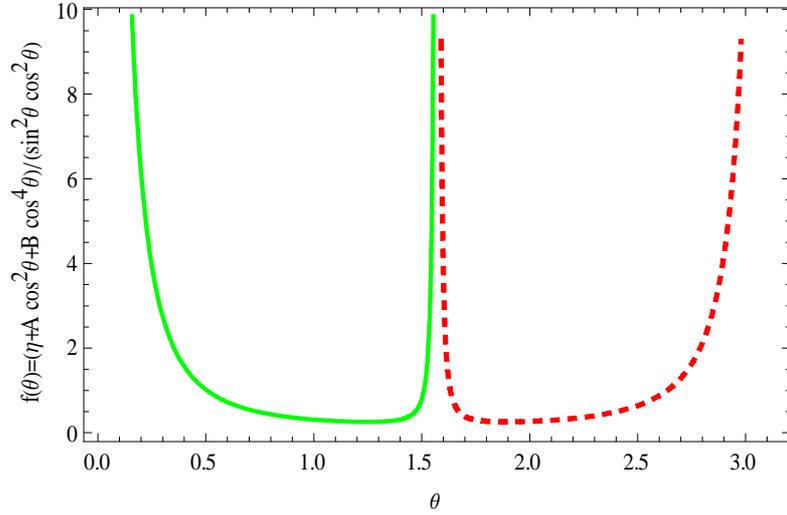


Figura 2. 1: Grafica de la parte angular del potencial Ec. (2.1) con los parámetros $\eta = 0.003$, $A = 0.2$, $B = 0.04$, en función del ángulo θ en intervalo $0 < \theta < \pi/2$ región angular de interés físico. Línea punteada en el intervalo $\pi/2 < \theta < \pi$ excluido.

El segundo potencial es un potencial central de tipo Pöschl-Teller II [6, 7],

$$V(r) = \frac{V_1 + V_2 \cosh(\alpha r)}{\sinh^2(\alpha r)}, \quad (2.2)$$

donde V_1 , V_2 y α son los parámetros con las condiciones $V_1 + V_2 > 0$, $V_2 < 0$. La Figura 2.2 represente este potencial. La estructura de este potencial es ideal para ilustrar la solución de la ecuación de Schrödinger por el método de N-U.

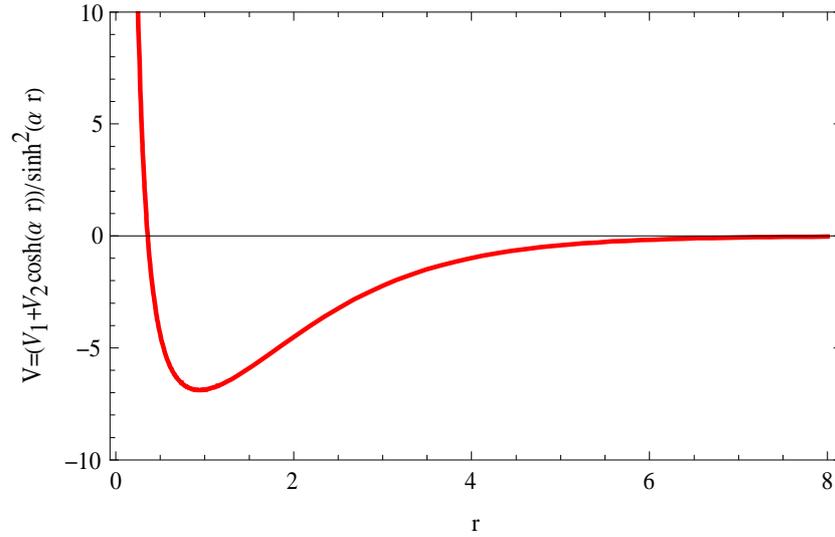


Figura 2. 2: Grafica del potencial de la Ec.(2.2) con respecto a la variable r para los parámetros $V_1 = 20$, $V_2 = -19$ y $\alpha = 0.9$.

Este capítulo se organiza como sigue. En la sección 2. 2 se revisa el método efectivo Nikiforov-Uvarov. En la sección 2. 3 estudiamos el nuevo potencial (2.1) y el potencial tipo Pöschl-Teller II (2.2) usando este método. Finalmente se presentan las conclusiones del capítulo.

2. 2 Método de Nikiforov-Uvarov

El método N-U se basa en las soluciones de ecuación diferencial lineal de segundo orden general con funciones especiales. Para un potencial dado, la ecuación de Schrödinger se puede separar en ecuaciones diferenciales ordinarias, algunas de las cuales se reducen a una ecuación diferencial hipergeométrica a través de un cambio de variable apropiado. Este tipo de ecuación diferencial de segundo orden se puede tratar por el método N-U de manera efectiva.

La ecuación diferencial de tipo hipergeométrico generalizado tiene la siguiente forma:

$$\psi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} \psi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} \psi(s) = 0, \quad (2.3)$$

donde $\tilde{\tau}(s)$ es un polinomio de grado hasta 1 y, $\tilde{\sigma}(s)$ y $\sigma(s)$ son polinomios de grado hasta 2. Las ecuaciones de esta forma se obtienen de resolver las ecuaciones de Laplace y de

Helmholtz en sistemas de coordenadas curvilíneas por el método de separación de variables, y en la discusión de tales problemas fundamentales en mecánica cuántica como el movimiento de una partícula en el campo esféricamente simétrico, oscilador armónico, las soluciones de las ecuaciones de Schrödinger, Dirac y Klein-Gorden para el potencial de Coulomb, y el movimiento de una partícula en campos eléctricos homogéneos y magnéticos. Además la ecuación (2.3) también viene de los problemas típicos en física atómica, molecular y nuclear. Entre las soluciones de las ecuaciones de la forma (2.3) están varias clases de funciones especiales: los polinomios ortogonales clásicos tales como los de Jacobi, Laguerre, y Hermite; Legendre, funciones hipergeométricas y funciones de Bessel.

Usando la factorización $\psi(s) = \varphi(s)y(s)$ para reducir la Ec. (2.3) a una forma más simple, obtenemos un conjunto de ecuaciones

$$y_n''(s) + \left(2 \frac{\varphi'(s)}{\varphi(s)} + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} \right) y_n'(s) + \left(\frac{\varphi''(s)}{\varphi(s)} + \frac{\varphi'(s)}{\varphi(s)} \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} \right) y_n(s) = 0. \quad (2.4)$$

Para prevenir que la Ec. (2.4) sea más complicada que la ecuación original (2.3), es natural requerir que el coeficiente de la derivada $y'(s)$ tenga la forma $\tau(s)/\sigma(s)$, donde $\tau(s)$ es un polinomio de orden hasta 1, así que

$$\frac{\varphi'(s)}{\varphi(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)}, \quad (2.5)$$

donde

$$\pi(s) = \frac{1}{2} [\tau(s) - \tilde{\tau}(s)], \quad (2.6)$$

la cual es un polinomio de orden hasta 1. Según la siguiente identidad

$$\frac{\varphi''(s)}{\varphi(s)} = \left(\frac{\varphi'(s)}{\varphi(s)} \right)' + \left(\frac{\varphi'(s)}{\varphi(s)} \right)^2 = \left(\frac{\pi(s)}{\sigma(s)} \right)' + \left(\frac{\pi(s)}{\sigma(s)} \right)^2 \quad (2.7)$$

la ecuación (2.4) tiene la forma de una ecuación diferencial de tipo hipergeométrico

$$\sigma(s)y_n''(s) + \tau(s)y_n'(s) + \frac{\bar{\sigma}(s)}{\sigma(s)}y_n(s) = 0, \quad (2.8)$$

donde

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s), \quad (2.9)$$

$$\bar{\sigma}(s) = \tilde{\sigma}(s) + \pi^2(s) + \pi(s)[\tilde{\tau}(s) - \sigma'(s)] + \pi'(s)\sigma(s). \quad (2.10)$$

Las funciones $\tau(s)$ y $\bar{\sigma}(s)$ son polinomios de grado hasta 1 y 2, respectivamente. Consecuentemente la Ec. (2.8) es una ecuación de la misma forma que la Ec. (2.3). Así que ya encontramos una clase de transformaciones que no cambia el tipo de ecuación, es decir las transformaciones inducidas por la factorización $\psi(s) = \varphi(s)y(s)$, donde $\varphi(s)$ satisface Ec. (2.5) con un polinomio arbitrario lineal $\pi(s)$.

Ahora, es necesario un $\pi(s)$ apropiado para que la Ec. (2.8) pueda ser lo más simple posible y conveniente para estudiar las propiedades de las soluciones. Debemos seleccionar los coeficientes de $\pi(s)$ para que el polinomio $\bar{\sigma}(s)$ en la Ec. (2.8) pueda ser divisible por $\sigma(s)$, i. e.

$$\bar{\sigma}(s) = \lambda\sigma(s), \quad (2.11)$$

donde λ es una constante. Ésto es posible porque si igualamos los coeficientes de las mismas potencias de la variable s en ambos lados de la Ec. (2.11), obtenemos tres ecuaciones en tres constantes desconocidas, la λ y dos coeficientes de $\pi(s)$. Entonces la Ec. (2.8) se puede reducir a la forma

$$\sigma(s)y_n''(s) + \tau(s)y_n'(s) + \lambda y_n(s) = 0, \quad (2.12)$$

donde las soluciones $y_n(s)$ satisfacen la fórmula de Rodrigues

$$y_n(s) = \frac{B_n}{\rho(s)} \frac{d^n}{ds^n} [\sigma^n(s)\rho(s)] \quad (2.13)$$

con una constante de normalización B_n y una función de peso $\rho(s)$ que cumple la ecuación de Pearson

$$\frac{d}{ds} [\sigma(s)\rho(s)] = \tau(s)\rho(s). \quad (2.14)$$

Las funciones $\pi(s)$ y el parámetro λ se definen como sigue:

$$\pi(s) = \frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}(s)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(s) + k\sigma(s)}, \quad (2.15)$$

$$\lambda = k + \pi'(s). \quad (2.16)$$

A pesar de que $\pi(s)$ tiene que ser un polinomio de grado hasta 1, el subradical tiene que ser el cuadrado de un polinomio. Ésto es posible sólo si su discriminante es cero, lo cual define la constante k . Así la función apropiada está dada por

$$\lambda = \lambda_n = -n\tau'(s) - \frac{1}{2}n(n-1)\sigma''(s), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.17)$$

donde la derivada de $\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s)$ tiene que ser negativa.

2. 3 Aplicaciones

2. 3. 1 Potencial anular nuevo

Se escogen las unidades naturales $\hbar = M = \omega = 1$ por simplicidad de modo que la ecuación de Schrödinger toma la forma:

$$\left\{ -\frac{1}{2r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + V(r, \theta) - E \right\} \psi(r, \theta, \varphi) = 0, \quad (2.18)$$

donde el potencial $V(r, \theta)$ está dado por la Ec. (2.1). Para un potencial esférico, tomamos la eigenfunción como $\psi(r, \theta, \varphi) = r^{-1}u(r)H(\theta)e^{im\varphi}/\sqrt{2\pi}$ ($m \in \mathbb{Z}$) en la Ec. (2.18), obteniendo dos ecuaciones diferenciales de segundo orden para $H(\theta)$ y $u(r)$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) H(\theta) + \left[\Lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} - \frac{\eta + A \cos^2 \theta + B \cos^4 \theta}{\sin^2 \theta \cos^2 \theta} \right] H(\theta) = 0, \quad (2.19)$$

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[2E - r^2 - \frac{\Lambda}{r^2} \right] u(r) = 0, \quad (2.20)$$

donde m^2 y Λ son constantes de separación.

Primero estudiamos la ecuación dependiente de la variable θ . Se define una nueva variable $x = \cos^2 \theta$, la ecuación (2.19) se transforma a

$$\frac{d^2 H(x)}{dx^2} + \frac{1-3x}{2x(1-x)} \frac{dH(x)}{dx} + \left[\frac{-(\Lambda+B)x^2 + (\Lambda-m^2-A)x - \eta}{4x^2(1-x)^2} \right] H(x) = 0. \quad (2.21)$$

Se compara esta ecuación (2.21) con la Ec.(2.3), para identificar los siguientes polinomios:

$$\tilde{\tau}(x) = 1-3x, \quad \sigma(x) = 2x(1-x), \quad \tilde{\sigma}(x) = -(\Lambda+B)x^2 + (\Lambda-m^2-A)x - \eta. \quad (2.22)$$

Sustituyendo éstos en la Ec. (2.15), nos queda

$$\pi(x) = \frac{1-x}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{ax^2 + bx + c}, \quad (2.23)$$

donde los parámetros están dados por

$$a = 1 + 4(\Lambda + B) - 8k, \quad b = 8k - 4(\Lambda - m^2 - A + 1/2), \quad c = 1 + 4\eta. \quad (2.24)$$

La condición de que el discriminante sea cero, es decir, $\Delta = b^2 - 4ac = 0$, permite determinar k , con dos valores $k_{1,2} = (-\tilde{c} \pm \tilde{a}\tilde{b})/2$, donde

$$\tilde{a} = \sqrt{1 + 4\eta}, \quad \tilde{b} = \sqrt{\eta + m^2 + A + B}, \quad \tilde{c} = 2\eta - \Lambda + m^2 + A. \quad (2.25)$$

Con estos, podemos encontrar cuatro posibles soluciones para $\pi(x)$ como sigue:

$$\pi(x) = \frac{1}{2}(1-x) \pm \begin{cases} \frac{1}{2}[(\tilde{a} - 2\tilde{b})x - \tilde{a}], & k_1 = -\frac{1}{2}(\tilde{c} - \tilde{a}\tilde{b}), \\ \frac{1}{2}[(\tilde{a} + 2\tilde{b})x - \tilde{a}], & k_2 = -\frac{1}{2}(\tilde{c} + \tilde{a}\tilde{b}). \end{cases} \quad (2.26)$$

Para que la derivada de $\tau(x) = \tilde{\tau}(x) + 2\pi(x) = 2 + \tilde{a} - (\tilde{a} + 2\tilde{b} + 4)x$ sea negativa, seleccionamos la forma más adecuada de $\pi(x)$ como

$$\pi(x) = \frac{1}{2}(1-x) - \frac{1}{2}[(\tilde{a} + 2\tilde{b})x - \tilde{a}], \quad \text{para } k_2 = -\frac{1}{2}(\tilde{c} + \tilde{a}\tilde{b}). \quad (2.27)$$

Así que con las Ecs. (2.16), (2.17), (2.22) y (2.27), obtenemos valores de los parámetros λ y λ_n

$$\lambda = -\frac{1}{2}(\tilde{c} + 1 + \tilde{a} + \tilde{a}\tilde{b} + 2\tilde{b}), \quad \lambda_n = 2n^2 + 2n + n(\tilde{a} + 2\tilde{b}). \quad (2.28)$$

Haciendo $\lambda = \lambda_n$, podemos obtener la relación entre n y Λ :

$$\Lambda = \left(1 + 2n_r + \sqrt{\eta + m^2 + A + B}\right) \left(1 + 2n_r + \sqrt{\eta + m^2 + A + B} + \sqrt{1 + 4\eta}\right) + (\eta - B), \quad (2.29)$$

donde $n = n_r$, Λ contiene las contribuciones de la parte dependiente de la variable θ del potencial. Obviamente si los parámetros $\eta = A = B = 0$, entonces Λ es igual a $\ell(\ell+1)$, donde $\ell = 1 + 2n_r + m$.

Ahora vamos a construir la función de onda $H(x)$. Al resolver las Ecs. (2.5) y (2.14), usando las Ecs. (2.22) y (2.27), obtenemos

$$\varphi(x) = x^{(1+\tilde{a})/4} (1-x)^{\tilde{b}/2}, \quad \rho(x) = x^{\tilde{a}/2} (1-x)^{\tilde{b}}. \quad (2.30)$$

Sustituyendo $\rho(x)$ en la Ec. (2.13), nos permite obtener el polinomio $y_n(x)$ como sigue:

$$y_n(x) = B_n 2^n x^{-\tilde{a}/2} (1-x)^{-\tilde{b}} \frac{d^n}{dx^n} \left[x^{n+\tilde{a}/2} (1-x)^{n+\tilde{b}} \right]. \quad (2.31)$$

Esta función es muy similar a la definición de polinomios de Jacobi excepto por un factor no importante [7],

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(z) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-z)^{-\alpha} (1+z)^{-\beta} \frac{d^n}{dz^n} \left[(1-z)^{n+\alpha} (1+z)^{n+\beta} \right]. \quad (2.32)$$

Si tomamos $z = 1-2x$, obtenemos $y_n(x) \propto P_n^{(\alpha, \beta)}(1-2x)$ donde $\alpha = \tilde{a}/2$, $\beta = \tilde{b}$, entonces las funciones de onda $H(x)$ se pueden expresar en la siguiente forma

$$H(x) = C_n x^{(1+\tilde{a})/4} (1-x)^{\tilde{b}/2} P_n^{(\tilde{a}/2, \tilde{b})}(1-2x). \quad (2.33)$$

Usando la relación entre la función hipergeométrica y los polinomios de Jacobi [7]

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(z) = \frac{\Gamma(n+1+\alpha)}{n! \Gamma(1+\alpha)} {}_2F_1 \left(-n, n+\alpha+\beta+1; \alpha+1; \frac{1-z}{2} \right), \quad (2.34)$$

la función de onda dependiente de la variable θ se reescribe como:

$$H_n(x) = C'_n x^{(1+\tilde{a})/4} (1-x)^{\tilde{b}/2} {}_2F_1 \left(-n, n+\frac{\tilde{a}}{2}+\tilde{b}+1; \frac{\tilde{a}}{2}+1; x \right). \quad (2.35)$$

donde C'_n es la constante de normalización.

Finalmente, vamos a construir las soluciones de la ecuación radial (2.20), la cual es esencialmente un problema de oscilador armónico en tres dimensiones. Se introduce una nueva variable $s = r^2$, y la ecuación radial se convierte en

$$\frac{d^2 u(s)}{ds^2} + \frac{1}{2s} \frac{du(s)}{ds} + \frac{2Es - s^2 - \Lambda}{(2s)^2} u(s) = 0. \quad (2.36)$$

Comparando ésta con la Ec. (2.3), encontramos

$$\tilde{\tau}(s) = 1, \quad \sigma(s) = 2s, \quad \tilde{\sigma}(s) = 2Es - s^2 - \Lambda. \quad (2.37)$$

Siguiendo el mismo proceso que para encontrar $H(x)$, se obtiene que

$$\pi(s) = \frac{1}{2} \pm \begin{cases} \left(s + \frac{1}{2} \sqrt{1+4\Lambda} \right), & k_1 = E + \frac{1}{2} \sqrt{1+4\Lambda}, \\ \left(s - \frac{1}{2} \sqrt{1+4\Lambda} \right), & k_2 = E - \frac{1}{2} \sqrt{1+4\Lambda}. \end{cases} \quad (2.38)$$

La forma más adecuada de $\pi(s)$ es

$$\pi(s) = \frac{1}{2} - \left(s - \frac{1}{2} \sqrt{1+4\Lambda} \right), \quad \text{para } k_2 = E - \frac{1}{2} \sqrt{1+4\Lambda}. \quad (2.39)$$

Los polinomios $\tau(s)$ y $\tau'(s)$ correspondientes son

$$\tau(s) = 2 - 2s + \sqrt{1+4\Lambda}, \quad \tau'(s) = -2 < 0. \quad (2.40)$$

En base de las ecuaciones (2.16) y (2.17), al resolver $\lambda = \lambda_n$, obtenemos

$$E = 2n_r + 1 + \frac{1}{2} \sqrt{1+4\Lambda}. \quad (2.41)$$

Sustituyendo la Ec. (2.29) en la Ec. (2.41), obtenemos el espectro de energía como

$$E = 2n_r + 1 + \sqrt{\frac{1}{4} + (\eta - B) + \left(1 + 2n_r + \sqrt{\eta + m^2 + A + B}\right) \left(1 + 2n_r + \sqrt{\eta + m^2 + A + B} + \sqrt{1 + 4\eta}\right)}, \quad (2.42)$$

donde n_r es el número cuántico radial. Λ en la Ec. (2.41) es la constante de separación en la ecuación angular y juega el papel de la magnitud del término centrífugo. Sin considerar las contribuciones de los parámetros η , A y B , el potencial (2.1) se reduce al oscilador armónico esférico y la ecuación (2.42) para la energía se convierte en

$$E = 2n_r + \ell + \frac{3}{2}. \quad (2.43)$$

Ahora buscamos las eigenfunciones correspondientes de la ecuación radial. Resolver las Ecs. (2.5), (2.6), (2.13), (2.14) considerando las Ecs. (2.37)-(2.39), podemos encontrar

$$\varphi(s) = e^{-s/2} s^{(1+\sqrt{1+4\Lambda})/4}, \quad \rho(s) = e^{-s} s^{\sqrt{1+4\Lambda}/2}, \quad (2.44)$$

$$y_{n_r}(s) = B_{n_r} 2^{n_r} e^s s^{-\sqrt{1+4\Lambda}/2} \frac{d^{n_r}}{ds^{n_r}} (e^{-s} s^{n_r + \sqrt{1+4\Lambda}/2}). \quad (2.45)$$

Comparando con la fórmula de Rodrigues de los polinomios de Laguerre asociados

$$L_{n_r}^{\mu}(s) = \frac{1}{n_r} e^s s^{-\mu} \frac{d^{n_r}}{ds^{n_r}} (e^{-s} s^{n_r + \mu}), \quad (2.46)$$

entonces $y_{n_r}(s) \propto L_{n_r}^{\mu}(s)$ donde $\mu = \sqrt{1+4\Lambda}/2$. Como $u(s) = \varphi(s)y(s)$, obtenemos

$$u_{n_r}(s) = D_{n_r} e^{-s/2} s^{(1+\sqrt{1+4\Lambda})/4} L_{n_r}^{\mu}(s), \quad (2.47)$$

donde D_{n_r} es una constante de normalización.

2.3.2 Potencial tipo Pöschl-Teller II

En esta sección se construye la solución del potencial tipo Pöschl-Teller II, Ec. (2.2), usando el mismo método N-U. La solución de la ecuación de Schrödinger se restringe al caso de la onda de S ($l=0$),

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{V_1 + V_2 \cosh(\alpha r)}{\sinh^2(\alpha r)} u(r) = E u(r), \quad (2.48)$$

Se definen los siguientes variable y parámetro nuevos

$$z = \tanh^2\left(\frac{\alpha r}{2}\right), \quad (2.49)$$

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{-2E}}{\alpha}. \quad (2.50)$$

Sustituyéndolos en la Ec. (2.48), obtenemos la ecuación diferencial de tipo hipergeométrico

$$\frac{d^2 u(z)}{dz^2} + \frac{3z-1}{2z(z-1)} \frac{du(z)}{dz} + \left\{ \frac{(z-1)[V_1 - V_2 + (V_2 - V_1)z]}{2\alpha^2 z^2 (z-1)^2} - \frac{\varepsilon^2}{z(z-1)^2} \right\} u(z) = 0. \quad (2.51)$$

Comparando esta ecuación con la Ec. (2.3), tenemos las relaciones siguientes

$$\begin{aligned} \sigma(z) &= 2z(1-z), \quad \tau(z) = 1-3z, \\ \tilde{\sigma}(z) &= \frac{2}{\alpha^2} \{(z-1)[V_1 - V_2 + (V_2 - V_1)z]\} - 4z\varepsilon^2. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Sustituyendo las Ecs. (2.52) en la Ec. (2.15), obtenemos

$$\begin{aligned} \pi(z) &= \frac{1}{2}(1-z) \pm \frac{1}{2\alpha} \left\{ z^2 [8(V_1 - V_2) + (1-8k)\alpha^2]^{1/2} \right. \\ &\quad \left. - 2z[8V_1 + (1-4k)\alpha^2 - 8\varepsilon^2\alpha^2] + 8(V_1 + V_2) + \alpha^2 \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Recordando el método N-U, tenemos que hacer que el discriminante sea igual a cero para determinar la constante k :

$$k = -\frac{2}{2\alpha^2} (V_2 + \varepsilon^2\alpha^2 \pm \alpha^2\varepsilon\mu), \quad \mu = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{8(V_1 + V_2) + \alpha^2}. \quad (2.54)$$

Con esto, obtenemos cuatro soluciones posibles para $\pi(z)$

$$\pi(z) = \frac{1}{2}(1-z) \pm \begin{cases} (2\varepsilon - \mu)z + \mu, & \text{para } k = -\frac{2}{\alpha^2} (V_2 + \varepsilon^2\alpha^2 - \varepsilon\alpha^2\mu), \\ (2\varepsilon + \mu)z - \mu, & \text{para } k = -\frac{2}{\alpha^2} (V_2 + \varepsilon^2\alpha^2 + \varepsilon\alpha^2\mu). \end{cases} \quad (2.55)$$

Aquí seleccionamos $\pi(z) = (1-z)/2 - (2\varepsilon + \mu)z - \mu$ con $k = -2(V_2 + \varepsilon^2\alpha^2 + \varepsilon\alpha^2\mu)/\alpha^2$ de donde se obtiene que

$$\tau(z) = \tilde{\tau}(z) + 2\pi(z) = 2 + 2\mu - 2z(2\varepsilon + \mu + 2), \quad (2.56)$$

con la condición de que su derivada sea negativa

$$\frac{d}{dz}\tau(z) = -2[2 + 2\varepsilon + \mu] < 0. \quad (2.57)$$

Ahora usando las Ecs. (2.16) y (2.17) podemos escribir los valores de λ y λ_n como sigue:

$$\lambda = -\frac{1}{2\alpha^2} [4V_2 + \alpha^2(1+2\varepsilon)(1+2\varepsilon+2\mu)], \quad (2.58)$$

$$\lambda_n = 2n[n+2\varepsilon+\mu+1], \quad n=0,1,2,\dots \quad (2.59)$$

Usando el hecho de que $\lambda = \lambda_n$, y resolviendo para ε , nos permite obtener

$$\varepsilon = \frac{1}{2}[-(1+2n) + \nu - \mu], \quad \nu = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{8(V_1 - V_2) + \alpha^2}, \quad (2.60)$$

de los cuales conseguimos los niveles de energía de los estados ligados, Ec. (2.50)

$$E_n = -\frac{\alpha^2}{8} [\nu - \mu - (1+2n)]^2, \quad n=0,1,2,\dots, \left[\frac{1}{2}(\nu - \mu - 1) \right], \quad (2.61)$$

donde $[f]$ indica el entero más grande menor de f . Según las definiciones de los parámetros μ y ν dadas en las ecuaciones (2.54) y (2.60), los estados ligados $E < 0$ solamente existen si $(V_1 + V_2) > 0$ y $V_2 < 0$, las cuales coinciden con los resultados obtenidos en las referencias [8, 9].

Ahora vamos a construir las eigenfunciones. Al resolver las Ecs. (2.5) y (2.14), y usando las Ecs. (2.52) y (2.55), obtenemos

$$\varphi(z) = z^{\frac{1+\mu}{2}} (1-z)^\varepsilon, \quad (2.62)$$

$$\rho(z) = z^\mu (1-z)^{2\varepsilon}. \quad (2.63)$$

De éstas y de la relación (2.13) de Rodrigues

$$y_n(z) = A_n 2^n z^{-\mu} (1-z)^{-2\varepsilon} \frac{d^n}{dz^n} [z^{n+\mu} (1-z)^{n+2\varepsilon}], \quad (2.64)$$

esta función tiene la forma de los polinomios de Jacobi como la Ec. (2.32). Obtenemos $y_n(z) \propto P_n^{(\mu, 2\varepsilon)}(1-2z)$. Las funciones de onda se pueden encontrar sustituyendo $y_n(z)$ y ecuación (2.62) en la relación $u_n(z) = \varphi_n(z)y_n(z)$ como sigue:

$$u_n(z) = N z^{\frac{1+\mu}{4}} (1-z)^\varepsilon P_n^{(\mu, 2\varepsilon)}(1-2z), \quad (2.65)$$

donde N es la constante de normalización.

Según la relación (2.34) entre las funciones hipergeométricas y los polinomios de Jacobi, reescribimos las funciones de onda como sigue:

$$u_n(z) = Cz^\delta (1-z)^\varepsilon {}_2F_1[-n, n+2(\delta+\varepsilon+1/4); 2\delta+1/2; z], \quad (2.66)$$

donde

$$\delta = \frac{1}{4} + \frac{\mu}{2}. \quad (2.67)$$

Ahora vamos a calcular la constante de normalización C . La condición de normalización

$$\int_0^\infty |u_n(z)|^2 dr = \int_0^1 \frac{|u_n(z)|^2}{(1-z)\sqrt{z\alpha}} dz = 1 \quad (2.68)$$

requiere que

$$\frac{C^2}{\alpha} \int_0^1 (1-z)^{2\varepsilon-1} z^{2\delta-1/2} {}_2F_1[-n, n+2(\delta+\varepsilon+1/4); 2\delta+1/2; z]^2 dz = 1. \quad (2.69)$$

Para calcular la integral que aparece en la Ec. (2.69), primero calculamos su valor para los casos especiales $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$,

$$\begin{aligned}
n=0, & \frac{\pi \csc(2\pi\varepsilon)\Gamma(1/2+2\delta)}{\Gamma(1-2\varepsilon)\Gamma(1/2+2\delta+2\varepsilon)}; \\
n=1, & \frac{4(1+2\varepsilon)\Gamma(3/2+2\delta)\Gamma(2\varepsilon)}{(1+4\delta)^2\Gamma(3/2+2\delta+2\varepsilon)}; \\
n=2, & \frac{32(2+2\varepsilon)(1+2\varepsilon)\Gamma(5/2+2\delta)\Gamma(2\varepsilon)}{(3+4\delta)^2(1+4\delta)^2\Gamma(5/2+2\delta+2\varepsilon)}; \\
n=3, & \frac{384(3+2\varepsilon)(2+2\varepsilon)(1+2\varepsilon)\Gamma(7/2+2\delta)\Gamma(2\varepsilon)}{(5+4\delta)^2(3+4\delta)^2(1+4\delta)^2\Gamma(7/2+2\delta+2\varepsilon)}; \\
n=4, & \frac{6144(4+2\varepsilon)(3+2\varepsilon)(2+2\varepsilon)(1+2\varepsilon)\Gamma(9/2+2\delta)\Gamma(2\varepsilon)}{(7+4\delta)^2(5+4\delta)^2(3+4\delta)^2(1+4\delta)^2\Gamma(9/2+2\delta+2\varepsilon)}; \\
n=5, & \frac{12880(5+2\varepsilon)(4+2\varepsilon)(3+2\varepsilon)(2+2\varepsilon)(1+2\varepsilon)\Gamma(11/2+2\delta)\Gamma(2\varepsilon)}{(9+4\delta)^2(7+4\delta)^2(5+4\delta)^2(3+4\delta)^2(1+4\delta)^2\Gamma(11/2+2\delta+2\varepsilon)}; \\
& \dots, \quad \dots
\end{aligned} \tag{2.70}$$

Si reordenamos algunas fórmulas en las ecuaciones anteriores, encontramos un patrón para cualquier n ,

$$\frac{2^{2(2n+1)} n! [(2\delta)_{n+1}]^2 (1+2\varepsilon)_n \Gamma(1/2+n+2\delta)\Gamma(2\varepsilon)}{[(4\delta)_{2n+1}]^2 \Gamma(1/2+n+2\delta+2\varepsilon)} \tag{2.71}$$

o

$$\frac{2^{2(2n-1)} n! [(2\delta)_{n+1}]^2 (1+2\varepsilon)_n \Gamma(1/2+n+2\delta)\Gamma(2\varepsilon)}{[(4\delta)_{2n-1}]^2 \Gamma(1/2+n+2\delta+2\varepsilon)}, \tag{2.72}$$

donde $(x)_n$ denota el símbolo de Pochhammer y se define

$$(x)_n = \frac{\Gamma(x+n)}{\Gamma(x)} = x(x+1)\cdots(x+n-1). \tag{2.73}$$

Simplificando la Ec. (2.71) o (2.72) tenemos

$$\begin{aligned}
& \int_0^1 (1-z)^{2\varepsilon-1} z^{2\delta-1/2} {}_2F_1[-n, n+2(\delta+\varepsilon+1/4); 2\delta+1/2; z]^2 dz \\
& = \frac{n!\Gamma(1/2+2\delta)^2\Gamma(1+n+2\varepsilon)}{2\varepsilon\Gamma(1/2+n+2\delta)\Gamma(1/2+n+2\delta+2\varepsilon)}. \tag{2.74}
\end{aligned}$$

De las Ecs. (2.69) y (2.73), finalmente determinamos la constante de normalización como sigue:

$$\begin{aligned}
C &= \sqrt{\frac{2\alpha\varepsilon\Gamma(1/2+n+2\delta)\Gamma(1/2+n+2\delta+2\varepsilon)}{n!\Gamma(1/2+2\delta)^2\Gamma(1+n+2\varepsilon)}} \\
&= \sqrt{\frac{2\alpha\varepsilon\Gamma(n+\mu+1)\Gamma(n+\mu+2\varepsilon+1)}{n!\Gamma(\mu+1)^2\Gamma(n+2\varepsilon+1)}},
\end{aligned} \tag{2.75}$$

donde se usa la fórmula (2.67).

2.4 Conclusiones

En este capítulo primero se revisa el método N-U. Luego, proponemos un nuevo potencial no central llamado oscilador armónico anillo y obtenemos sus soluciones exactas por el método N-U. Además, estos resultados obtenidos tal vez puedan tener algunas aplicaciones posibles, por ejemplo, a algunos sistemas simétricos axiales en química cuántica. Así mismo presentamos las soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger con un potencial tipo Pöschl-Teller II en el caso de onda de S a través del mismo método. Construimos las soluciones, incluyendo su normalización que previamente no se habían calculado expresándolas en términos de los polinomios de Jacobi o bien por las funciones hipergeométricas. Además se muestra que este método es muy efectivo y sistemático para resolver la ecuación de tipo Schrödinger con todos potenciales solubles conocidos.

Para finalizar este capítulo, queremos dar algunos comentarios acerca del potencial tipo Pöschl-Teller II. Primero, este potencial es diferente con los potenciales tradicionales de Pöschl-Teller incluyendo los tipos Pöschl-Teller I y II, los cuales están dados por [10]

$$V_{\text{PT-I}} = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} \left[\frac{\nu(\nu-1)}{\sin^2 \alpha(r-r_0)} + \frac{\mu(\mu-1)}{\cos^2 \alpha(r-r_0)} \right], \quad \left(0 \leq \alpha(r-r_0) \leq \frac{\pi}{2} \right); \tag{2.76}$$

y

$$V_{\text{PT-II}} = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} \left[\frac{\nu(\nu-1)}{\sinh^2 \alpha(r-r_0)} - \frac{\mu(\mu+1)}{\cosh^2 \alpha(r-r_0)} \right], \quad \alpha(r-r_0) \geq 0, \tag{2.77}$$

donde $\nu > 1$, $\mu > 1$. Cuando $\nu = 0$ o 1 , este potencial (2.77) reduce al potencial de Pöschl-Teller modificado (MPT) [11]

$$V_{\text{MPT}} = -\frac{v_0}{\cosh^2 \alpha x}. \quad (2.77)$$

Segundo, como se ha mencionado en el resumen que para cualquier potencial central se puede resolverlo en coordenadas esféricas y coordenadas esferoconales, entonces podríamos estudiar el potencial tipo Pöschl-Teller II en coordenadas esferoconales en el futuro.

Referencias

- [1] A. F. Nikiforov and V. B. Uvarov, *Special Functions of Mathematical Physics*, Birkhauser, Basel, 1988.
- [2] M. Kibler and T. Negadi, *Motion of a particle in a ring-shaped potential: an approach via a canonical transformation*, Int. J. Quant. Chem. **26** (1984) 405.
- [3] M. Kibler and T. Negadi, *Coulombic and ring-shaped potentials treated in a unified way via a nonbijective canonical transformation*, Theor. Chim. Acta **66** (1984) 31.
- [4] C. Berkdemir, *A novel angle-dependent potential and its exact solution*, J. Math. Chem. **46** (2009) 139.
- [5] M. C. Zhang, G. H. Sun and S. H. Dong, *Exactly complete solutions of the Schrödinger equation with a spherically harmonic oscillatory ring-shaped potential*, Phys. Lett. A **374** (2010) 704.
- [6] M. G. Miranda, G. H. Sun and S. H. Dong, *The solution of the second Pöschl-Teller like potential by Nikiforov-Uvarov method*, Int. J. Mod. Phys. E **19** (1) (2010) 123.
- [7] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Tables of integrals, Series, and Products*, 5th ed., Academic Press, New York, 1994.
- [8] V. G. Bagrov and D. M. Gitman, *Exact Solution of Relativistic Wave Equations*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1990.
- [9] S. H. Dong and A. Gonzalez-Cisneros, *Energy spectra of the hyperbolic and second Pöschl-Teller like potentials solved by new exact quantization rule*, Ann. Phys. **323** (2008) 1136.

-
- [10] G. Pöschl and E. Teller, *Bemerkungen zur Quantenmechanik des Anharmonischen Oszillators*, *Z. Phys.* **83** (1933) 143.
- [11] S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, Berlin, 1971.

Capítulo 3

Electrón en el campo de una molécula con un momento dipolar eléctrico

3.1 Introducción

El problema del momento dipolar eléctrico mínimo para que una molécula polar pueda ligar a un electrón fue investigado independientemente desde 1966 [1-3]. Efectivamente, Levy-Leblond en su artículo sobre “Captura electrónica por moléculas polares” estableció el valor crítico $D = 1.63 \times 10^{-13}$ ues.cm para el momento dipolar capaz de ligar a un electrón, analizando los casos de un momento puntual y un dipolo extendido [1]. En el mismo periodo Mittleman y Myerscough realizaron la publicación de su trabajo “Momento mínimo necesario para ligar una partícula cargada a un dipolo extendido” [2] y Turner y Fox de “Momento dipolar mínimo para ligar un electrón a un dipolo finito” [3]. Posteriormente Turner se dió cuenta de que el problema había sido considerado también por Fermi y Teller en su trabajo “La captura de mesotrones negativos en materia” [4] y escribió la historia correspondiente en 1977 [5]. Más recientemente Coon y Holstein en su artículo “Anomalías en mecánica cuántica: el potencial $1/r^2$ ” analizaron la solución de la ecuación radial del problema bajo discusión [6], y Essin y Griffiths en su artículo “Mecánica cuántica del potencial $1/x^2$ ” señalaron las paradojas que causa este problema y las herramientas de regularización, renormalización, rompimiento de simetría anómalo, y extensión autoadjunta necesarias para resolverlas [7]. Alhaidari y Bahlouli en su Carta “Electrón en el campo de una molécula con un momento dipolar eléctrico” mostraron la separabilidad de la ecuación de Schrödinger para el potencial de interacción de un electrón en el campo eléctrico de un dipolo eléctrico puntual de la molécula [8]. La solución de la

parte angular coincide con las usadas en [1, 6], que asume desarrollos en armónicos esféricos e involucra relaciones de recurrencia de tres términos debido a las reglas de selección $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = 0$, y $\Delta \pi = (-)$ asociados al operador angular $\cos \theta$. Para la parte radial de la eigenfunción propusieron un desarrollo en una base $\varphi_k(y) = b_k y^r e^{-y/2} L_k^\sigma(y)$, donde $y = \lambda r$ y $L_k^\sigma(y)$ son polinomios de Laguerre, $k = 0, 1, 2, \dots$, y b_k es la constante de normalización, y $\lambda^2 = -8E$ es el parámetro de energía. Adicionalmente, afirman que el desarrollo involucra relaciones de recurrencia de tres términos. Aquí citamos textualmente su resumen: “In solving the eigenvalue wave equation, we relax the usual diagonal constraint on its matrix representation by allowing it to be tridiagonal. This results in a larger representation space that incorporates an analytic solution for the non-central electric dipole pole potential, which was believed not to belong to the class of exactly solvable potentials. Consequently, we obtain closed form solution of the time-independent Schrödinger equation for an electron in the field of a molecule treated as a point electric dipole.” y en la sección 3. 2 presentamos algunos detalles.

El comentario al trabajo anterior [9] se presenta en detalle en la sección 3. 3, reconociendo que no hay base física ni matemática para la afirmación de que en la ecuación radial es válida una relación de recurrencia de tres términos, y de que la solución radial exacta del problema ha sido conocida [6] en una de sus propias referencias. El Comentario muestra que las Ecs.(11) y (13) de [8], no son soluciones de su Ec. (3.c), lo cual se ilustra gráficamente en la Fig. 3. 1 y se señala desde aquí al reconocer que la supuesta solución de la Ec.(13) es compleja, y en la figura su parte real muestra oscilaciones en la región clásicamente prohibida; también se incluye la gráfica de la solución exacta [6]. Finalmente concluimos este capítulo brevemente en la sección 3. 4.

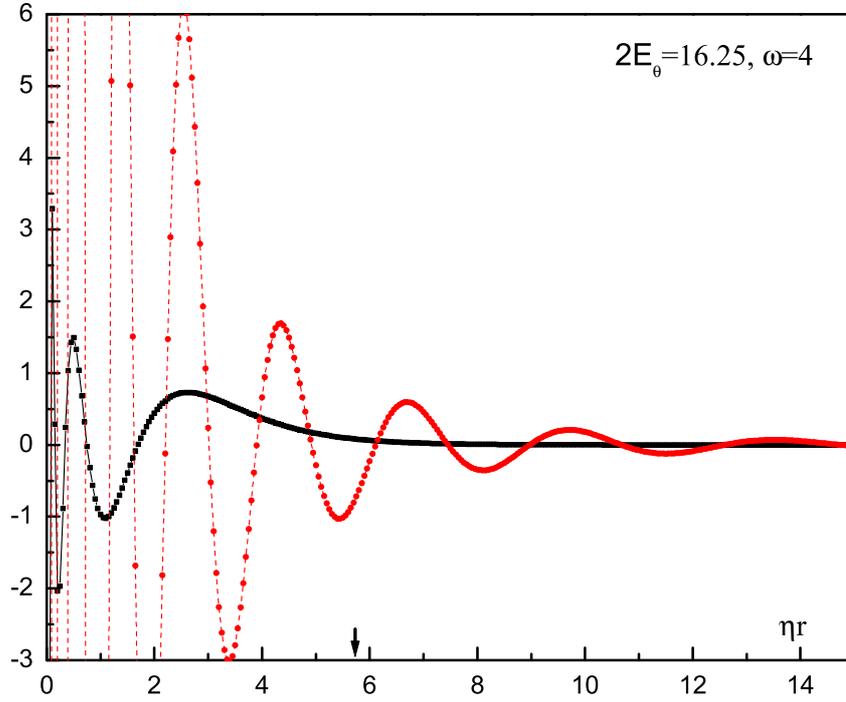


Figura 3. 1: Parte real de la función radial completa $R(\eta r)/\eta r$ de la Ec. (13) de [8] (línea quebrada) y función de Bessel esférica modificada del tercer tipo y orden γ de [6] (línea continua) versus las variables radiales escalada de energía, para valores de los parámetros ($2E_0 = 16.25, \omega = 4$). La flecha indica la posición radial $\eta r = \sqrt{4E_0}$ donde la energía total es igual a la energía potencial.

3. 2 Electrón en el campo de una molécula con un momento dipolar eléctrico

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en tres dimensiones para una partícula de masa m y la carga q en un potencial electrostático está dada por

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - qV(\vec{r}) - E \right] \psi(\vec{r}) = 0, \quad (3.1)$$

donde la energía E es discreta o continua. En coordenadas esféricas, según la Ec. (3.1), la función de onda es separable para el potencial de la forma:

$$V(\vec{r}) = V_r(r) + \frac{1}{r^2} \left[V_\theta(x) + \frac{1}{1-x^2} V_\varphi(\varphi) \right], \quad (3.2)$$

donde $x = \cos \theta$. Si escribimos la función de onda como $\psi(r, \theta, \varphi) = r^{-1} R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$, tomando las unidades atómicas $\hbar = m = q = 1$, entonces substituyendo esta forma de la eigenfunción en la Ec.(3.1) nos permite obtener las siguientes ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\left(\frac{d^2}{d\varphi^2} - 2V_\varphi - 2E_\varphi \right) \Phi(\varphi) = 0, \quad (3.3a)$$

$$\left[(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} - \frac{2E_\theta}{1-x^2} - 2V_\theta + 2E_\theta \right] \Theta(\theta) = 0, \quad (3.3b)$$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2E_\theta}{r^2} - 2V_r + 2E \right) R(r) = 0, \quad (3.3c)$$

donde las constantes E_φ y E_θ de separación son reales y adimensionales. La función de onda está sujeta a la normalización

$$\int |\psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = \int_0^\infty |R(r)|^2 dr \int_0^\pi |\Theta(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} |\Phi(\varphi)|^2 d\varphi = 1. \quad (3.4)$$

En el caso de un electrón que interactúa con una molécula neutra con un momento dipolar eléctrico puntual p en el origen apuntando a lo largo del eje z positivo, se tiene $V_\varphi = 0$, $V_\theta = -p \cos \theta$ y $V_r = 0$, donde la longitud se mide en unidades de $a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / mq^2$. Las Ecs. (3.3) toman la siguiente forma

$$\left(\frac{d^2}{d\varphi^2} + m^2 \right) \Phi(\varphi) = 0, \quad (3.5a)$$

$$\left[(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} - \frac{m^2}{1-x^2} + 2px - 2E_\theta \right] \Theta(\theta) = 0, \quad (3.5b)$$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2E_\theta}{r^2} + 2E \right) R(r) = 0, \quad (3.5c)$$

donde $2E_\varphi = m^2$. La ecuación en φ tiene eigenfunciones de la componente z del momento angular con eigenvalores $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. La ecuación en θ fue resuelta en [1, 6] con las

reglas de selección mencionadas en Sec. 3 debido a la presencia del término en $\cos \theta$. Sus eigenvalores se pueden parametrizar en la forma

$$-2E_\theta = \gamma(\gamma+1), \quad (3.6)$$

reminiscente del eigenvalor del cuadrado del momento angular en el caso $p=0$, para el cual γ es entera $l=0,1,2,\dots$. Los valores de γ dependen de los eigenvalores E_θ , según las soluciones

$$\gamma = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - 2E_\theta}. \quad (3.7)$$

La ecuación radial se convierte en la ecuación de Schrödinger con un potencial inverso del cuadrado cuyas soluciones también se han discutido en [6, 7]. Los valores de E_θ y de γ son cruciales para el problema de la ligadura del electrón por el dipolo puntual. En efecto, si E_θ es menor que $1/8$, γ es real, el potencial en Ec. (3.5a) es repulsivo y el eigenvalor de la energía no puede ser negativo, o sea no hay ligadura. Por otra parte si E_θ es mayor que $1/8$, γ es compleja y podemos reescribir

$$r = -\frac{1}{2} \pm i\sqrt{2E_\theta - \frac{1}{4}} = -\frac{1}{2} \pm i\omega \quad (3.8)$$

y existe la posibilidad de ligadura.

La propuesta de solución radial para estados ligados de Alhaidari y Bahlouli es el desarrollo

$$R(r) = \sum_k c_k \varphi_k(y) \quad (3.9)$$

usando la base de la Ec. (3.1). Se toma como un elemento en el espacio cubierto por las funciones de base $\varphi_k(y) = b_k y^\tau e^{-y/2} L_k^\sigma(y)$, donde $k=0,1,2,\dots$, $y = \lambda r$ y $L_k^\sigma(y)$ son los polinomios de Laguerre. El parámetro de escala de longitud λ es positivo, $\tau > 0$, $\sigma > -1$ y la constante de normalización es $b_k = \sqrt{\lambda \Gamma(k+1) / \Gamma(k+\sigma+1)}$. Se propuso que la representación matricial del operador de onda $\langle \varphi_k | H_r - E | \varphi_{k'} \rangle$ es tridiagonal **sí y solo sí** $\sigma = 2\tau - 2$ y $\lambda^2 = -8E$. La ecuación de onda radial se convierte equivalente a la siguiente relación de recurrencia de tres términos para los coeficientes de expansión

$$\omega^2 S_k = \left[(k+\sigma+1) \left(k + \frac{\sigma}{2} + 1 \right) + k \left(k + \frac{\sigma}{2} \right) - \left(\frac{\sigma+1}{2} \right)^2 \right] S_k - k \left(k + \frac{\sigma}{2} \right) S_{k-1} - (k+\sigma+1) \left(k + \frac{\sigma}{2} + 1 \right) S_{k+1}, \quad (3.10)$$

donde $g_k^\omega(E) = b_k S_k(\omega, E)$.

Debido a que la Ec. (3.10), la cual corresponde a la Ec. (12) en [8] es un caso especial de la relación de recurrencia de tres términos de los polinomios ortogonales dual continuo de Hahn, se tiene que $Q_k^\mu(\omega, \mu, 1/2) = {}_3F_2 \left(\begin{smallmatrix} -k, \mu+i\omega, \mu-i\omega \\ 2\mu, \mu+1/2 \end{smallmatrix} \middle| 1 \right)$, donde $\mu = (\sigma+1)/2$ [8]. Por lo tanto finalmente se escribe la función radial para el estado ligado con la energía E como

$$R(E, r) = B_\omega^E e^{-\eta r} (2\eta r)^{(\sigma/2)+1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k+1)}{\Gamma(k+\sigma+1)} \times Q_k^{(\sigma+1)/2} \left(\omega, \frac{\sigma+1}{2}, \frac{1}{2} \right) L_k^\sigma(2\eta r), \quad (3.11)$$

donde el número de onda η dependiendo de energía se define por $2E = -\eta^2$.

3.3 Comentario acerca de “Electrón en el campo de una molécula con un momento dipolar eléctrico”

Esta sección se inicia reescribiendo la Ec. (3.4c) como

$$\left(\frac{d^2}{d(\eta r)^2} + \frac{2}{\eta r} \frac{d}{d(\eta r)} + \frac{\gamma(\gamma+1)}{(\eta r)^2} - 1 \right) R(r) = 0 \quad (3.12)$$

donde $2E = -\eta^2$, $2E_\theta = -\gamma(\gamma+1)$.

Por otro lado, para asegurar buen comportamiento al origen y al infinito, proponemos $R(r) = (\eta r)^\gamma e^{-\eta r} g(\eta r)$ y sustituyendo en la Ec. (3.12) nos da

$$g''(\eta r) + [(2\gamma+2) - 2(\eta r)] g'(\eta r) - \frac{2\gamma+2}{\eta r} g(\eta r) = 0. \quad (3.13)$$

Resolviendo esta ecuación (3.13), obtenemos

$$R(r) = e^{-\eta r} (\eta r)^\gamma U(\gamma+1, 2\gamma+2, 2\eta r), \quad (3.14)$$

donde $U(a, b, x)$ es la función hipergeométrica confluyente de segundo tipo.

En comparación, la solución radial (3.11), que es la Ec. (13) de [8], contiene tres factores: (1) la potencia γ de la coordenada radial, (2) la exponencial decreciente, y (3) una función, la cual representamos con $g(\eta r)$, elegida como una serie de polinomios de

Laguerre en [8]. Las soluciones radiales en [6] son simplemente las funciones de Bessel esféricas modificadas del tercer tipo y de orden complejo γ , $\sqrt{\pi/2\eta r}K_{i\omega}(\eta r)$. Ellas comparten el factor (1) contribuyendo al comportamiento oscilante con el aumento del número de onda y de las amplitudes cuando $\eta\gamma$ se aproxima a cero, y la exponencial del factor (2) dominando el comportamiento asintótico, cuando $\eta\gamma$ tiende a infinito.

La pregunta ahora es conocer cuál es la forma más simple del tercer factor $g(\eta r)$. Se encuentra fácilmente en 13.6.24 en [10] su identificación como la función hipergeométrica confluyente del segundo tipo $U(\gamma+1, 2\gamma+2, 2\eta\gamma)$, la cual tiende a cero asintóticamente como $(2\eta r)^{-\gamma-1}$ y está relacionada con la función de Bessel de orden imaginario $K_{i\omega}(\eta r)$. Consecuentemente, la función radial completa con $U(\gamma+1, 2\gamma+2, 2\eta\gamma)$ como el tercer factor muestra el comportamiento asintótico de la onda esférica-evanescente $e^{-\eta r}/\eta r$.

Finalmente volvemos a ver las soluciones radiales completas de la Ec. (13) en [8] para los estados ligados. En la Figura 3. 1 se nota que ellas son funciones complejas y su gráfica (línea quebrada) muestra oscilaciones en la región prohibida clásicamente donde se usa la flecha para indicar la falta de fiabilidad en la física de su tercer factor. También podemos identificar el origen de su comportamiento no físico al recortar la razón detrás de las relaciones de recurrencia de tres términos para la parte angular de las eigenfunciones, y la falta de tal razón en la parte radial. De hecho, el carácter dipolar de la interacción $\cos\theta$ lleva a la regla de selección $l' = l \pm 1$, la cual junto con los términos diagonales del cuadrado del momento dipolar forma las matrices diagonales. Para el potencial inverso del cuadrado en la ecuación radial (3c) en Ref. [8], no existe una regla de selección similar, y las matrices resultan ser completas en lugar de tridiagonales. La elección de las ecuaciones (9) y (12) en [8], se traduce en **(A)** la condición restrictiva de tridiagonalidad, conduce a las funciones de las Ecs. (11) y (13), las cuales **(B)** no son soluciones exactas de la Ec. (3c).

3. 4 Conclusiones

En este capítulo reestudiamos los resultados presentados en un artículo reciente [8] donde se postulan (1) representaciones de matriz tridiagonal con las ecuaciones (9) y (12), para la ecuación radial (3c), y (2) introdujeron las soluciones radiales de las ecuaciones (11) y (13) [vea Ec. (3.11)] para los estados de dispersión y los estados ligados, sin tener en cuenta que las soluciones de la ecuación radial para el potencial $1/r^2$ se han conocido en el literatura [6], la cual también fue citada en [8]. En este comentario [9] sobre [8] hemos identificado y analizado las fallas matemáticas en (A) y (B).

Referencias

- [1] J. Marc Levy-Leblond, *Electron Capture by Polar Molecules*, Phys. Rev. **153** (1967) 1.
- [2] M. H. Mittleman and V. P. Myerscough, *Minimum moment required to bind a charged particle to an extended dipole*, Phys. Lett. **23(9)** (1966) 545.
- [3] J. E. Turner and K. Fox, *Minimum dipole moment required to bind an electron to a finite dipole*, Phys. Lett. **23 (9)** (1966) 547.
- [4] E. Fermi and E. Teller, *The Capture of Negative Mesotrons in Matter*, Phys. Rev. **72** (1947) 399.
- [5] J. E. Turner, *Minimum dipole moment required to bind an electron—molecular theorists rediscover phenomenon mentioned in Fermi-Teller paper twenty years earlier*, Am. J. Phys. **45** (1977) 758.
- [6] S. A. Coon and B. R. Holstein, *Anomalies in quantum mechanics: The $1/r^2$ potential*, Am. J. Phys. **70** (2002) 513.
- [7] A. M. Essin and D. J. Griffiths, *Quantum Mechanics of the $1/x^2$ Potential*, Am. J. Phys. **74(2)** (2006) 109.
- [8] A. D. Alhaidari and H. Bahlouli, *Electron in the Field of a Molecule with an Electric Dipole Moment*, Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 110401.
- [9] G. H. Sun and E. Ley-Koo, *Comment on “Electron in the Field of a Molecule with an Electric Dipole Moment”*, Phys. Rev. Lett **104** (2010) 118901.

[10] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York, 1965.

Capítulo 4

Operadores de desplazamiento para pozo infinito

4.1 Introducción

Como sabemos, el método algebraico se ha convertido en un tema de interés en varios campos de la física. Los sistemas con una simetría dinámica se pueden tratar por técnicas algebraicas [1, 2]. Con los métodos de factorización [1, 3, 4, 5, 6], se han establecido los operadores escalera para los potenciales solubles tales como el potencial de Morse, el potencial de Pöschl-Teller modificado, el potencial de pozo infinito cuadrado en una dimensión [7] y otros [6]. A partir de los operadores se puede construir un álgebra de Lie adecuada. Es importante mencionar que nuestro enfoque es diferente al tradicional [8] donde se introduce una variable auxiliar, es decir, establecimos los operadores escalera usando solamente de las variables físicas. Por otro lado, los operadores escalera para estos sistemas cuánticos están solamente relacionados con la variable radial, o sea en principio el problema en una dimensión.

Motivado por el método de factorización [6] y el interés de sistemas cuánticos en dos y tres dimensiones, intentamos estudiar los operadores de desplazamiento para el pozo circular en dos dimensiones [9-11] y el pozo infinito en tres dimensiones directamente de las eigenfunciones normalizadas. Debido a que los sistemas cuánticos en dos y tres dimensiones pueden ofrecer un rango de características nuevas e interesantes en comparación con los sistemas más familiares en una dimensión. En particular intentamos construir un nuevo tipo de operadores de desplazamiento dependientes de todas variables implicadas en las soluciones exactas. Hay que notar que los operadores escalera son totalmente diferentes con los operadores de desplazamientos. El primero corresponde a un

sistema cuántico con potencia invariante. Los operadores escalera conectan los estados ligados dentro el mismo potencial. Sin embargo, los operadores de desplazamientos generan un grupo de potenciales pero con el mismo espectro de energía.

Este capítulo se organiza como sigue. En la sección 4. 2 construimos los operadores de desplazamiento para pozo circular basando la solución exacta de este sistema cuántico. En la sección 4. 3 estudiamos el caso de pozo infinito esférico y establecemos sus operadores de desplazamiento usando el mismo método. Finalmente se presentan las conclusiones del capítulo en la sección 4. 4.

4. 2 Operadores de desplazamiento para pozo circular

4. 2. 1 Soluciones exactas

Revisamos las soluciones exactas para construir los operadores de desplazamiento. El pozo circular está definido por un potencial de la forma

$$V(\rho, \varphi) = V(\rho) = \begin{cases} 0, & \text{para } \rho < R, \\ \infty, & \text{para } \rho \geq R. \end{cases} \quad (4.1)$$

La ecuación de Schrödinger independiente de tiempo en coordenadas polares relevantes se puede escribir como

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \psi(\rho, \varphi) = E\psi(\rho, \varphi). \quad (4.2)$$

Tomando la función de onda como $\psi(\rho, \varphi) = R(\rho) e^{im\varphi} / \sqrt{2\pi}$ y sustituyéndola en la Ec. (4.2) obtenemos

$$\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR(\rho)}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} R(\rho) = -k^2 R(\rho), \quad m \in \mathbb{Z}, \quad (4.3)$$

donde $k = \sqrt{2\mu E / \hbar^2}$.

Con la definición $z = k\rho$, la ecuación (4.3) se puede escribir como

$$\frac{d^2 R(z)}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dR(z)}{dz} + \left(1 - \frac{m^2}{z^2} \right) R(z) = 0, \quad (4.4)$$

la cual se puede reconocer como la ecuación de Bessel. Ésta tiene dos soluciones linealmente independientes para cada valor del $|m|$, llamadas las soluciones regular $J_m(z)$ (se comporta bien cuando $z \rightarrow 0$) y singular $Y_m(z)$ (divergente cuando $z \rightarrow \infty$). Solamente las bien comportadas son aceptables en física, con los eigenvalores determinados por la condición de frontera en la frontera circular $J_m(kR) = 0$. Los eigenvalores son entonces dados por

$$E_{mn} = \frac{\hbar^2 k_{mn}^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \alpha_{mn}^2, \quad n=1,2,3,\dots \quad (4.5)$$

Como kR es una raíz de la función de Bessel $J_m(x)$, esto da un conjunto discreto de valores α_{mn} , donde n designa la raíz n -ésima de la función de Bessel $J_m(x)$. Los valores α_{mn} especiales son dados por la siguiente tabla.

Tabla 4. 1 Los ceros de las funciones de Bessel $J_m(x)$.

Número de ceros	$J_0(x)$	$J_1(x)$	$J_2(x)$	$J_3(x)$	$J_4(x)$	$J_5(x)$
1	2. 4048	3. 8317	5. 1356	6. 3802	7. 5883	8. 7715
2	5. 5201	7. 0156	8. 4172	9. 7610	11. 0647	12. 3386
3	8. 6537	10. 1735	11. 6198	13. 0152	14. 3725	15. 7002
4	11. 7915	13. 3237	14. 7960	16. 2235	17. 6160	18. 9801
5	14. 9309	16. 4706	17. 9598	19. 4094	20. 8269	22. 2178

Las eigenfunciones del sistema cuántico están dadas por

$$\psi_m(\rho, \varphi) = N_m J_m(k\rho) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right) e^{im\varphi}, \quad N_m = \frac{\sqrt{2}}{R |J_{m+1}(\alpha_{mn})|}. \quad (4.6)$$

donde ocupamos el integral de normalización [12]

$$\int_0^R \left[J_\nu \left(\alpha_{\nu m} \frac{\rho}{a} \right) \right]^2 \rho d\rho = \frac{a^2}{2} [J_{\nu+1}(\alpha_{\nu m})]^2. \quad (4.7)$$

Obviamente, el espectro completo para el pozo circular responde al conjunto de soluciones con $m = 0$, y a los conjuntos pero doblemente degenerados $m = \pm 1, \pm 2, \dots$. Esto corresponde

físicamente a la equivalencia de los movimientos en los sentidos de las agujas del reloj y contrario.

4.2.2 Operadores de desplazamiento

Ahora encontramos los operadores de desplazamiento para la eigenfunción (4.6) por el método de factorización. Como se muestra en [6], los operadores de desplazamiento se pueden construir directamente desde las funciones de onda sin introducir cualquier variable auxiliar. Se puede ver que construimos los operadores de desplazamiento considerando ambas variables ρ y φ , que es una nueva situación en comparación con nuestros resultados previos.

Para este propósito, se empieza por aplicar el siguiente operador en la eigenfunción (4.6), obtenemos:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial}{\partial x} \pm i \frac{\partial}{\partial y}\right) \psi_m(\rho, \varphi) &= N_m \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \pm i \frac{\partial \rho}{\partial y}\right) \left(\frac{\partial J_m(k\rho)}{\partial \rho} e^{im\varphi}\right) + N_m \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \pm i \frac{\partial \varphi}{\partial y}\right) \left(J_m(k\rho) \frac{\partial}{\partial \varphi} e^{im\varphi}\right) \\
&= N_m (\cos \varphi \pm i \sin \varphi) \left(\frac{\partial J_m(k\rho)}{\partial \rho} e^{im\varphi}\right) + N_m \left(-\frac{\sin \varphi}{\rho} \pm \frac{i \cos \varphi}{\rho}\right) J_m(k\rho) (im) e^{im\varphi} \\
&= N_m e^{\pm i\varphi} \left[\frac{\partial J_m(k\rho)}{\partial \rho} \mp \frac{m}{\rho} J_m(k\rho)\right] e^{im\varphi} \\
&= \mp \frac{N_m}{N_{m\pm 1}} N_{m\pm 1} k J_{m\pm 1}(k\rho) e^{i(m\pm 1)\varphi} \\
&= \mp C k \psi_{m\pm 1}(\rho, \varphi),
\end{aligned}$$

donde $C = N_m / N_{m\pm 1}$. (4.8)

Durante el cálculo, hemos usando las relaciones de recurrencia entre las funciones de Bessel [12]

$$\frac{dJ_m(z)}{dz} = \begin{cases} J_{m-1}(z) - \frac{m}{z} J_m(z), \\ -J_{m+1}(z) + \frac{m}{z} J_m(z), \end{cases} \quad (4.9)$$

y las relaciones $x = \rho \cos \varphi$ y $y = \rho \sin \varphi$.

¿Cómo se calculan los elementos de la matriz para algunas funciones relacionadas? Se muestra desde la Ec. (4.8) que

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}\psi_m &= \frac{Ck}{2}(\psi_{m-1} - \psi_{m+1}), \\ i\frac{\partial}{\partial y}\psi_m &= -\frac{Ck}{2}(\psi_{m+1} + \psi_{m-1}),\end{aligned}\tag{4.10}$$

de la cual tenemos

$$\begin{aligned}2\left\langle\psi_{n'}\left|\frac{\partial}{\partial x}\right|\psi_m\right\rangle &= Ck(\delta_{n',m-1} - \delta_{n',m+1}), \\ 2i\left\langle\psi_{n'}\left|\frac{\partial}{\partial y}\right|\psi_m\right\rangle &= -Ck(\delta_{n',m+1} + \delta_{n',m-1}).\end{aligned}\tag{4.11}$$

Antes de terminar esta sección, hacemos una observación útil sobre los resultados que aquí se presentan. Se sabe que la simetría de Lie oculta para el pozo infinito cuadrado en una dimensión es su (1, 1) [7]. Por lo tanto, el objetivo actual es encontrar la simetría correspondiente que participa en este sistema.

Desde las definiciones del operador del momento $P = -i\hbar\nabla$ y el operador del momento angular orbital $L = r \times p$, se pueden definir los siguientes operadores

$$\begin{aligned}P_{\pm} = P_x \pm iP_y &= -i\hbar e^{\pm i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \rho} \pm \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \\ L_z = xP_y - yP_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi},\end{aligned}\tag{4.12}$$

de las cuales se obtiene las siguientes relaciones de conmutación

$$\begin{aligned}[L_z, P_x] &= i\hbar P_y, & [L_z, P_y] &= -i\hbar P_x, \\ [L_z, P_+] &= \hbar P_+, & [L_z, P_-] &= -\hbar P_-, \\ [P_+, P_-] &= 0, & P_+ P_- &= P_x^2 + P_y^2 = P_- P_+.\end{aligned}\tag{4.13}$$

El Hamiltoniano está dado por

$$H = \frac{1}{2\mu}(P_x^2 + P_y^2) = \frac{1}{4\mu}(P_+ P_- + P_- P_+) = \frac{1}{2\mu} P_+ P_- = \frac{1}{2\mu} P_- P_+, \tag{4.14}$$

y las reglas de conmutación,

$$[L_z, H] = [P_x, H] = [P_y, H] = 0. \tag{4.15}$$

Éstas indican que los operadores P_x y P_y , el momento angular L_z y el Hamiltoniano H forman un conjunto de operadores que conmutan entre sí con la simetría SO(2). Los

operadores P_{\pm} juegan el papel de operadores de desplazamiento que está dados por

$$P_{\pm}\psi_m(\rho, \varphi) = \mp i\hbar k\psi_{m\pm 1}(\rho, \varphi).$$

4.3 Operadores de desplazamiento para el pozo infinito esférico

4.3.1 Soluciones exactas

Revisamos las soluciones exactas de potencial del pozo infinito esférico para construir los operadores de desplazamiento. El pozo infinito esférico se define como

$$V(r, \theta, \varphi) = V(r) = \begin{cases} 0, & \text{para } r \leq R, \\ \infty, & \text{para } r > R. \end{cases} \quad (4.16)$$

Para $r \leq R$, la ecuación de Schrödinger independiente de tiempo en coordenadas esféricas relevantes se puede escribir como

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi). \quad (4.17)$$

Para campos de fuerza central simétricos, siempre podemos expresar la función de onda de los sistemas cuánticos como el producto de la función de onda radial $R(r)$ y los armónicos esféricos $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, i. e. $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Si escribimos los últimos como $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ y sustituimos en la Ec. (4.17), entonces la dependencia angular satisface la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{\Phi(\varphi)}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{\Theta(\theta)}{\sin^2 \theta} \frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} + l(l+1)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) = 0, \quad (4.18)$$

donde $l(l+1)$ es una constante de separación. De la ecuación azimutal separada

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} + m^2\Phi(\varphi) = 0, \quad (4.19a)$$

obtenemos

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm im\varphi}, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (4.19b)$$

Sustituyendo en la Ec. (4.18) y separando la dependencia azimutal, la dependencia del ángulo polar θ se lleva a la ecuación de Legendre asociada

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta(\theta) = 0, \quad (4.20)$$

la cual se satisface por las funciones de Legendre asociada normalizada

$$\Theta_{lm}(\theta) = P_l^m(\cos \theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta), \quad (4.21)$$

donde $P_l^m(\cos \theta)$ son las funciones de Legendre asociadas usuales. Así podemos definir los armónicos esféricos como

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \equiv (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (4.22)$$

donde el factor $(-1)^m$ es la fase llamada Condon-Shortley.

Por separando los armónicos esféricos, podríamos obtener la ecuación radial como sigue:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = ER(r). \quad (4.23)$$

Definiendo que $z = kr$ donde $k = \sqrt{2\mu E/\hbar^2}$, entonces la Ec. (4.23) se queda como

$$\frac{d^2 R(z)}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{dR(z)}{dz} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{z^2} \right) R(z) = 0, \quad (4.24)$$

la cual se puede reconocer como la ecuación de Bessel esférica. Ésta tiene dos soluciones linealmente independientes para cada valor del momento angular l , se les llama a las soluciones la regular $j_l(z)$ (se comporta bien cuando $z \rightarrow 0$) y la singular $n_l(z)$ (divergente cuando $z \rightarrow \infty$). Solamente las bien comportadas son aceptables en física, con los eigenvalores determinados por la condición de frontera en la frontera esférica $j_l(kR) = 0$.

Los eigenvalores son entonces dados por

$$E_{ln} = \frac{\hbar^2 k_{ln}^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \alpha_{ln}^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.25)$$

Como kR es una raíz de la función de Bessel esférica $j_l(x)$, esto da un conjunto discreto de valores α_{ln} , donde n designa la raíz enésima de la $j_l(x)$. Asimismo, los valores especiales α_{ln} son dados por la Tabla 4. 2. Las eigenfunciones del sistema cuántico están dadas por

$$\psi_{lm}(r, \theta, \varphi) = N_l j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad N_l = \frac{\sqrt{2}}{R^{3/2} |j_{l+1}(\alpha_{ln})|}, \quad (4.26)$$

donde se ha empleado la integral de normalización para la función de Bessel esférica [12]

$$\int_0^a j_n\left(\alpha_{np} \frac{\rho}{a}\right) j_n\left(\alpha_{nq} \frac{\rho}{a}\right) \rho^2 d\rho = \frac{a^3}{2} [j_{n+1}(\alpha_{np})]^2 \delta_{pq}. \quad (4.27)$$

Tabla 4. 2 Los ceros de las funciones de Bessel esféricas $j_l(x)$

Número de ceros	$j_0(x)$	$j_1(x)$	$j_2(x)$	$j_3(x)$	$j_4(x)$	$j_5(x)$
1	3. 1416	4. 4934	5. 7635	6. 9879	8. 1826	9. 3558
2	6. 2832	7. 7253	9. 0950	10. 4171	11. 7049	12. 9665
3	9. 4248	10. 9041	12. 3229	13. 6980	15. 0397	16. 3547
4	12. 5664	14. 0662	15. 5146	16. 9236	18. 3013	19. 6536
5	15. 7080	17. 2208	18. 6890	20. 1218	21. 5254	22. 9046

4. 3. 2 Operadores de desplazamiento

Ahora podemos establecer los operadores de desplazamiento para la función de onda (4.26) usando el método de factorización. En particular, vamos a construir los operadores de desplazamiento considerando todas las variables r , θ y φ , involucradas en funciones de onda $\psi_{lm}(r, \theta, \varphi)$. Para construir los operadores de desplazamiento para este sistema cuántico, vamos a realizarlo en dos pasos. Primero vamos a obtener los operadores de desplazamiento para la parte de radial. En segundo lugar vamos a encontrar los operadores de desplazamiento para los armónicos esféricos $Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Sus combinaciones nos llegarán a nuestro objetivo final.

Vamos a dar el primer paso. Basandonos en las relaciones de recurrencia entre las funciones de Bessel esféricas [12]

$$\frac{dj_l(z)}{dz} = \begin{cases} j_{l-1}(z) - \frac{l+1}{z} j_l(z), \\ -j_{l+1}(z) + \frac{l}{z} j_l(z), \end{cases} \quad (4.28)$$

tenemos

$$A^+ = -\left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r}\right), \quad A^- = \frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r}, \quad (4.29)$$

con las siguientes propiedades

$$A^+ \psi_{lm}(r, \theta, \varphi) = N_l k j_{l+1}(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad A^- \psi_{lm}(r, \theta, \varphi) = N_l k j_{l-1}(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (4.30)$$

Ahora vamos a manejar los operadores de desplazamiento para los armónicos esféricos $Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Para un número cuántico orbital fijo l , los operadores escalera para m son bien conocidos y se pueden escribir como

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y = \pm e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (4.31)$$

donde

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad \vec{p} = -i\hbar \nabla, \quad (4.32)$$

y

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \cos \theta \cos \varphi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \cos \theta \sin \varphi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \sin \theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Aplicando los operadores L_{\pm} sobre los armónicos esféricos $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ nos lleva a

$$Y_{l(m\mp 1)}(\theta, \varphi) = \frac{e^{\mp i\varphi}}{\sqrt{(l\pm m)(l\mp m+1)}} \left(\mp \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (4.34)$$

Ahora nuestro objetivo clave es encontrar los operadores de desplazamiento para l cuando m es fijo. Conforme a la Ec. (4.20), la ecuación en θ se puede reescribir como

$$-\sin^2 \theta \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} - \sin \theta \cos \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} - l(l+1) \sin^2 \theta \Theta(\theta) = -m^2 \Theta(\theta). \quad (4.35)$$

Usando la técnica que se muestra en las referencias [4, 5], se hace la transformación siguiente

$$z = \ln \left(\tan \frac{\theta}{2} \right), \quad \theta \in [0, \pi], \quad z \in (-\infty, \infty). \quad (4.36)$$

Nótese que

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{dz}{d\theta} \frac{d}{dz} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{dz}, \quad \frac{d^2}{d\theta^2} = -\frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} \frac{d}{dz} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{dz^2}, \quad (4.37)$$

entonces tenemos el resultado

$$-\sin^2 \theta \frac{d^2}{d\theta^2} - \sin \theta \cos \theta \frac{d}{d\theta} = -\frac{d^2}{dz^2}. \quad (4.38)$$

Al tomar

$$\Theta(\theta(z)) = v(z), \quad (4.39)$$

la ecuación (4.35) se transforma a la siguiente ecuación

$$\left[-\frac{d^2}{dz^2} - \frac{l(l+1)}{\cosh^2(z)} \right] v_{\lambda l}(z) = -m^2 v_{\lambda l}(z) = \lambda v_{\lambda l}(z). \quad (4.40)$$

Por eso, vemos que los papeles de m y l se intercambian, es decir, l es un parámetro en la “función potencial”. Ahora, esta ecuación puede ser factorizable con

$$O_{\pm}(l) = \left(\mp \frac{d}{dz} + l \tanh z \right), \quad (4.41)$$

aplicando las siguientes propiedades

$$\begin{aligned} O_+(l)O_-(l)v_{\lambda l}(z) &= \left[-\frac{d}{dz} + l \tanh z \right] \left[\frac{d}{dz} + l \tanh z \right] v_{\lambda l}(z) \\ &= \left[\left(-\frac{d^2}{dz^2} - \frac{l(l+1)}{\cosh^2 z} \right) + l^2 \right] v_{\lambda l}(z) \\ &= [\lambda - L(l)]v_{\lambda l}(z), \end{aligned} \quad (4.42)$$

y

$$\begin{aligned}
O_-(l)O_+(l)v_{\lambda}(z) &= \left[\frac{d}{dz} + l \tanh z \right] \left[-\frac{d}{dz} + l \tanh z \right] v_{\lambda}(z) \\
&= \left[\left(-\frac{d^2}{dz^2} - \frac{l(l+1)}{\cosh^2 z} \right) + (l+1)^2 \right] v_{\lambda}(z) \\
&= [\lambda - L(l+1)]v_{\lambda}(z).
\end{aligned} \tag{4.43}$$

de donde se obtiene

$$L(l) = -l^2, \tag{4.44}$$

la cual implica que $L(l)$ es una función decreciente del parámetro l con el valor negativo $\lambda = -m^2$. Entonces tiene que existir un valor minio del parámetro l con

$$\lambda = -m^2 = L(l_{\min}) = -l_{\min}^2. \tag{4.45}$$

La función inicial con $l = l_{\min} = m$ se obtiene de la ecuación diferencial

$$O_-(l_{\min})v_{\lambda_{\min}=m}(z) = \left(\frac{d}{dz} + m \tanh z \right) v_{\lambda_m}(z) = 0, \tag{4.46}$$

entonces

$$\frac{dv_{\lambda_m}}{v_{\lambda_m}} = -m \tanh z \, dz. \tag{4.47}$$

La integración nos da

$$\ln v_{\lambda_m} = \ln(\cosh z)^{-m}, \tag{4.48}$$

y de ésta tenemos la solución

$$v_{\lambda_m} = N_m \sin^m \theta. \tag{4.49}$$

Las soluciones restantes para $l > m$ se pueden obtener a través los operadores escalera como

$$\begin{aligned}
v_{\lambda(l+1)}(z) &= \frac{1}{\sqrt{\lambda - L(l+1)}} \left[-\frac{d}{dz} + (l+1) \tanh z \right] v_{\lambda}(z) \\
&= \frac{1}{\sqrt{-m^2 + (l+1)^2}} \left[-\frac{d}{dz} + (l+1) \tanh z \right] v_{\lambda}(z),
\end{aligned} \tag{4.50}$$

y

$$\begin{aligned}
v_{\lambda(l-1)}(z) &= \frac{1}{\sqrt{\lambda - L(l)}} \left[\frac{d}{dz} + l \tanh z \right] v_{\lambda}(z) \\
&= \frac{1}{\sqrt{-m^2 + l^2}} \left[\frac{d}{dz} + l \tanh z \right] v_{\lambda}(z).
\end{aligned} \tag{4.51}$$

SE considera la condición de normalización

$$\int_0^\pi |\Theta(\theta)|^2 \sin \theta d\theta = 1 = \int_{-\infty}^{\infty} \cosh^{-2}(z) |v_{\lambda l}(z)|^2 dz, \quad (4.52)$$

donde usamos las relaciones

$$d\theta = \sin \theta dz, \quad \cosh z = \frac{1}{\sin \theta}. \quad (4.53)$$

Por eso, podemos tomar la función $\Theta_{lm}(\theta) = c_{lm} v_{\lambda l}(z)$ donde c_{lm} denota el factor de normalización. Usando $d/dz = \sin \theta d/d\theta$, $\tanh z = -\cos \theta$ y substituyendo en las ecuaciones (4.50) y (4.51) podemos obtener los siguientes operadores escalera para m fijo

$$\begin{aligned} \Theta_{(l+1)m}(\theta) &= -\frac{C_{(l+1)m}}{C_{lm}} \frac{1}{\sqrt{(l+1+m)(l+1-m)}} \times \left[-\sin \theta \frac{d}{d\theta} - (l+1) \cos \theta \right] \Theta_{lm}(\theta), \\ \Theta_{(l-1)m}(\theta) &= -\frac{C_{(l-1)m}}{C_{lm}} \frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m)}} \times \left[\sin \theta \frac{d}{d\theta} - l \cos \theta \right] \Theta_{lm}(\theta), \end{aligned} \quad (4.54)$$

donde C_{lm} es el coeficiente de relación para $\Theta_{lm}(\theta)$. La introducción de un signo adicional “-” está de acuerdo con las convenciones de fase estándar para armónicos esféricos.

Para calcular C_{lm} , podemos calcular $\Theta_{(l+1)(m+1)}(\theta)$ paso por paso de (l, m) a $(l+1, m+1)$ a lo largo de dos diferentes caminos en el espacio de parámetros (l, m) . El camino 1 usa el paso de (l, m) a $(l, m+1)$ vía el operador de aumentar m de la Ec. (4.52) y luego paso de $(l, m+1)$ a $(l+1, m+1)$ con el operador de aumentar l de la Ec. (4.54). Después de algunas manipulaciones algebraicas, obtenemos

$$\Theta_{(l+1)(m+1)}(\theta) = \frac{C_{(l+1)(m+1)}}{C_{l(m+1)}} \frac{1}{\sqrt{(l+m+1)(l+m+2)}} \times \left[\cos \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{m}{\sin \theta} - (l+1) \sin \theta \right] \Theta_{lm}(\theta). \quad (4.55)$$

Durante el cálculo, hemos usando la siguiente identidad vía la ecuación de θ (4.53)

$$\frac{d^2}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d}{d\theta} = \frac{m^2}{\sin^2 \theta} - l(l+1). \quad (4.56)$$

De manera similar, en el camino 2, pasamos primero desde (l, m) a $(l+1, m)$ vía el operador de aumentar l de la Ec. (4.54), y luego de $(l+1, m)$ a $(l+1, m+1)$ vía el operador de aumentar m de la Ec. (4.34), con el resultado

$$\Theta_{(l+1)(m+1)}(\theta) = \frac{C_{(l+1)m}}{C_{lm}} \frac{1}{\sqrt{(l+m+1)(l+m+2)}} \times \left[\cos \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{m}{\sin \theta} - (l+1) \sin \theta \right] \Theta_{lm}(\theta). \quad (4.57)$$

Comparando las Ecs. (4.55) y (4.57), tenemos

$$\frac{C_{(l+1)m}}{C_{lm}} = \frac{C_{(l+1)(m+1)}}{C_{l(m+1)}}, \quad (4.58)$$

la cual implica que la relación es independiente del número cuántico m . Este es porque m es fijo pero l se cambió en la Ec. (4.54). Por consiguiente, podemos calcularlo por ajustar que $l = m$. Sustituyéndolo en la Ec. (4.55) o Ec. (4.57), tenemos

$$\begin{aligned} \Theta_{(l+1)(l+1)}(\theta) &= N_{l+1} \sin^{(l+1)} \theta \\ &= \frac{C_{(l+1)l}}{C_{ll}} \frac{1}{\sqrt{(2l+1)(2l+2)}} \left[\cos \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{m}{\sin \theta} - (l+1) \sin \theta \right] N_l \sin^l \theta \quad (4.59) \\ &= -\frac{C_{(l+1)l}}{C_{ll}} \sqrt{\frac{2l+1}{2l+2}} N_l \sin^{(l+1)} \theta. \end{aligned}$$

Para calcular el factor de normalización N_l , podemos usar la formula $L_+ Y_{LL}(\theta, \varphi) = 0$.

Entonces, se tiene

$$e^{i(L+1)\varphi} \left[\frac{d}{d\theta} - L \cot \theta \right] \Theta(\theta) = 0, \quad (4.60)$$

de donde obtenemos

$$Y_{ll}(\theta, \varphi) = N_l \sin^l \theta e^{il\varphi}, \quad (4.61)$$

normalizando se encuentra

$$N_l^* N_l \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin^{2l+1} \theta d\theta d\varphi = 1. \quad (4.62)$$

Finamente, el factor de normalización N_l está dado por [12]

$$N_l = (-1)^L \frac{\sqrt{(2L)!}}{2^L L!} \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}}. \quad (4.63)$$

Basándonos en esto, tenemos

$$\frac{N_{l+1}}{N_l} = -\sqrt{\frac{2l+3}{2l+2}}. \quad (4.64)$$

Por lo tanto, en términos de la Ec. (4.59), obtenemos

$$\frac{C_{(l+1)l}}{C_{ll}} = \sqrt{\frac{2l+3}{2l+2}} = \frac{C_{(l+1)m}}{C_{lm}}. \quad (4.65)$$

Las relaciones correspondientes (4.54) se convierten en

$$\begin{aligned}\Theta_{(l+1)m}(\theta) &= \sqrt{\frac{(2l+3)/(2l+1)}{(l+1+m)(l+1-m)}} \left[\sin \theta \frac{d}{d\theta} + (l+1) \cos \theta \right] \Theta_{lm}(\theta), \\ \Theta_{(l-1)m}(\theta) &= \sqrt{\frac{(2l-1)/(2l+1)}{(l+m)(l-m)}} \left[-\sin \theta \frac{d}{d\theta} + l \cos \theta \right] \Theta_{lm}(\theta).\end{aligned}\quad (4.66)$$

Así, la relación (4.57) se puede escribir como

$$\Theta_{(l+1)(m+1)}(\theta) = B^+ \Theta_{lm}(\theta), \quad (4.67)$$

donde

$$B^+ = \sqrt{\frac{(2l+3)/(2l+1)}{(l+1+m)(l+2+m)}} \left[\cos \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{m}{\sin \theta} - (l+1) \sin \theta \right]. \quad (4.68)$$

Con el mismo espíritu, vamos a buscar la relación entre $\Theta_{(l-1)(m-1)}(\theta)$ y $\Theta_{lm}(\theta)$. Con este fin, podemos calcular $\Theta_{(l-1)(m-1)}(\theta)$ dando paso desde (l, m) a $(l-1, m-1)$ a lo largo de dos caminos en el espacio de parámetros (l, m) .

Siguiendo el camino 1, paso primero desde (l, m) a $(l-1, m)$ vía el operador de bajar l de la Ec. (4.54), y luego paso de $(l-1, m)$ a $(l-1, m-1)$ con el operador de bajar m de (4.34). Después de algunas manipulaciones algebraicas, tenemos

$$\begin{aligned}\Theta_{(l-1)(m-1)}(\theta) &= \frac{C_{(l-1)m}}{C_{lm}} \frac{1}{(l-m)\sqrt{(l+m)(l+m-1)}} \\ &\times \left[\sin \theta \left(\frac{d^2}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d}{d\theta} \right) - (l-m) \cos \theta \frac{d}{d\theta} - ml \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + l \sin \theta \right] \Theta_{lm}(\theta) \\ &= -\frac{C_{(l-1)m}}{C_{lm}} \frac{1}{\sqrt{(l+m)(l+m-1)}} \left[\cos \theta \frac{d}{d\theta} + \frac{m}{\sin \theta} + l \sin \theta \right] \Theta_{lm}(\theta).\end{aligned}\quad (4.69)$$

Siguiendo el camino 2, paso primero desde (l, m) a $(l, m-1)$ vía el operador de bajar m de la Ec. (4.34), y luego paso de $(l, m-1)$ a $(l-1, m-1)$ con el operador de bajar l de la Ec. (4.54). Similarmente, tenemos

$$\begin{aligned}\Theta_{(l-1)(m-1)}(\theta) &= \frac{C_{(l-1)(m-1)}}{C_{l(m-1)}} \frac{1}{(l-m+1)\sqrt{(l+m)(l+m-1)}} \\ &\times \left[\sin \theta \frac{d^2}{d\theta^2} - \frac{m}{\cos \theta} + m \cos \theta \frac{d}{d\theta} - l \cos \theta \frac{d}{d\theta} - ml \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} \right] \Theta_{lm}(\theta) \\ &= -\frac{C_{(l-1)(m-1)}}{C_{l(m-1)}} \frac{1}{\sqrt{(l+m)(l+m-1)}} \left[\cos \theta \frac{d}{d\theta} + \frac{m}{\sin \theta} + l \sin \theta \right] \Theta_{lm}(\theta).\end{aligned}\quad (4.70)$$

En la comparación entre Ec. (4.69) y Ec. (4.70), tenemos

$$\frac{C_{(l-1)(m-1)}}{C_{l(m-1)}} = \frac{C_{(l-1)m}}{C_{lm}}. \quad (4.71)$$

De igual manera, ajustamos que $m=l$, y sustituyéndolo a la Ec. (4.69) produce

$$\begin{aligned} \Theta_{(l-1)(l-1)}(\theta) &= N_{l-1} \sin^{(l-1)} \theta \\ &= -\frac{C_{(l-1)l}}{C_{ll}} \frac{1}{\sqrt{(2l)(2l-1)}} \left[\cos \theta \frac{d}{d\theta} + \frac{l}{\sin \theta} + l \sin \theta \right] N_l \sin^l \theta \\ &= -\frac{C_{(l-1)l}}{C_{ll}} \sqrt{\frac{2l}{2l-1}} N_l \sin^{(l-1)} \theta. \end{aligned} \quad (4.72)$$

Basando en

$$\frac{N_{l-1}}{N_l} = -\sqrt{\frac{2l}{2l+1}}, \quad (4.73)$$

Tenemos

$$\frac{C_{ll}}{C_{(l-1)l}} = \sqrt{\frac{2l+1}{2l-1}} = \frac{C_{lm}}{C_{(l-1)m}}. \quad (4.74)$$

Así considerando este resultado tenemos

$$\Theta_{(l-1)(m-1)}(\theta) = B^- \Theta_{lm}(\theta), \quad (4.75)$$

con

$$B^- = \sqrt{\frac{(2l-1)(2l+1)}{(l+m)(l+m-1)}} \left[-\cos \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{m}{\sin \theta} - l \sin \theta \right]. \quad (4.76)$$

Conforme a los operadores B^\pm y A^\pm , podemos expresar los operadores de desplazamiento como sigue:

$$B^\pm A^\pm \psi_{lm}(r, \theta, \varphi) = C_\pm k \psi_{(l\pm 1)(m\pm 1)}(r, \theta, \varphi), \quad (4.77)$$

con $C_\pm = N_l / N_{l\pm 1}$. Por consiguiente, la relación entre $\psi_{lm}(r, \theta, \varphi)$ y $\psi_{(l\pm 1)(m\pm 1)}(r, \theta, \varphi)$ está establecida para el mismo k pero diferentes pozos con varios radios R .

4.4 Conclusiones

Los operadores de desplazamiento P_\pm para el potencial de pozo circular en dos dimensiones y C_\pm para el potencial de pozo esférico en tres dimensiones han sido

construidos. El método que ocupamos también se le llama el enfoque del grupo de potenciales, es decir los operadores de desplazamiento generan un grupo de potenciales pero con el mismo espectro de energía. Se reconoce que éste es un nuevo tipo de operadores de desplazamiento que dependen de todas las variables (ρ, φ) o (r, θ, φ) de los sistemas. Aparte en el sistema de dos dimensiones, los operadores lineales P_x y P_y , el operador del momento angular L_z y el hamiltoniano H , forman un conjunto completo de operadores conmutativos con la simetría $SO(2)$.

Por otro lado, extendemos los resultados para el pozo infinito esférico. Por eso, los operadores de desplazamiento B^+A^+ han sido obtenidos para conectar la relación entre los estados $\psi_{lm}(r, \theta, \varphi)$ y $\psi_{(l\pm 1)(m\pm 1)}(r, \theta, \varphi)$. Debemos mencionar que los operadores de desplazamiento obtenidos en este trabajo incluyen todas las variables, las cuales son diferentes con los estudios anteriores [6].

Antes de terminar este capítulo, cabe mencionar que estos sistemas cuánticos también se pueden resolver en coordenadas cartesianas. Sin embargo, según los cambios en las simetrías de pozo infinito en los casos de circular (esférica) y rectangular (cubo), los niveles de energía y las eigenfunciones son totalmente diferentes con los estudios en el presente capítulo. Considerando su complejidad, no lo estudiamos en el presente trabajo. Será un tema de investigación en el futuro.

Referencias

- [1] A. Perelomov, *Generalized Coherent States and Their Applications*, Springer, New York, 1985.
- [2] R. G. Wybourne, *Classical Groups for Physicists*, Wiley, New York, 1974.
- [3] E. Schrödinger, *Further studies on solving eigenvalue problems by factorization*, Proc. R. Irish Acad. A **46** (9) (1940) 183.
- [4] L. Infeld and T. E. Hull, *The factorization method*, Rev. Mod. Phys. **23** (1951) 21.
- [5] K. T. Hecht, *Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, 2000.
- [6] S. H. Dong, *Factorization Method in Quantum Mechanics*, Springer, Netherlands, 2007.

-
- [7] S. H. Dong and Z. Q. Ma, *The hidden symmetry for a quantum system with an infinitely deep square-well potential*, Am. J. Phys. **70** (2002) 520.
- [8] M. Berrondo and A. Palma, *The algebraic approach to the Morse oscillator*, J. Phys. A: Math. Gen. **13** (1980) 773.
- [9] R. W. Robinett, *Quantum mechanics of the two-dimensional circular billiard plus baffle system and half-integral angular momentum*, Eur. J. Phys. **24** (2003) 231; R. W. Robinett, *Quantum wave packet revivals*, Phys. Rep. **392** (2004) 1.
- [10] K. Volke-Sepulveda, E. Ley-Koo, *General construction and connections of vector propagation invariant optical fields: TE and TM modes and polarization states*, J. Opt. A: Pure Appl. Opt. **8** (2006) 867.
- [11] R. L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, Addison–Wesley, Reading, MA, 1980, pp. 294–298.
- [12] G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, 5th ed. Academic Press, 2000.

Capítulo 5

Átomo de hidrógeno confinado en ángulo diedro

5.1 Introducción

Levine en 1965 inició la investigación del átomo de hidrógeno confinado en un espacio semi-infinito limitado por una frontera plana en su modelo de una impureza donadora en una superficie de semiconductor con funciones de onda esféricas hidrogénicas compartiendo el nodo ecuatorial [1]. Dos décadas después, Liu y Lin [2] y Satpathy [3] extendieron tal modelo para estudiar excitones de Wannier cerca de una superficie de un semi-conductor; mientras [2] usó un método variacional, [3] se construyó la solución exacta en coordenadas esferoidales prolatas. Shan et al. [4-6] también investigaron funciones de onda esferoidales generalizadas para un sistema hidrogénico en la mitad del espacio, y Kovalenko et al. investigaron una molécula de hidrógeno cerca a un pared impermeable [7].

Por otro lado, Ley-Koo et al. en su interpretación de emisión de electrón en rocas bajo la compresión hasta la fractura [8], reconocieron la necesidad de desarrollar modelos alternativos de átomos en la superficie de sólidos. Éste fue la motivación original para las investigaciones sucesivas del átomo de hidrógeno confinado en espacios semi-infinitos con fronteras paraboloidal [9], hiperboloidal [10], y cono circular [11].

El capítulo “The Hydrogen Atom Confined in Semi-infinite Spaces with Conoidal Boundaries” [12] revisó las referencias [1-11] reconociendo que las fronteras planas son casos especiales de aquellos en [10] y [11]. También se identificaron dos tipos de fronteras naturales de conos elípticos y ángulos diedros, asociados con coordenadas esferoconales y coordenadas esféricas, parabólicas y esferoidales prolatas, respectivamente, en las cuales la

ecuación de Schrödinger para átomo de hidrógeno se puede separar e investigar en las situaciones correspondientes de confinamiento. Los confinamientos en conos elípticos del átomo hidrógeno [13], la partícula libre y el oscilador armónico [14] y de las rotaciones de moléculas asimétricas [15] han sido reportados.

El confinamiento del átomo de hidrógeno por ángulos diedros, en coordenadas esféricas, parabólicas y esferoidales prolatas, es el tema de esta contribución. La Sección 5.2 muestra la separación de la ecuación de Schrödinger en los tres sistemas de coordenadas. Sus eigenfunciones y eigenvalores son construidos en la secc. 5.3, incorporando el efecto de confinamiento en ángulo diedro, estableciendo las relaciones entre los estados bajos de energía en las diferentes coordenadas, la identificación de la degeneración, y el orden de los niveles de energía al cambiar los ángulos de confinamiento. En la sec. 5.4 se evalúan la distribución de presión en las paredes de confinamiento del ángulo diedro, y el momento dipolar eléctrico del átomo de hidrógeno debido al rompimiento de simetría de rotación alrededor del eje polar. Finalmente la discusión de los resultados se presenta in la Sec. 5.5.

5. 2 Separación de la ecuación de Schrödinger del átomo de hidrógeno y constantes de movimiento en coordenadas esféricas, parabólicas y esferoidales prolatas

Revisamos la separación de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (5.1)$$

donde m_e denota la masa del electrón, en los sistemas de coordenadas respectivos identificando los conjuntos correspondientes de las constantes de movimiento. Las coordenadas se definen y se relacionan por sus ecuaciones de transformación respectivas [16,17]:

$$\begin{aligned}
x &= r \sin \theta \cos \varphi = \xi \eta \cos \varphi = f \sqrt{(u^2 - 1)(1 - v^2)} \cos \varphi, \\
y &= r \sin \theta \sin \varphi = \xi \eta \sin \varphi = f \sqrt{(u^2 - 1)(1 - v^2)} \sin \varphi, \\
z &= r \cos \theta = \frac{\xi^2 - \eta^2}{2} = fuv,
\end{aligned} \tag{5.2}$$

con los factores de escala correspondientes:

$$\begin{aligned}
h_r &= 1, \quad h_\theta = r, \quad h_\varphi = r \sin \theta, \\
h_\xi &= \sqrt{\xi^2 + \eta^2}, \quad h_\eta = \sqrt{\xi^2 + \eta^2}, \quad h_\varphi = \xi \eta, \\
h_u &= f \sqrt{\frac{u^2 - v^2}{u^2 - 1}}, \quad h_v = f \sqrt{\frac{u^2 - v^2}{1 - v^2}}, \quad h_\varphi = f \sqrt{(u^2 - 1)(1 - v^2)}.
\end{aligned} \tag{5.3}$$

Entonces la ecuación de Schrödinger (5.1) toma las respectivas formas

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{e^2}{r} \right\} \psi = E\psi, \tag{5.4a}$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{\xi^2 + \eta^2} \left(\frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \frac{1}{\xi^2 \eta^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{2e^2}{\xi^2 + \eta^2} \right\} \psi = E\psi, \tag{5.4b}$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e f^2} \left[\frac{1}{u^2 - v^2} \left(\frac{\partial}{\partial u} (u^2 - 1) \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial}{\partial v} (1 - v^2) \frac{\partial}{\partial v} \right) + \frac{1}{(u^2 - 1)(1 - v^2)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{e^2}{f(u + v)} \right\} \psi = E\psi. \tag{5.4c}$$

En el último caso el núcleo ocupa la posición del foco en $x_1 = 0, y_1 = 0, z_1 = -f$, para el cual el electrón está a una distancia $r_1 = f(u + v)$.

Los lectores pueden reconocer la presencia del cuadrado de la componente z del operador del momento angular, $\hat{l}_z^2 = -\hbar^2 \partial^2 / \partial \varphi^2$ en las tres ecuaciones, la cual se identifica como una constante de movimiento común. Su ecuación de eigenvalores

$$-\frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = \mu^2 \Phi(\varphi), \tag{5.5}$$

proporciona el factor común de las eigenfunciones factorizables de las ecuaciones (5.4a-c):

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi), \quad \psi(\xi, \eta, \varphi) = \Xi(\xi) H(\eta) \Phi(\varphi), \quad \psi(u, v, \varphi) = U(u) V(v) \Phi(\varphi) \tag{5.6}$$

Las ecuaciones diferenciales ordinarias restantes son:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{r^2} \right] - \frac{e^2}{r} \right\} R(r) = ER(r), \quad (5.7)$$

$$-\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{\mu^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta(\theta) = \lambda(\lambda+1)\Theta(\theta);$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \xi \frac{d}{d\xi} - \frac{\mu^2}{\xi^2} \right) - E\xi^2 \right] \Xi(\xi) = A_\xi \Xi(\xi), \quad (5.8)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{\eta} \frac{d}{d\eta} \eta \frac{d}{d\eta} - \frac{\mu^2}{\eta^2} \right) - E\eta^2 \right] H(\eta) = A_\eta H(\eta),$$

donde $A_\xi + A_\eta = 2e^2$;

$$\left\{ -\left[\frac{d}{du} (u^2 - 1) \frac{d}{du} - \frac{\mu^2}{u^2 - 1} \right] - \frac{2me^2 fu}{\hbar^2} - \frac{2meE f^2 u^2}{\hbar^2} \right\} U(u) = -AU(u), \quad (5.9)$$

$$\left\{ -\left[\frac{d}{dv} (1 - v^2) \frac{d}{dv} - \frac{\mu^2}{1 - v^2} \right] + \frac{2me^2 fv}{\hbar^2} + \frac{2meE f^2 v^2}{\hbar^2} \right\} V(v) = AV(v).$$

En las coordenadas esféricas las ecuaciones (5.7) de las partes radial y de ángulo polar son la energía y cuadrado de las ecuaciones del eigenvalor del momento angular, respectivamente. Cada una de las ecuaciones (5.8) en las coordenadas parabólicas se puede identificar como de oscilador armónico en coordenada circular radial para valores negativos de la energía E asociada con los estados ligados del átomo de hidrógeno. Su otra constante de movimiento es la componente del vector Runge-Lenz a lo largo del eje z , $\left(\hat{p} \times \hat{l} - \hat{l} \times \hat{p} - 2m_e e^2 \hat{r} \right) \cdot \hat{k}$. Las ecuaciones (5.9) en coordenadas esferoidales prolatas se identifican como las mismas en los respectivos dominios de los variables esferoidal ($1 < u < \infty$) e hiperboloidal ($-1 < v < 1$). Su otra constante de movimiento es la combinación lineal de las contantes de movimiento esférica y parabólica [12]

$$\hbar^2 \hat{A} = \hat{l}_1^2 + 2\bar{f} \cdot \left[\left(\hat{p} \times \hat{l}_1 - \hat{l}_1 \times \hat{p} - 2m_e e^2 \hat{r}_1 \right) \right] - 2m_e f^2 \hat{H}. \quad (5.10)$$

Mientras las ecuaciones (5.2) muestran que las coordenadas esferoidales prolatas se convierten en esféricas cuando $f \rightarrow 0$ y $u \rightarrow \infty$, de tal manera que $fu \rightarrow r$ y $v \rightarrow \cos \theta$; ellas también se convierten en parabólicas cuando $f \rightarrow \infty$, $u \rightarrow 1$ y $v \rightarrow 1$, de tal manera que $\sqrt{f(u^2 - 1)} \rightarrow \xi$ y $\sqrt{f(1 - v^2)} \rightarrow \eta$. Esta interpolación geométrica, cuando la semi-distancia focal cubre su dominio $0 \leq f < \infty$, y la inversa de la excentricidad cubre su propio dominio

$1 < u < \infty$, tiene su contrapartida dinámica en la ecuación (5.10), donde $\hbar^2 \hat{A} \rightarrow \hat{l}_1^2$ cuando $f \rightarrow 0$, y se convierten la componente del vector Runge-Lenz cuando $f \rightarrow \infty$.

5. 3 Eigensoluciones exactas para el átomo de hidrógeno confinado por ángulos diedros

En esta sección, el átomo de hidrógeno confinado por paredes impenetrables en los meridianos semi-plano $\varphi=0$ y $\varphi=\varphi_0$, localizando el ángulo diedro, se define primero por las condiciones de frontera requiriendo que se anulan las eigenfunciones de las ecuaciones (5.6) en estas locaciones. Además, las eigensoluciones de las tres parejas de las ecuaciones (5.7, 5.8, 5.9) en las coordenadas esféricas, parabólicas y esferoidales prolatas son construidas y caracterizadas sucesivamente. Se ilustran los estados base y excitados más bajos, incluyendo las relaciones entre las eigensoluciones degeneradas en diferentes coordenadas.

Las condiciones de frontera en las ecuaciones factorizables (5.6) involucran el tercer factor común, y toma las formas específicas:

$$\Phi(\varphi=0)=0, \quad \Phi(\varphi=\varphi_0)=0. \quad (5.11)$$

De las dos soluciones independientes de la ecuación (5.5), $\sin \mu\varphi$ y $\cos \mu\varphi$, la última es eliminada por la primera de la ecuación (5.11). La segunda determina los eigenvalores

$$\mu = n_\varphi \pi / \varphi_0, \quad n_\varphi = 1, 2, 3, \dots \quad (5.12)$$

y eigenfunciones normalizadas

$$\Phi_\mu(\varphi) = \sqrt{2/\varphi_0} \sin(\mu\varphi), \quad (5.13)$$

las cuales coinciden con las del átomo de hidrógeno en dos dimensiones confinado por un ángulo [18].

A continuación, vamos a analizar las soluciones del ángulo polar en las ecuaciones (5.7). A parte del factor $\sin^\mu \theta$ para eliminar las singularidades, $\theta=0$ y $\theta=\pi$, hay dos soluciones independientes de polinomios de Legendre asociados ${}_2F_1(-n_\theta, n_\theta + 2\mu + 1; \mu + 1; (1 - \cos \theta)/2)$ y ${}_2F_1(-n_\theta, n_\theta + 2\mu + 1; \mu + 1; (1 + \cos \theta)/2)$ con el eigenvalor $\lambda = n_\theta + \mu$. Debido a que μ no siempre es un entero, cada polinomio contiene

ambas potencias pares y impares de $\cos \theta$, por lo tanto ellos no tienen una paridad bien definida; cuando μ llega a ser un entero, ambos polinomios se convierten en el mismo con la paridad $(-1)^{n_\theta}$. Mientras el confinamiento del sistema físico en ángulos diedros rompe la simetría rotacional alrededor de eje z , la paridad z para el átomo de hidrógeno se debe mantener. Eso se logra mediante la superposición de los dos polinomios con el coeficiente relativo $(-1)^{n_\theta}$.

Por otro lado, la Ec. (5.7) en la coordenada radial admite funciones hidrogénicas, con el valor de λ del párrafo anterior. En conclusión, las eigenfunciones en las coordenadas esféricas tienen la forma explícita:

$$\psi_{n_r, n_\theta, \mu}(r, \theta, \varphi) = N_{n_r, n_\theta, \mu} e^{-\frac{r}{va_0}} (r \sin \theta)^\mu \sin(\mu\varphi) r^{n_\theta} {}_1F_1\left(-n_r, 2n_\theta + 2\mu + 2, \frac{2r}{va_0}\right) \left[{}_2F_1\left(-n_\theta, n_\theta + 2\mu + 1; \mu + 1; \frac{1 - \cos \theta}{2}\right) + (-1)^{n_\theta} {}_2F_1\left(-n_\theta, n_\theta + 2\mu + 1; \mu + 1; \frac{1 + \cos \theta}{2}\right) \right], \quad (5.14)$$

con la etiqueta cuántica principal

$$\nu = n_r + n_\theta + \mu + 1. \quad (5.15)$$

y energía

$$E_\nu = -\frac{e^2}{2a_0\nu^2} \quad (5.16)$$

donde $a_0 = \hbar^2/m_e e^2$, y la Ec. (5.12) le da su dependencia en el ángulo de confinamiento φ_0 .

Vamos a pasar a las Ecs. (5.8) en coordenadas parabólicas. Con el propósito de mostrar su carácter de oscilador armónico, hacemos la reparametrización del coeficiente de los términos cuadráticos

$$E = -\frac{m_e \omega^2}{2} \quad (5.17)$$

y de las eigenenergías

$$\begin{aligned} A_\xi &= \hbar\omega(2n_\xi + \mu + 1) \\ A_\eta &= \hbar\omega(2n_\eta + \mu + 1) \end{aligned} \quad (5.18)$$

La tercera parte de las ecuaciones (5.8) permite la identificación de la frecuencia

$$\omega = \frac{e^2}{\hbar(n_\xi + n_\eta + \mu + 1)}, \quad (5.19)$$

así como de la etiqueta cuántica principal del átomo de hidrógeno:

$$\nu = n_\xi + n_\eta + \mu + 1 \quad (5.20)$$

y la energía correspondiente de la Ec. (5.16), vía la Ec. (5.17) incluyendo la identificación del radio de Bohr y la unidad de longitud del oscilador armónico.

Una vez que la relación del átomo de hidrógeno y dos osciladores armónicos en coordenada radial asimilar a circular se ha establecido, simplemente escribimos sus eigenfunciones comunes

$$\psi_{n_\xi n_\eta \mu}(\xi, \eta, \varphi) = N_{n_\xi n_\eta \mu} e^{-\frac{\xi^2 + \eta^2}{2a_0 \nu}} (\xi \eta)^\mu \sin(\mu \varphi) {}_1F_1\left(-n_\xi, \mu + 1, \frac{\xi^2}{a_0 \nu}\right) {}_1F_1\left(-n_\eta, \mu + 1, \frac{\eta^2}{a_0 \nu}\right). \quad (5.21)$$

En el caso de las Ecs. (9) en coordenadas esferoidales prolatas, las eigenfunciones se expresan como el producto de la eigenfunción del ángulo diedro de la Ec. (5.13), los factores que remueven las singularidades en ($u = 1, v = \pm 1$), el factor exponencial que domina asintóticamente, y dos factores polinomiales en u y v [12] en la forma

$$\psi_{n_u n_v \mu}(u, v, \varphi) = N_{n_u n_v \mu} e^{-\frac{f(u+v)}{\nu a_0}} \left[f \sqrt{(u^2 - 1)(1 - v^2)} \right]^\mu \sin(\mu \varphi) S_{n_u}^\mu(u) S_{n_v}^\mu(v). \quad (5.22)$$

Los polinomios tienen la misma forma

$$S_{n_u}^\mu(u) = \sum_{s=0}^{n_u + n_v} c_s (u - 1)^s, \quad S_{n_v}^\mu(v) = \sum_{s=0}^{n_u + n_v} c_s (v - 1)^s, \quad (5.23)$$

con coeficientes comunes c_s para satisfacen la relación de recurrencia de tres términos

$$\frac{2f}{a_0 \nu} (n_u + n_v + 1 - s) c_{s-1} + \left[s \left(s + 2\mu + 1 - \frac{4f}{a_0 \nu} \right) - A^{n_u n_v} \right] c_s + 2(s+1)(s + \mu + 1) c_{s+1} = 0. \quad (5.24)$$

La constante $A^{n_u n_v}$ está dada por

$$A^{n_u n_v} = A + \frac{f^2}{a_0^2 \nu^2} - \left(\frac{2f}{a_0 \nu} \right) (\nu - \mu - 1) - \mu(\mu + 1), \quad (5.25)$$

donde A es el constante de separación original y

$$\nu = n_u + n_v + \mu + 1 \quad (5.26)$$

entonces $\nu - \mu = n_u + n_v + 1$, y los eigenvalores de la energía están dados por la Ec. (5.16).

La relación de recurrencia de tres términos en la Ec. (5.24) se puede reescribir como una ecuación de eigenvalores con una matriz tridiagonal, siguiendo el método usando en las referencias [19-21]. La diagonalización de tal matriz rinde los eigenvalores ordenados $A_i^{n_u n_v}$, $i = 1, 2, \dots, n_u + n_v$ y los eigenvectores o coeficientes de expansión $c_s(A_i^{n_u n_v})$. El primer término en la Ec. (5.24) asegura que los coeficientes con $s = n_u + n_v + 1$, y más grandes se anulan, reflejando la naturaleza de polinomio de las Ecs. (5.23). De los $n_u + n_v$ ceros de cada conjunto complementario de polinomios con el mismo valor de $A_i^{n_u n_v}$, n_v está en el rango $-1 < v < 1$ y n_u está en el rango $1 < u < \infty$.

Comparar las Ecs. (5.14), (5.21) y (5.22) para las eigenfunciones en los sistemas de coordenadas respectivos permite la identificación de sus factores comunes $\rho^\mu \sin(\mu\varphi)$ de coordenadas circulares, los cuales también comparten con el átomo de hidrógeno en 2D [18]. Ellos también comparten el factor exponencial que gobierna el comportamiento asintótico para las separaciones de electrón núcleo grandes, y determinado por la etiqueta cuántica principal ν . Conforme a las Ecs(5.16), (5.15), (5.20) y (5.26) para un valor dado de μ , los estados con $n_r + n_\theta = n_\xi + n_\eta = n_u + n_v$ también comparten la misma energía y la degeneración correspondiente es $D = n_r + n_\theta + 1 = n_\xi + n_\eta + 1 = n_u + n_v + 1$. Las diferencias entre los eigenestados en cada sistema de coordenadas se asocian con el número de nodos en las coordenadas radial y angular polar, parabólicas ξ y η , y esferoidal e hiperboloidal, respectivamente. Nótese que las eigenfunciones $\psi_{00\mu}$, para todos los eigenvalores y excitaciones en φ , las Ecs. (5.12) contienen los factores comunes, que comparten con las eigenfunciones con excitaciones en los otros dos grados de libertad $\psi_{n_1 n_2 \mu}(q_1, q_1, \mu)$ en los tres sistemas de coordenadas, incluyendo la constante de normalización común:

$$N_{00\mu} = \sqrt{\frac{2}{\frac{\varphi_0}{2} (a_0 \nu)^{3+2\mu} \Gamma(2+\mu) \Gamma(1+\mu)}} \quad (5.27)$$

Sus dependencias en las coordenadas respectivas involucran los factores compartidos con los eigenestados $\psi_{n_r n_\theta \mu}^S(r, \theta, \varphi)$, $\psi_{n_\xi n_\eta \mu}^P(\xi, \eta, \varphi)$ y $\psi_{n_u n_v \mu}^{PS}(u, v, \varphi)$ con excitaciones en los primeros grados de libertad. Los factores restantes para estos últimos están ilustrados

explícitamente en la tabla 5.1 para las excitaciones bajas $n_1 + n_2 = 1, 2$ en coordenadas esféricas y parabólicas. De hecho, cada entrada involucra los factores extras para los constantes de normalización y los polinomios en los primeros grados de libertad, comparado con los estados $\psi_{00\mu}$, de acuerdo con las Ecs. (5.14) y (5.21)

Tabla 5. 1 Razón de constantes de normalización $N_{n_1 n_2 \mu} / N_{00\mu}$ y factores polinomiales para algunos estados excitados

Estados	Coordenadas esféricas	Coordenadas parabólicas
01μ	$\frac{2}{\sqrt{2+\mu}} \frac{r \cos \theta}{a_0 v}$	$\frac{1+\mu}{\sqrt{2+\mu}} \left(1 - \frac{\eta^2}{a_0 v (1+\mu)} \right)$
10μ	$\frac{2(1+\mu)}{\sqrt{2+\mu}} \left(1 - \frac{r}{a_0 v (1+\mu)} \right)$	$\frac{1+\mu}{\sqrt{2+\mu}} \left(1 - \frac{\xi^2}{a_0 v (1+\mu)} \right)$
02μ	$\frac{\sqrt{4(1+\mu)}}{\sqrt{(2+\mu)(3+\mu)(3+2\mu)}} r^2 \frac{[-1+(3+2\mu)\cos^2\theta]}{(a_0 v)^2 (1+\mu)}$	$\frac{(1+\mu)\sqrt{2+\mu}}{\sqrt{3+\mu}} \left(1 - \frac{2\eta^2}{a_0 v (1+\mu)} + \frac{\eta^4}{a_0^2 v^2 (2+\mu)(1+\mu)} \right)$
11μ	$\frac{\sqrt{8} r \cos \theta}{a_0 v} \left(1 - \frac{r}{a_0 v (2+\mu)} \right)$	$\frac{(1+\mu)\sqrt{2(1+\mu)}}{\sqrt{3+\mu}} \left(1 - \frac{\eta^2}{a_0 v (1+\mu)} \right) \left(1 - \frac{\xi^2}{a_0 v (1+\mu)} \right)$
20μ	$\frac{\sqrt{2(1+\mu)^3(3+2\mu)}}{3+\mu} \left(1 - \frac{2r}{a_0 v (1+\mu)} + \frac{2r^2}{a_0^2 v^2 (1+\mu)(3+2\mu)} \right)$	$\frac{(1+\mu)\sqrt{2+\mu}}{\sqrt{3+\mu}} \left(1 - \frac{2\xi^2}{a_0 v (1+\mu)} + \frac{\xi^4}{a_0^2 v^2 (2+\mu)(1+\mu)} \right)$

La comparación de las entradas para $n_1 = 0, n_2 = 1$ y $n_1 = 1, n_2 = 0$ nos lleva a las conexiones explícitas entre los estados esféricos y parabólicos respectivos, involucrando la diferencia y la suma de los últimos, respectivamente:

$$\begin{pmatrix} \psi_{01\mu}^S \\ \psi_{10\mu}^S \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{01\mu}^P \\ \psi_{10\mu}^P \end{pmatrix} \quad (5.28)$$

Similarmente, para los estados 02, 11, 20, es sencillo pero más laborioso establecer sus relaciones correspondientes:

$$\begin{pmatrix} \psi_{02\mu}^S \\ \psi_{11\mu}^S \\ \psi_{20\mu}^S \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1+\mu}{2(3+2\mu)}} & -\sqrt{\frac{2+\mu}{3+2\mu}} & \sqrt{\frac{1+\mu}{2(3+2\mu)}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \sqrt{\frac{2+\mu}{2(3+2\mu)}} & \sqrt{\frac{1+\mu}{3+2\mu}} & \sqrt{\frac{2+\mu}{2(3+2\mu)}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{02\mu}^P \\ \psi_{11\mu}^P \\ \psi_{20\mu}^P \end{pmatrix} \quad (5.29)$$

Los lectores pueden reconocer la ortonormalidad de las matrices de transformación.

La información complementaria para las eigenfunciones en las coordenadas esferoidales para $n_u + n_v = 1, 2$, limitada a los factores polinomiales se presenta en lo siguiente. Para los estados $n_u = 0, n_v = 1$ y $n_u = 1, n_v = 0$, las formas en común son:

$$\left[1 + \frac{(u-1)A_i}{2(1+\mu)} \right] \left[1 + \frac{(v-1)A_i}{2(1+\mu)} \right] \quad (5.30)$$

donde $A_i^{n_u n_v}$ con $i = 1, 2$ son raíces ordenadas de la ecuación cuadrática:

$$A^2 - \left(2\mu + 2 - \frac{4f}{a_0\nu} \right) A - \frac{4f}{a_0\nu} (\mu + 1) = 0. \quad (5.31)$$

Similarmente, los estados 02, 11, 20 tienen la forma

$$\left[1 + \frac{(u-1)A_i}{2(1+\mu)} - \frac{(u-1)^2 [A_i - 2(1+\mu)][4f + A_i\nu]}{8(1+\mu)(2+\mu)\nu} \right] \left[1 + \frac{(v-1)A_i}{2(1+\mu)} - \frac{(v-1)^2 [A_i - 2(1+\mu)][4f + A_i\nu]}{8(1+\mu)(2+\mu)\nu} \right] \quad (5.32)$$

con $i = 1, 2, 3$, respectivamente; y los eigenvalores $A_i^{n_u n_v}$ son raíces de la ecuación cúbica:

$$A^3 + \left(-8 - 6\mu + \frac{12f}{a_0\nu} \right) A^2 + \left[12 + 20\mu + 8\mu^2 - \frac{16f(3\mu+4)}{a_0\nu} + \frac{32f^2}{(a_0\nu)^2} \right] A + \frac{16f(1+\mu)(2\mu+3)}{a_0\nu} - \frac{64f^2(1+\mu)}{(a_0\nu)^2} = 0 \quad (5.33)$$

La evolución de las constantes de normalización es más fácil de hacer numéricamente y no se incluye aquí.

Las relaciones correspondientes entre los productos de polinomios esféricos y esferoidales prolatos se ilustra explícitamente con las contrapartes de las matrices en las ecuaciones (5.30) y (5.32) :

$$\left(\begin{array}{cc} \frac{2(1+\mu)}{f(A_2 - A_1)} \left[A_2 - \frac{A_2^2}{2(1+\mu)} \right] & - \frac{2(1+\mu)}{f(A_2 - A_1)} \left[A_1 - \frac{A_1^2}{2(1+\mu)} \right] \\ \frac{A_2^2}{2(1+\mu)(A_2 - A_1)} & - \frac{A_1^2}{2(1+\mu)(A_2 - A_1)} \end{array} \right) \quad (5.34)$$

$$\left(\begin{array}{ccc} -8(1+\mu) \frac{\{2(1+\mu)[4+3\mu - (A_2 + A_3)] + A_2 A_3\}}{(A_1 - A_2)(A_1 - A_3)} & 8(1+\mu) \frac{\{2(1+\mu)[4+3\mu - (A_3 + A_1)] + A_3 A_1\}}{(A_1 - A_2)(A_1 - A_3)} & 8(1+\mu) \frac{\{2(1+\mu)[4+3\mu - (A_3 + A_1)] + A_3 A_1\}}{(A_1 - A_2)(A_1 - A_3)} \\ \frac{8f(1+\mu)[A_2 - 2(1+\mu)][A_3 - 2(1+\mu)]}{(A_1 - A_2)(A_1 - A_3)(A_1 + 2f)[A_1 - 2(1+\mu)]} & \frac{8f(1+\mu)[A_3 - 2(1+\mu)][A_1 - 2(1+\mu)]}{(A_1 - A_2)(A_1 - A_3)(A_1 + 2f)[A_1 - 2(1+\mu)]} & \frac{8f(1+\mu)[A_1 - 2(1+\mu)][A_2 - 2(1+\mu)]}{(A_1 - A_2)(A_3 - A_2)(A_3 + 2f)[A_3 - 2(1+\mu)]} \\ \frac{16f^2(2+\mu)[A_2 A_3 + 4f(1+\mu)]}{(A_1 - A_2)(A_1 - A_3)(A_1 + 2f)(3+2\mu)[A_1 - 2(1+\mu)]} & \frac{16f^2(2+\mu)[A_3 A_1 + 4f(1+\mu)]}{(A_1 - A_2)(A_2 - A_3)(A_2 + 2f)(3+2\mu)[A_2 - 2(1+\mu)]} & \frac{16f^2(2+\mu)[A_1 A_2 + 4f(1+\mu)]}{(A_1 - A_3)(A_2 - A_3)(A_3 + 2f)(3+2\mu)[A_3 - 2(1+\mu)]} \end{array} \right) \quad (5.35)$$

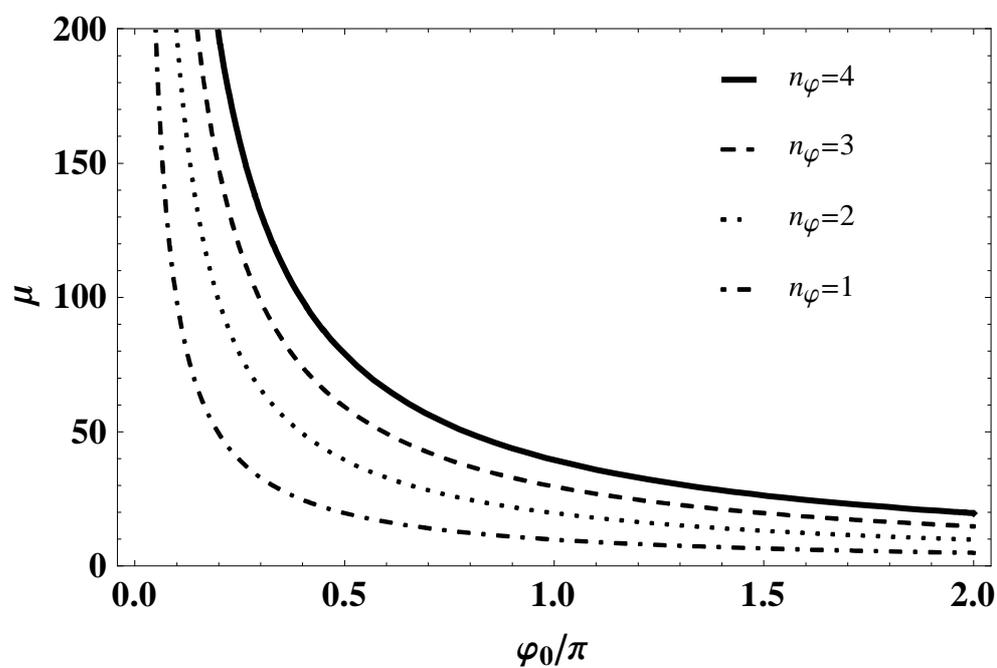
Notase las mismas formas de las entradas con los intercambios apropiados de A_1, A_2 y A_1, A_2, A_3

Las variaciones de la etiqueta cuántica μ de la componente z del momento angular de los niveles de energía más bajos como funciones de la apertura del ángulo diedro φ_0/π se ilustran en la Fig. 5.1, en base de las Ecs. (5.12) y (5.15). Ellas son compartidas por las eigenfunciones en los tres sistemas de coordenadas.

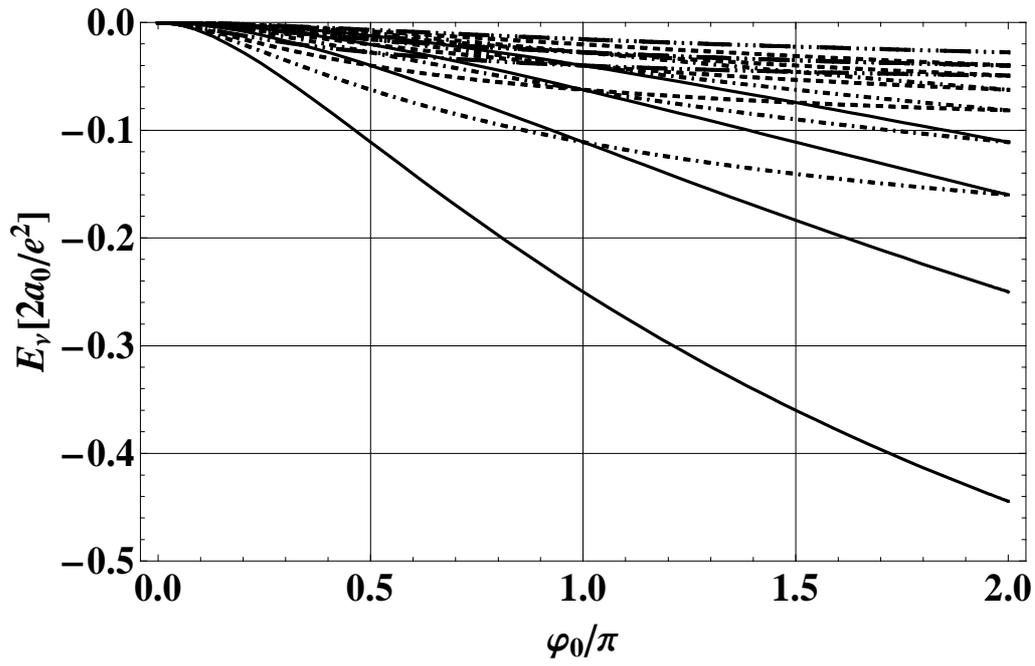
Figura 5.1a) muestra la relación de proporción inversa de la Ec. (5.12) para los valores sucesivos del número cuántico n_φ . Figura 5.1b) ilustra el conjunto de los niveles de energía bajos de la Ec. (5.16) empezando desde el lado derecho para la apertura más grande $\varphi_0 = 2\pi$, los números cuánticos y degeneraciones $n_1 n_2 n_\varphi (D)$ están sucesivamente 001(D=1); 002 (D=1); 011, 101, 003 (D=3); 012, 102, 004 (D=3); 013, 103, 021, 111, 201, 005 (D=6); 022, 112, 202, 014, 104, 006 (D=6); para la apertura del ángulo diedro en el lado derecho. El número de puntos en cada línea corresponde a la excitación de los primeros dos grados de libertad. A medida que la apertura se reduce, los niveles de energía aumentan debido al efecto creciente de confinamiento; partes de los estados con diferentes números de puntos; las degeneraciones de los estados con $n_1 + n_2$ que mantenga fijo. Por ejemplo, para $\varphi_0 = 3\pi/2$, el orden y la degeneración de los niveles son: 001 (D=1); 002 (D=1); 011, 101 (D=2); 003 (D=1); 012, 102 (D=2); 004, 021, 111, 201 (D=4). Cuando el ángulo diedro sea el plano $x-z$ de Levine para $\varphi_0 = \pi$, los estados sucesivos y sus degeneraciones son: 001 (D=1); 002, 011, 101 (D=3); 003, 012, 102, 021, 111, 201 (D=6); 004, 013, 103, 022, 112, 202, 031, 121, 211, 301 (D=10). El registro de los niveles y la degeneración aumentada para algunos de ellos refleja la simetría rotacional alrededor el eje- y asociado con el plano de Levine. Cuando la apertura del ángulo diedro se hace más pequeño $\varphi_0 < \pi$, les llama la atención a los lectores a notar la cruza de nivel y el traslado de degeneraciones, derivado del cambio de $\varphi_0 > \pi$ a $\varphi_0 < \pi$ desde la derecha a la mitad izquierda de la figura y el cambio de la consecuencia en el orden de los niveles de energía. Para $\varphi_0 = \pi/2$ el orden y la degeneración de los niveles son: 001 (D=1); 011, 101 (D=2); 002, 021, 111, 201 (D=4); 012, 102, 031, 121, 211, 301 (D=6); 003, 022, 112, 202 (D=4); 013, 103, 032, 122, 212, 302 (D=6); 004, 023, 113, 203 (D=4). Para aperturas todavía más pequeñas, $\varphi_0 \rightarrow 0$, el valor de μ aumenta hasta infinitud; el mismo pasa con ν , y por lo tanto las energías tienden asintóticamente a cero como se muestran en el lado izquierdo de

la figura. En tal límite, todos los niveles se vuelven infinitamente degenerados en el umbral de ionización. Este comportamiento se exhibe por todos los niveles del átomo hidrógeno confinado en espacios semi-infinitos con otros límites [23].

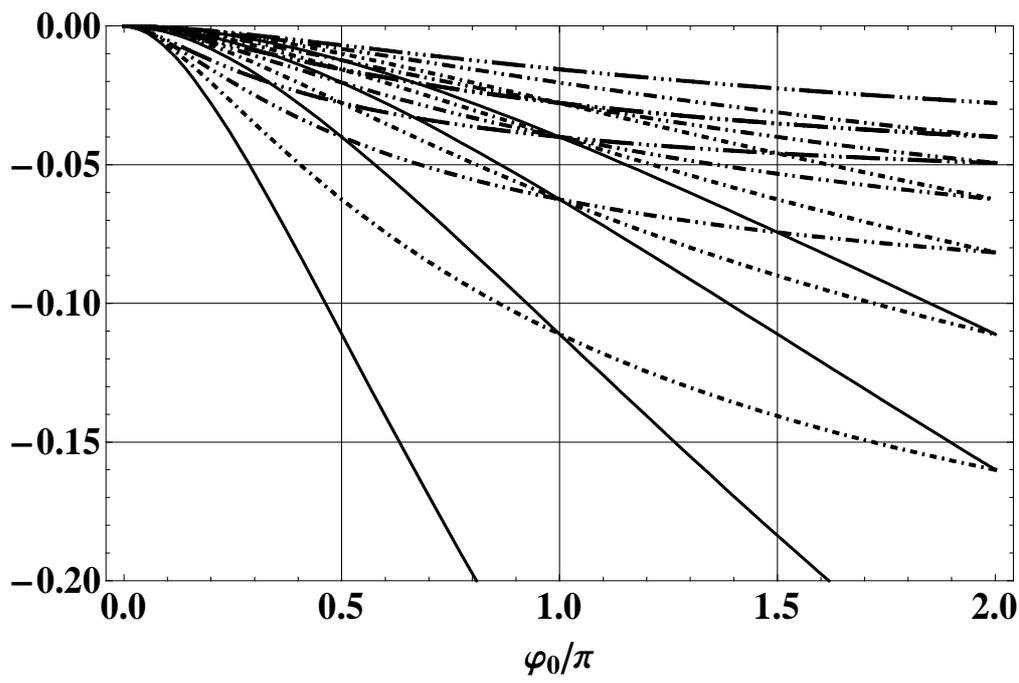
Las figuras 5.1c) y 5.1d) son ampliaciones de porciones de la figura 5.1b) ilustrando conjuntos de los niveles de energía excitados altos. El lector puede identificar sus números cuánticos respectivos y degeneraciones, y apreciar los números aumentados de la cruz del nivel de energía para diferentes valores de la apertura del ángulo diedro. Estas degeneraciones y su número acumulativo de estados para cada valor de φ_0 son importantes para formular el principio de Aufbau para átomos con muchos electrones en la situación correspondiente de confinamiento.



a)



b)



c)

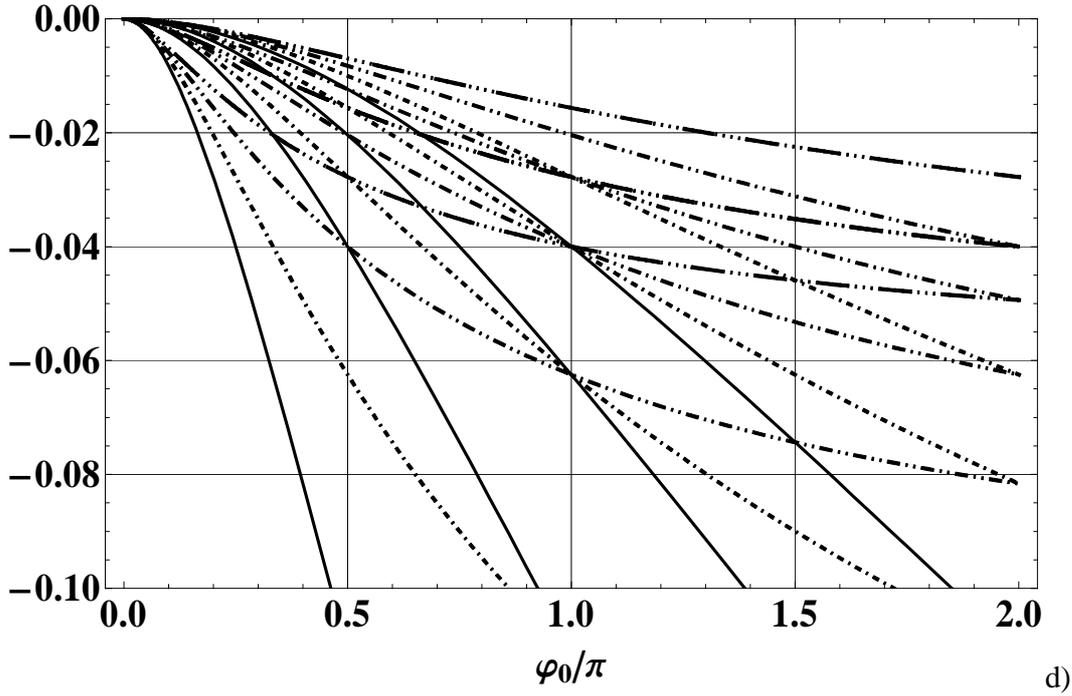


Figura 5. 1: **a)** Eigenvalor de la componente z del momento angular $\mu(\varphi_0/\pi)$, **b)** Espectro de energía $E_{n_1 n_2 n_\varphi} [e^2/2a_0]$ y las ampliaciones para **c)** $0.2 < E_v < 0$ y **d)** $0.1 < E_v < 0$ para $n_1 + n_2 = 0$ (—), $n_1 + n_2 = 1$ (---), $n_1 + n_2 = 2$ (····), $n_1 + n_2 = 3$ (-·-·-).

5.4 Distribuciones de presión y momento dipolar eléctrico para el átomo de hidrógeno

Esta sección contiene la evaluación de dos propiedades del átomo hidrógeno debido a su confinamiento. Primero se evalúa la distribución de presión en las paredes del ángulo diedro de confinamiento para los estados 00μ , 01μ y 10μ del átomo de hidrógeno en los tres sistemas de coordenadas, usando las ecuaciones de cambio en mecánica cuántica de Hirschfelder [22]. El segundo, el momento dipolar eléctrico para los mismos estados, asociado con el rompimiento de la simetría rotacional alrededor de eje-z debido a la presencia del ángulo de confinamiento también se evalúa.

La presión promedio en un sistema cuántico confinado en un volumen finito se identifica con la tasa de cambio de su energía con respecto al cambio en el volumen de confinamiento. Este concepto cuando se aplica al átomo de hidrógeno confinado en un

espacio semi-infinito produce un valor nulo para la presión promedio porque el cambio de energía es finito cuando la frontera cambia su posición mientras el cambio en volumen es infinito. Aquí adoptamos el concepto de distribución de presión en la frontera de confinamiento, asumiendo que la última se divide en elementos de área $h_1\Delta q_1 h_2\Delta q_2$ con cilindros asociados con altura infinitesimal $h_3\Delta q_3$. Para tales cilindros con volúmenes infinitesimales, la presión correspondientes se expresa como

$$p(q_1, q_2, q_3) = -\frac{1}{h_1 h_2 \Delta q_1 \Delta q_2} \frac{1}{h_3} \frac{\partial}{\partial q_3} \left[\varepsilon(q_1, q_2, q_3) \Delta q_1 \Delta q_2 \right] \Big|_{q_3=q_{30}} \quad (5.36)$$

donde $\varepsilon(q_1, q_2, q_3)$ es la energía asociada, tal que

$$\varepsilon(q_1, q_2, q_3) \Delta q_1 \Delta q_2 = \int_0^{q_{30}} h_1 h_2 h_3 dq_3 \psi^* \hat{H} \psi \Delta q_1 \Delta q_2 \quad (5.37)$$

En el caso específico de confinamiento en ángulos diedros con $q_{30} = \varphi_0$, los factores de escala en las Ecs.(5.36) y (5.37) no dependen de la variable φ ; consecuentemente su presencia en la Ec.(5.36) cuando la Ec. (5.37) se sustituye, da un cociente de uno. Además el hamiltoniano \hat{H} al operar sobre sus eigenfunciones $\psi_{n_1 n_2 \mu}$ da las mismas eigenfunciones multiplicadas por el eigenvalor de energía $E_v(\varphi_0)$ como una función de la apertura del ángulo diedro. Por lo tanto la evaluación de la presión en la Ec.(5.36) se reduce a la evaluación numérica de la derivada,

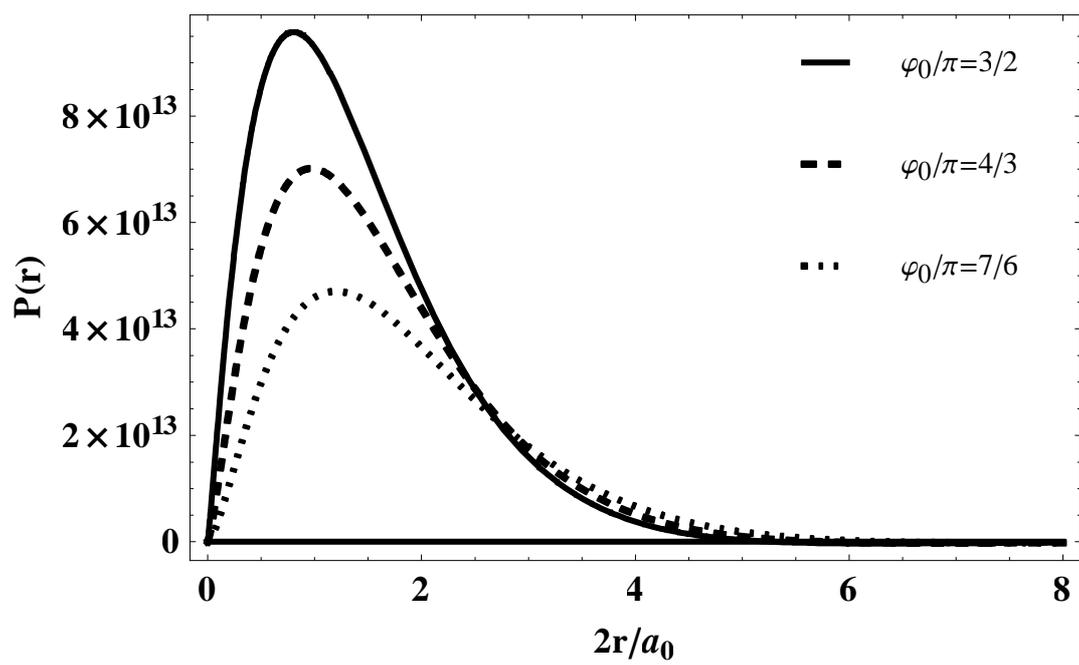
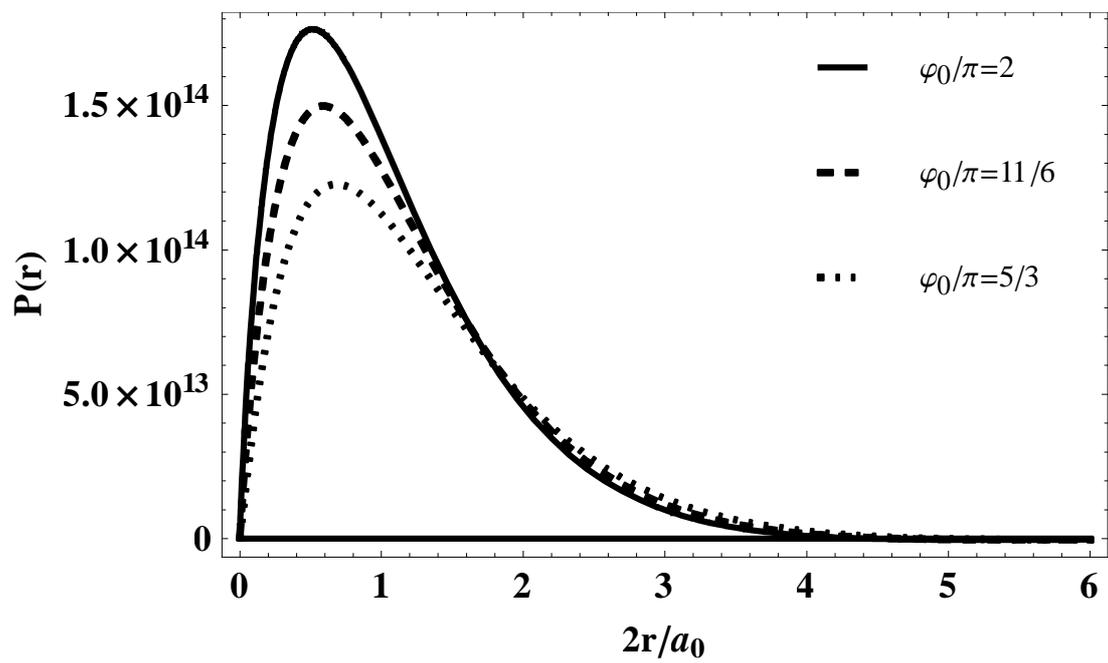
$$p(q_1, q_2, \varphi_0) = \frac{\partial}{\partial \varphi_0} \left[E_v(\varphi_0) \psi_{n_1 n_2 \mu}^*(q_1, q_2, \varphi_0) \psi_{n_1 n_2 \mu}(q_1, q_2, \varphi_0) \right] \quad (5.38)$$

La tabla 5.2 y las Figuras 5.2-5.5 ilustran los valores numéricos de la distribución de presión para estados $00\mu, 01\mu, 10\mu$ en las coordenadas sucesivas para los ángulos de confinamiento $\varphi_0 = \pi/2, \pi, 3\pi/2$ y 2π . Las entradas en la tabla contienen la presión máxima, la posición correspondiente $q_{1\max}$, y la posición en donde la presión se anula q_{10} , en posiciones escogidas en q_2 .

Tabla 5. 2 Distribución de presión para estados bajos en tres sistemas de coordenadas

Los estados bajos	φ_0/π	1/2	1	3/2	2
$S : 00\mu$ en $\theta = \pi/6$	$P_{\max} [10^{13} \text{pa}]$	0.097935	2.87159	9.57853	17.6420
	$r_{\max}[2r/a_0]$	4.95800	1.53800	0.81000	0.51390
	$R_0[2r/a_0]$	15.0365	7.29019	5.31829	4.44664
$S : 01\mu$ en $\theta = \pi/6$	$P_{\max} [10^9 \text{pa}]$	0.409302	2.61103	3.92984	4.21405
	$r_{\max}[2r/a_0]$	10.1060	4.85300	3.51800	2.92800
	$R_0[2r/a_0]$	23.9121	13.6544	10.8319	9.53006
$S : 10\mu$ en $\theta = \pi/6$	$P_{\max} [10^9 \text{pa}]$	0.223558	3.31064	7.97022	11.7285
	$r_{\max}[2r/a_0]$	4.18800	1.32560	0.69800	0.44690
	$R_0[2r/a_0]$	8.49677	3.87037	2.72494	2.22524
$P : 01\mu$ en $\eta/\sqrt{a_0} = 1.2$	$P_{\max} [10^8 \text{pa}]$	4.36167	53.8539	84.3179	90.2903
	$\xi_{\max} [\xi/\sqrt{a_0}]$	1.8210	0.9380	0.6578	0.4986
	$\xi_0 [\xi/\sqrt{a_0}]$	3.0067	1.95444	1.59566	1.41341
$PS : 01\mu$ con $f/a_0 = 1.2$ en $v = 0.5$	$P_{\max} [10^{11} \text{pa}]$	9.33262	27.4735	35.861	36.6268
	u_{\max}	8.0170	3.8790	2.7890	2.2830
	u_0	16.1573	9.59709	7.77068	6.9096
$PS : 10\mu$ con $f/a_0 = 0.6$ en $v = 0.5$	$P_{\max} [10^{12} \text{pa}]$	1.15945	4.87012	25.4137	6.74402
	u_{\max}	6.70000	2.38900	1.2190	1.5896
	u_0	12.6917	5.74147	4.0493	3.32243

Las figuras proporcionan más detalles para la presión como función de q_1 , para los valores seleccionados de q_2 y φ_0/π .



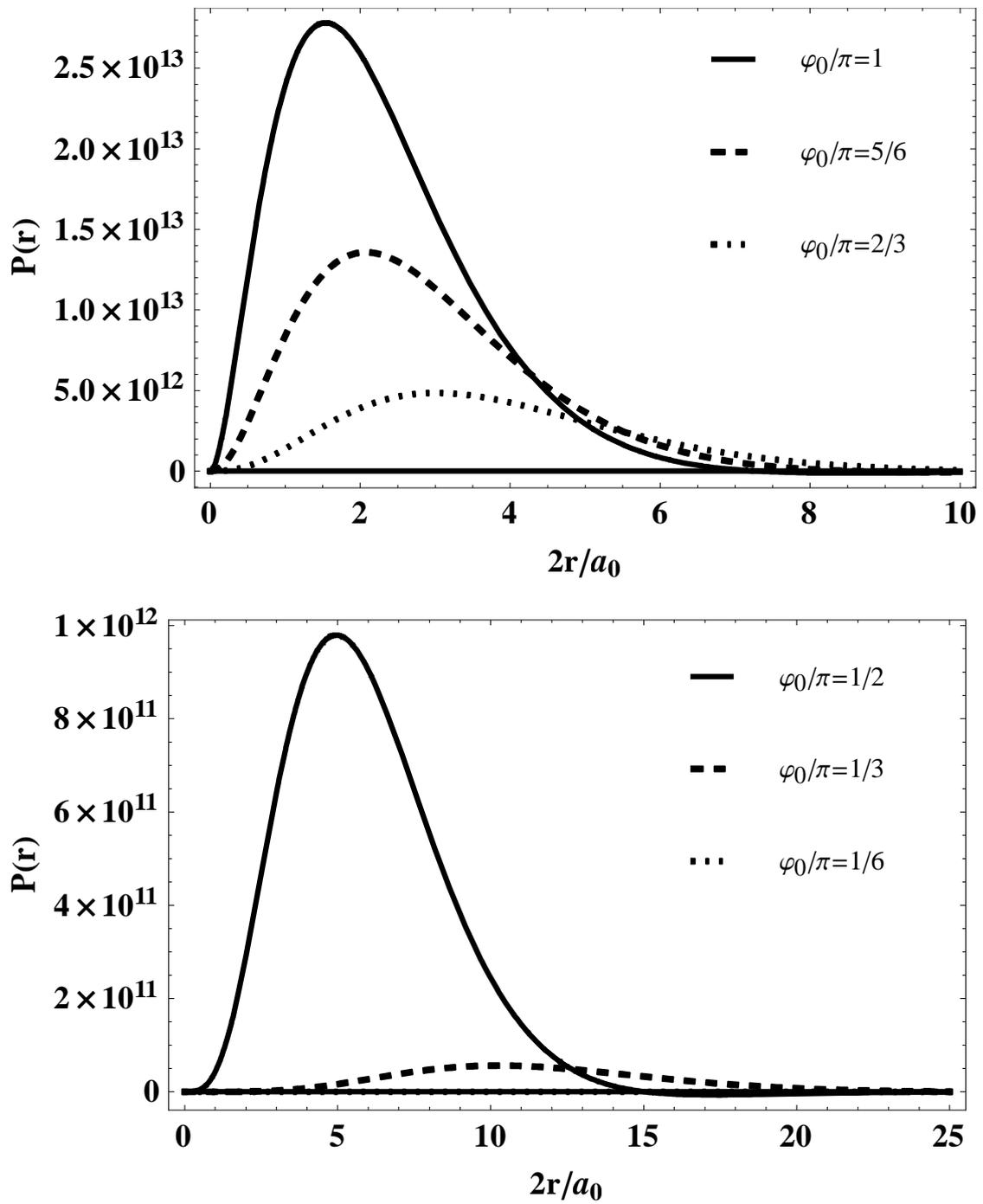


Figura 5. 2: Presión como función de r y φ_0/π en $\theta = \pi/6$ para los estados 001 en coordenadas esféricas.

Para los estados excitados bajos, las distribuciones de presión se ilustran en las figuras 4-6.

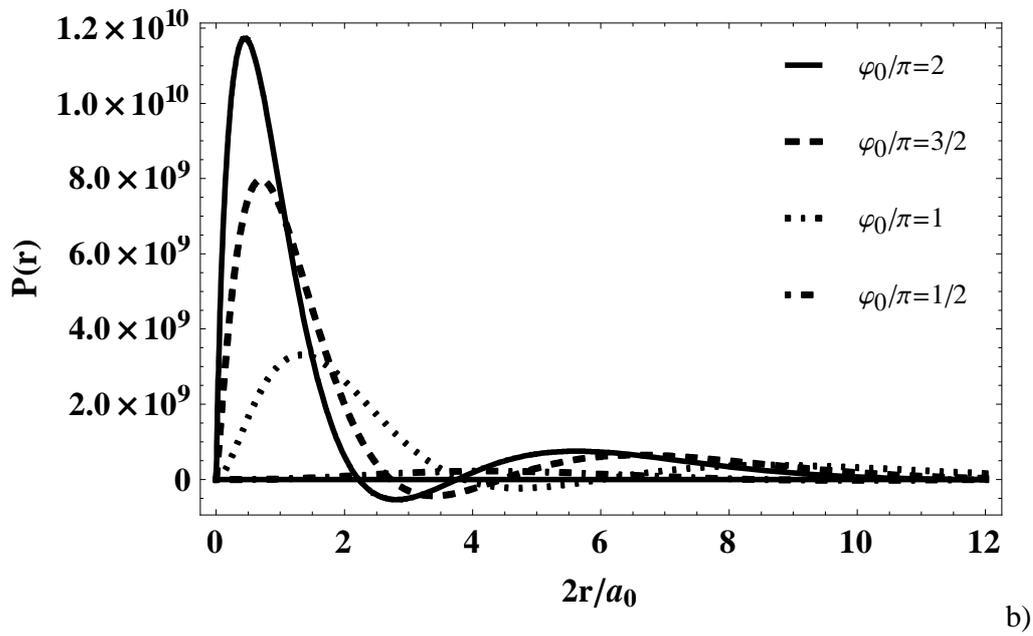
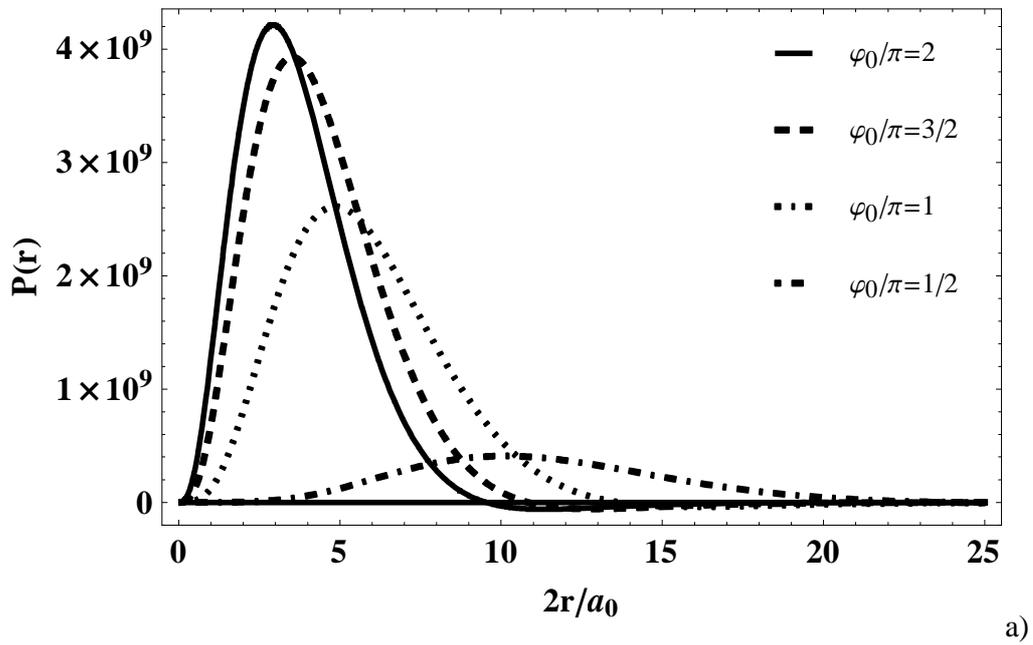


Figura 5. 3: Presión como función de r y φ_0/π en $\theta = \pi/6$ en sistema de coordenadas esféricas para **a)** Estado 011, y para **b)** Estado 101.

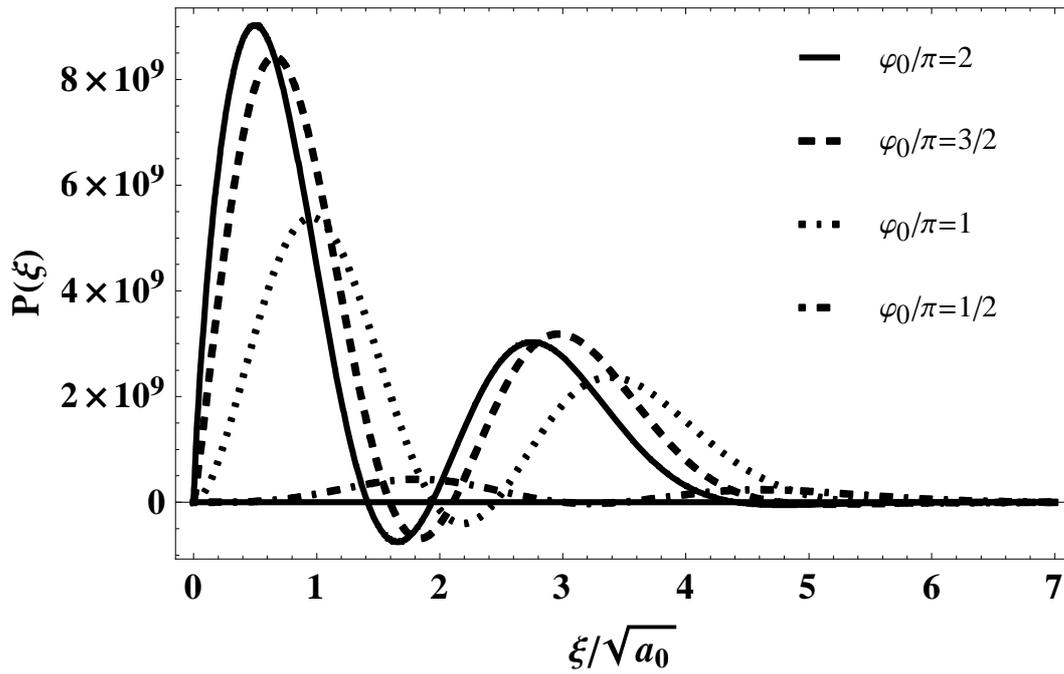


Figura 5. 4: Presión como función de ξ y φ_0/π en $\eta/\sqrt{a_0} = 1.2$ para el estado 011 en el sistema de coordenadas parabólicas para el estado 101, la misma figura es válida intercambiando los papeles de ξ y η .

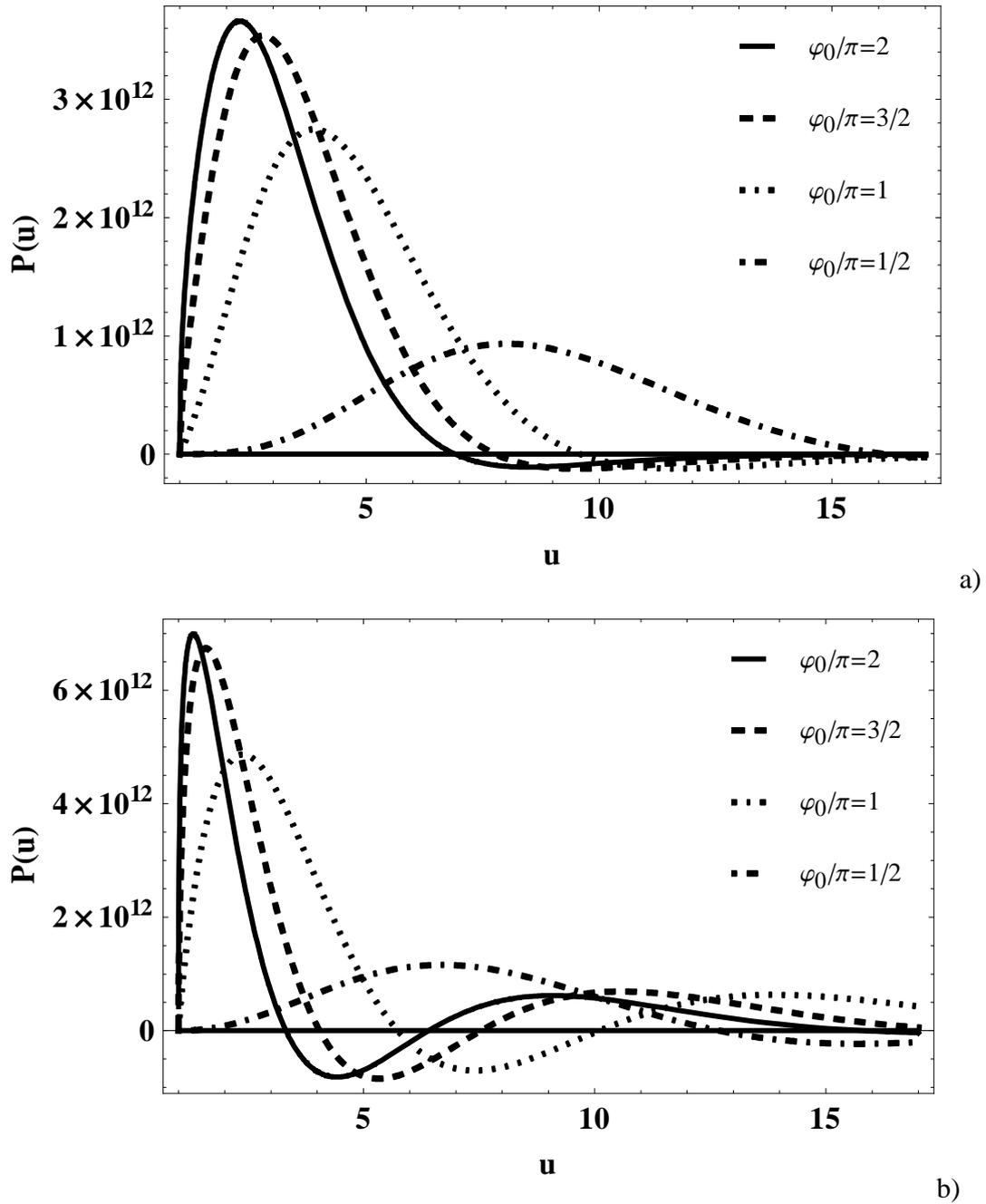


Figura 5. 5: Presión como función de u y φ_0/π en el sistema de coordenadas esferoidal prolata en $v = 0.5$ con **a)** Estado 011 con $f/a_0 = 1.2$ y **b)** Estado 101 con $f/a_0 = 0.6$.

Los lectores pueden notar que los valores grandes positivos de la presión alternan con valores pequeños negativos. Los últimos corresponden a tensiones que se han reportado para confinamiento del átomo de hidrógeno en su estado base en conos elípticos [13]. En el

presente trabajo, evaluamos la presión para estados excitados para establecer que la alternación de sus valores y signos es un comportamiento común, pero que no había sido notado antes.

Ahora vemos la evaluación del momento dipolar. El momento dipolar eléctrico de nuestro interés es el valor de expectación del operador $\vec{d} = -e\vec{r}$, donde \vec{r} es el vector de posición del electrón desde el núcleo, para los eigenestados $00\mu, 01\mu$ y 10μ en las coordenadas sucesivas.

$$\langle \psi_{n_1 n_2 \mu} | \vec{d} | \psi_{n_1 n_2 \mu} \rangle = -e \langle \psi_{n_1 n_2 \mu} | \hat{i} x + \hat{j} y + \hat{k} z | \psi_{n_1 n_2 \mu} \rangle. \quad (5.39)$$

El uso de la Ec.(5.2) para las transformación de coordenadas y la Ecs.(5.3) para los factores de escala indica que los valores de expectación involucran integrales sobre dq_1, dq_2 y $d\varphi$.

La última aparece en las formas comunes:

$$-e \frac{2}{\varphi_0} \left\{ \frac{4\mu^2 \sin(\varphi_0/2)}{4\mu^2 - 1} [\hat{i} \cos(\varphi_0/2) + \hat{j} \sin(\varphi_0/2)] I_{\perp}(n_1 n_2) + \hat{k} I_z(n_1 n_2) \right\}, \quad (5.40)$$

donde $I_{\perp}(n_1 n_2)$ y $I_z(n_1 n_2)$ son las integrales en los primeros grados de libertad en las coordenadas respectivas. Los subíndices se refieren a las componentes transversal y axial de nuestro interés. La componente transversal está en la dirección del vector unitario de la bisectriz del ángulo diedro con la magnitud del factor anterior que coincide con aquella del átomo de hidrógeno en dos dimensiones confinado por el mismo ángulo [18].

Las integrales transversales $I_{\perp}(n_1 n_2)$ involucran los valores de expectación de la coordenada circular radial ρ , y las integrales longitudinales involucran el valor de expectación de z . En coordenadas esféricas, los eigenestados tienen una paridad bien definida, la cual se traduce en la anulación de I_z . La integral radial conduce a funciones Gamma y la integral sobre el ángulo polar conduce funciones Beta, similar a las que aparecen en la evaluación de las constantes de normalización. En coordenadas parabólicas los estados 01μ tiene valores negativos de I_z de modo que $\langle \vec{d}_z \rangle$ apunta en la dirección positiva de z ; por otro lado, los estados 10μ tienen un valor positivo y $\langle \vec{d}_z \rangle$ apunta hacia abajo. Las dos comparten las mismas magnitudes de sus componentes transversales y axiales. Para las coordenadas esferoidales prolatas, las integrales son evaluadas numéricamente.

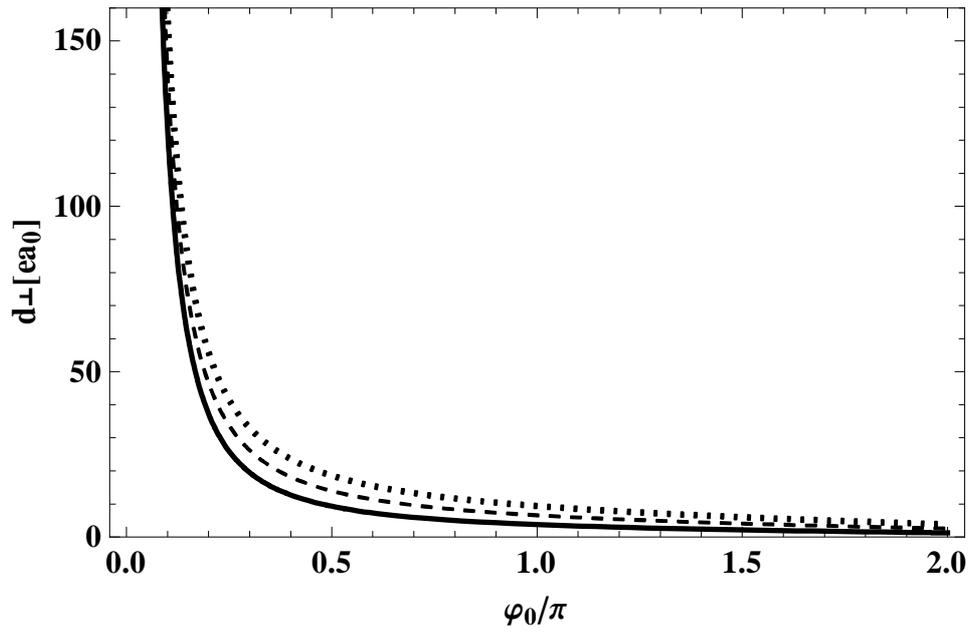
Los datos sobre las componentes transversales y longitudinales del momento dipolar eléctrico para estados 001, 011 y 101 se ilustran en las columnas y renglones sucesivas para $0 < \varphi_0/\pi < 2$. Los valores para el estado 001 son comunes para los tres sistemas de coordenadas, mostrando el comportamiento creciente desde valores pequeños a mayores a medida que la apertura del ángulo diedro se reduce desde su valor máximo a su mínimo. Los mismos comportamientos cualitativos se reconocen para las componentes transversales en los otros estados en las diferentes coordenadas; sus cambios cuantitativos se describen por

$$\begin{aligned}
 d_{\perp}^S(011) &\leq d_{\perp}^{PS}(011, f=0.5) < d_{\perp}^{PS}(011, f=5) < d_{\perp}^{PS}(011, f=100) \approx d_{\perp}^P(011) = d_{\perp}^P(101) \\
 &= \frac{1}{2} [d_{\perp}^S(011) + d_{\perp}^S(101)] \approx d_{\perp}^{PS}(101, f=100) < d_{\perp}^{PS}(101, f=5) < d_{\perp}^{PS}(101, f=0.1) \leq d_{\perp}^S(101)
 \end{aligned} \quad (5.41)$$

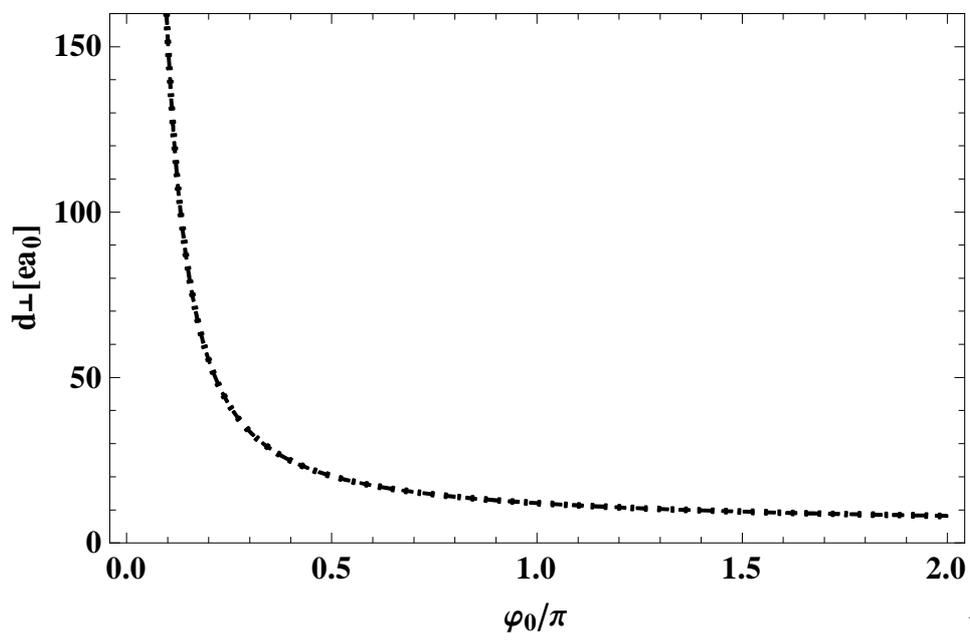
Las igualdades en el centro de estas relaciones son las consecuencias de las relaciones de la Ec.(5.28), como el lector puede corroborar en cada renglón de la tabla 5.3. Esta ilustra la interpolación que los estados en coordenadas esferoidales prolatas realizan entre los estados en coordenadas esféricas y parabolicas dependen de la variación de la distancia semifocal en su intervalo $0 \leq f < \infty$. Por el otro lado, las componentes longitudinales para los estados degenerados esferoidales prolatos 011 y 101 tienen la misma magnitud, pero apuntan en direcciones opuestas, arriba y abajo respectivamente, asegurando que las componentes correspondientes para los estados esferoidales se anulan, tomando la cuenta de las Ecs. (5.28) y (5.34).

Tabla 5. 3 Magnitud de las componentes de momento dipolar eléctrico transversal $d_{\perp}(\varphi_0)$ y longitudinal $d_z(\varphi_0)$ con unidad $[ea_0]$ para los estados 001,011 y 101 en las tres coordenadas como función de φ_0/π

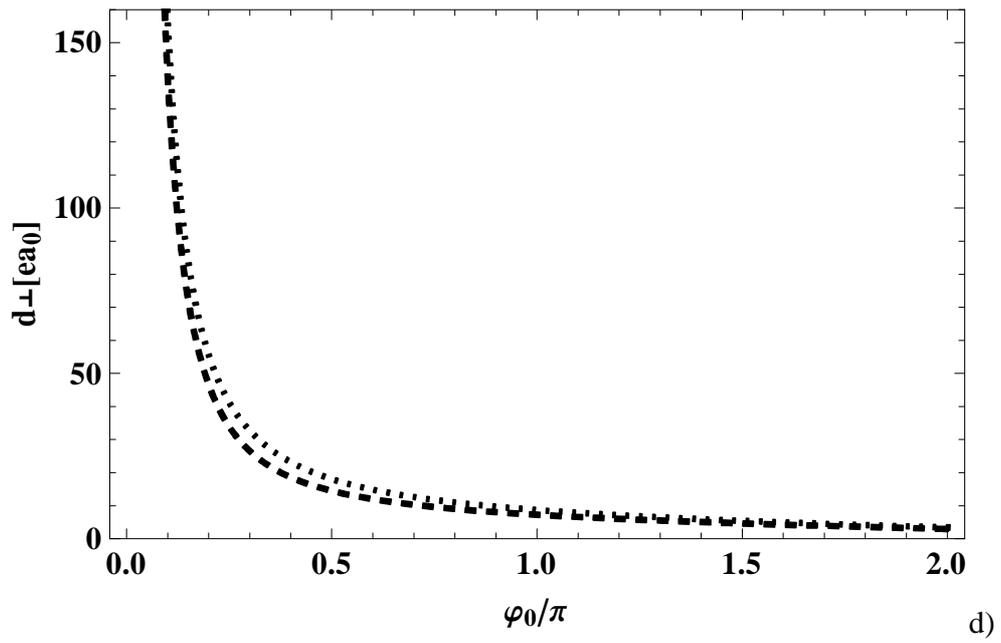
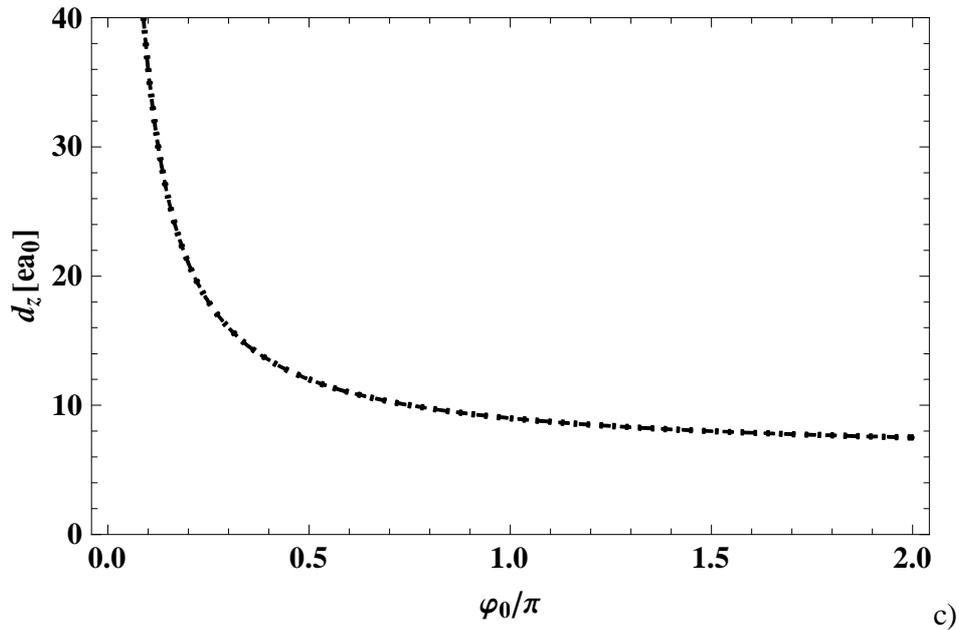
$\frac{\varphi_0}{\pi}$	$d[ea_0]$													
	001	S 011	S 101	P 011 y P 011		PS 011 y PS 101 (f=0.5 a ₀)			PS 01μ y PS 10μ (f=5 a ₀)			PS 01μ y PS 10μ (f=100 a ₀)		
	d_{\perp}	d_{\perp}	d_{\perp}	d_{\perp}	d_z	d_{\perp}	d_z	d_{\perp}	d_{\perp}	d_z	d_{\perp}	d_{\perp}	d_z	d_{\perp}
0.0	∞	∞	∞	∞	∞	∞	∞	∞	∞	∞	∞	∞	∞	∞
0.1	123.459	140.294	157.130	148.712	36	140.295	0.13636	157.13	140.319	1.35974	157.106	144.075	15.023	153.349
0.2	37.169	46.4619	55.7543	51.2081	21	46.4632	0.2499	55.753	46.5883	2.4320	55.6279	50.1532	10.2759	52.063
0.3	32.9736	26.2332	32.9789	29.6061	16	26.2364	0.3458	32.9758	26.5106	3.1769	32.7016	29.2189	7.94712	29.9932
0.4	12.7051	18.1501	23.5952	20.8726	13.5	18.1556	0.4277	23.5897	18.5743	3.6180	23.171	20.6589	6.72917	21.0864
0.5	9.2807	13.9212	18.5616	16.2414	12	13.9292	0.4982	18.5535	14.4589	3.8411	18.0238	16.1024	5.98923	16.3863
0.6	7.2565	11.3384	15.4202	13.3793	11	11.349	0.5595	15.4096	11.9524	3.9325	14.8061	13.2796	5.49344	13.4789
0.7	5.92949	9.59182	13.2542	11.423	10.2857	9.60488	0.6132	13.2411	10.2513	3.9521	12.5947	11.3468	5.13841	11.4992
0.8	4.99291	8.32152	11.6501	9.98582	9.75	8.33687	0.6605	11.6348	9.00344	3.9351	10.9682	9.92501	4.87174	10.0466
0.9	4.29424	7.34541	10.3966	8.871	9.3333	7.3628	0.7024	10.3792	8.03349	3.9006	9.7085	8.82093	4.66415	8.92107
1.0	3.75000	6.56250	9.37500	7.96875	9	6.5816	0.7398	9.35587	7.24524	3.8587	8.69226	7.92658	4.49798	8.01092
1.1	3.31113	5.91273	8.51433	7.21353	8.72727	5.9333	0.7733	8.49374	6.58196	3.8148	7.84509	7.17742	4.36195	7.24964
1.2	2.94714	5.35844	7.76974	6.56409	8.5	5.3801	0.8034	7.748	6.00833	3.7715	7.11985	6.53278	4.24857	6.59539
1.3	2.63823	4.87500	7.11176	5.99338	8.30769	4.8976	0.8306	7.08917	5.50132	3.7302	6.48544	5.96599	4.1526	6.02077
1.4	2.37107	4.44576	6.52045	5.48311	8.14286	4.4689	0.8554	6.49729	5.04548	3.6914	5.92073	5.45898	4.07033	5.50723
1.5	2.13641	4.05918	5.98194	5.02056	8	4.0826	0.8780	5.95849	4.6301	3.6552	5.41101	4.9992	3.99901	5.04192
1.6	1.92767	3.70705	5.48644	4.59675	7.875	3.7305	0.8987	5.46296	4.24767	3.6217	4.94582	4.57778	3.9366	4.61572
1.7	1.74008	3.38350	5.02691	4.20521	7.76471	3.4068	0.9176	5.00363	3.89279	3.5908	4.51762	4.18832	3.88153	4.22209
1.8	1.57014	3.08420	4.59826	3.84123	7.66667	3.1071	0.9351	4.57539	3.56158	3.5622	4.12089	3.82619	3.83258	3.85628
1.9	1.41519	2.80598	4.19678	3.50138	7.57895	2.8283	0.9512	4.17451	3.25119	3.5357	3.75157	3.48797	3.78877	3.51478
2.0	1.27307	2.54648	3.81972	3.1831	7.5	2.57049	0.9662	3.80187	2.95957	3.5112	3.40663	3.17147	3.74934	3.19813



a)



b)



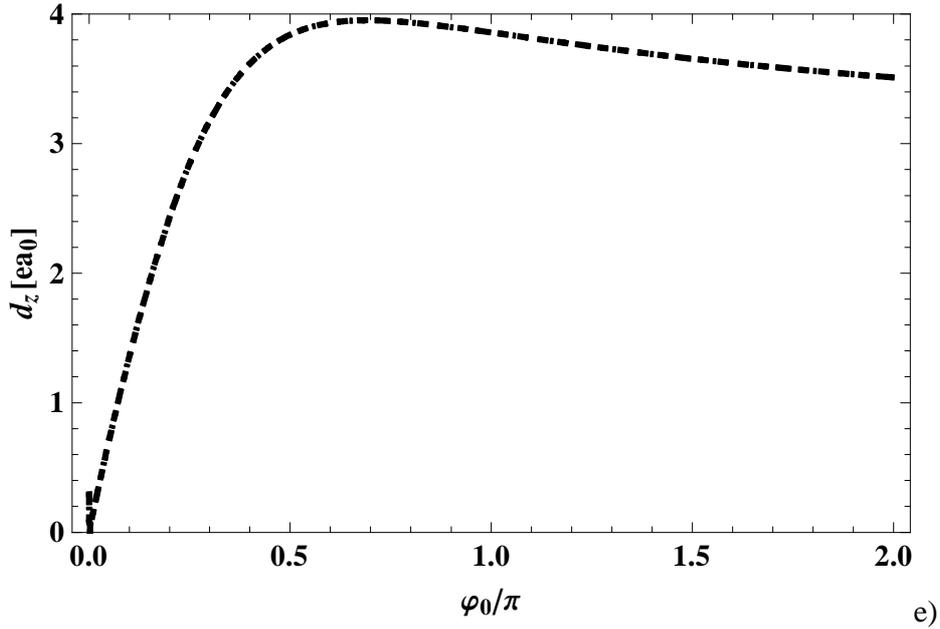


Figura 5. 6: Magnitud de las componentes transversal $d_{\perp}(\varphi_0)$ y longitudinal $d_z(\varphi_0)$ en la unidad $[ea_0]$ con las escaleras izquierda y derecha respectivamente, para los estados 001(—), 011(----) y 101(.....) en las coordenadas **a)** esféricas, **b), c)** parabólicas y **d), e)** esferoidales prolatas como función de φ_0/π .

5. 5 Discusión

La superintegrabilidad del átomo de hidrógeno confinado por ángulos diedros se ha mostrado explícitamente en coordenadas esféricas, parabólicas y esferoidales prolatas. La razón atrás de esto que las ecuaciones de Schrödinger comparten de los operadores conmutativos del Hamiltoniano y el cuadrado de la componente z del momento angular, como se discutió en la Sec.5.2. Los demás operadores de las Ecs. (5.7), (5.8) y (5.9) también conmutan con el par anterior, pero no conmutan entre sí. Sus eigenfunciones respectivas que satisfacen las condiciones de frontera de las Ecs. (5.11), están identificadas, construidas e ilustradas en la Sec. 5.3. Las conexiones entre las eigenfunciones en diferentes coordenadas con eigenvalores de energía común, asociado con un valor fijo seleccionado μ , y los valores comunes de $n_r + n_{\theta}$, $n_{\xi} + n_{\eta}$ y $n_u + n_v$ también se ilustran en la misma sesión. La degeneración de los eigenvalores sucesivos de energía también está identificada, incluyendo sus variaciones con la apertura

de los ángulos diedros de confinamiento. La distribución de presión en las paredes del ángulo de confinamiento para los estados 00μ , 01μ y 10μ en las coordenadas respectivas también están evaluadas e ilustradas en la Sec. 5.4. El rompimiento de la simetría rotacional alrededor del eje z debido a la presencia de los ángulos diedros de confinamiento conduce a la adquisición de un momento dipolar por el átomo de hidrógeno evaluado en la misma sección vía la Tabla 5.3 y la Figura 5.6.

Además de este resultado específico para el átomo de hidrógeno, se reconoce que es útil la investigación del confinamiento en ángulo diedro para otros sistemas que comparten la simetría rotacional alrededor del eje z . Específicamente, la partícula libre y los osciladores armónicos isotrópicos y anisotrópicos se pueden implementar fácilmente; mientras el ion molécula de hidrógeno y la molécula neutra de hidrógeno pueden extender el modelo de Kovalenko [7]. En el ámbito de física matemática / química, el uso de la base Fourier fraccional y sus consecuencias en polinomios asociados de Legendre y de Laguerre tienen que tener sus contrapartes para las soluciones en los otros grados de libertad.

Referencias

- [1] J. D. Levine, *Nodal Hydrogenic Wave Functions of Donors on Semiconductor Surfaces*, Phys. Rev. **140** (1965) A 586.
- [2] Z. Liu and D. L. Lin, *Hydrogenic atom in semi-infinite space*, Phys. Rev. B **28** (1983) 4413.
- [3] S. Satpathy, *Eigenstates of Wannier excitons near a semiconductor surface*, Phys. Rev. B **28** (1983) 4585.
- [4] Y. Shan, T. F. Jiang, Y. C. Lee, *Generalized spheroidal wave equations from an image-potential method for surface effects on impurity states*, Phys. Rev. B **31**(1985) 5487.
- [5] Y. Shan, *Generalised spheroidal wave equations for a hydrogenic system in half space. I. General properties*, J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys. **20** (1987) 4275.
- [6] Y. Shan, P. C. Lee, H. C. Tseng, *Generalised spheroidal wave equations for a hydrogenic system in half space. II. Exact solutions*, J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys. **20** (1987) 4285.

-
- [7] A. F. Kovalenko, E. N. Sovyak, M. F. Holovko, *On the quantum properties of adsorbed particles within the model of a hydrogen atom near a hard wall*, Int. J. Quan. Chem. **42** (1992) 321.
- [8] E. Ley-Koo, Z. Q. Guo, J. J. You, X. J. Shi, *The model of compressed atoms and electron emission of rock fracture*, Acta Geophys. Sin. **32** (1989)105.
- [9] E. Ley-Koo and R. M. G. Garcia-Castelán, *The hydrogen atom in a semi-infinite space limited by a paraboloidal boundary*, J. Phys. A: Math. Gen. **24** (1991) 1481.
- [10] E. Ley-Koo, S. Mateos-Cortés, *The hydrogen atom in a semi-infinite space limited by a hyperboloidal boundary*, Int. J. Quant. Chem. **46** (1993) 609.
- [11] E. Ley-Koo, S. Mateos-Cortés, *The hydrogen atom in a semi-infinite space limited by a conical boundary*, Am. J. Phys. **61** (1993) 246.
- [12] E. Ley-Koo, *The Hydrogen Atom confined in Semi-Infinite Spaces Limited by Conoidal Boundaries*, Adv. Quan. Chem. **57** (2009) 79.
- [13] R. Méndez-Fragoso, E. Ley-Koo, *The Hydrogen atom in a semi-infinite space with an elliptical. cone boundary*, Int. J. Quan. Chem. **111** (12) (2011) 2882.
- [14] R. Méndez-Fragoso, E. Ley-Koo, *Lamé spheroconal harmonics in atoms and molecules*, Int. J. Quan. Chem. **110**(15) (2010) 2765.
- [15] R. Méndez-Fragoso and E. Ley-Koo, *Rotations of asymmetric molecules and the Hydrogen atom in free and confined configurations*, Adv. in Quan. Chem. **62** Chap. 4, (2011) 137.
- [16] P.M. Morse, H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGRAW-HILL BOOK COMPANY, INC., 1953
- [17] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*, Dover, New York, (1965)
- [18] L. Chaos-Cador, E. Ley-Koo, *Two-dimensional hydrogen atom confined in circles, angles, and circular sectors*, Int. J. Quant. Chem. **103** (2005) 369.
- [19] H. A. Erikson, E. L. Hill, *A Note on the One-Electron States of Diatomic Molecules*, Phys. Rev. **75** (1949) 29.
- [20] C. A. Coulson, P. D. Robinson, *Wave Functions for the Hydrogen Atom in Spheroidal Coordinates: The Derivation and Properties of the Functions*, Proc. Phys. Soc. **71** (1958) 815.

-
- [21] G. Hunter, H. O. Pritchard, *Born-Oppenheimer Separation for Three- Particle Systems. II. Two-Center Wavefunctions*, J. Chem. Phys. **46** (1967) 2146.
- [22] J. O. Hirschfelder, *Quantum mechanical equations of change. I^a*, J. Chem Phys. **68** (11) (1978) 5151.

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo de tesis, estudiamos los siguientes temas:

- Hemos propuesto un potencial anular nuevo, y construido sus soluciones usando el método N-U. Así mismo resolvemos otro potencial tipo Pöschl-Teller II. Se ha ilustrado que este método es muy efectivo para resolver todos potenciales solubles conocidos y nuevos;
- Usando el método estándar re-investigamos un electrón en el campo de una molécula con un momento dipolar para comentar e identificar errores en un artículo reciente publicado en Physical Review Letters;
- Usando el método de factorización estudiamos el pozo circular en dos dimensiones y el pozo esférico en tres dimensiones. Obtenemos los operadores de desplazamiento que incluyen todas las variables (ρ, φ) y (r, θ, φ) de los sistemas. Se reconoce que estos operadores de desplazamiento generan un grupo de potenciales con el mismo espectro de energía;
- Estudiamos el átomo de hidrógeno confinado en ángulos diedros en tres diferentes sistemas de coordenadas y obtenemos las eigenfunciones y eigenvalores. Las relaciones entre eigenfunciones esféricas, parabólicas y esferoidales prolatas de los estados degenerados más bajos para cada valor de μ , la distribución de presión y momento dipolar eléctrico para el estado base y los primeros estados excitados han sido establecidas.

Publicaciones

1. Guo-Hua Sun and Eugenio Ley-Koo,
Comment on “Electron in the Field of a Molecule with an Electric Dipole Moment”, Physical Review Letters **104** (2010) 118901.
2. Min-Cang Zhang, Guo-Hua Sun and Shi-Hai Dong,
Exactly complete solutions of the Schrödinger equation with a spherically harmonic oscillatory ring-shaped potential, Physics Letters A **374** (2010) 704.
3. M. G. Miranda, Guo-Hua Sun and Shi-Hai Dong,
The solution of the second Pöschl-Teller like potential by Nikiforov-Uvarov method, International Journal of Modern Physics E **19** (1) (2010) 123.
4. Guo-Hua Sun and Shi-Hai Dong,
New type shift operators for circular well potential in two dimensions, Physics Letters A **374** (2010) 4112.
5. Guo-Hua Sun and Shi-Hai Dong,
New type shift operators for the three dimensional infinite well potential, Modern Physical Letters A **25** (33) (2010) 2849.
6. Guo-Hua Sun and Eugenio Ley-Koo,
The hydrogen atom confined in semi infinite space with dihedral angles boundaries, enviado.

Seminario y congresos

1. Guo-Hua Sun,
Seminario: “*Soluciones Exactas de Potencial de Anillo*”, 21 de abril de 2010, ESFM, IPN, México, D.F.
2. Guo-Hua Sun y Eugenio Ley-Koo,
Átomo de hidrógeno confinado en ángulos diedros, P3, 1er Taller de Dinámica y Estructura Atómica, Molecular y Óptica, Instituto de Química, UNAM, Mayo 20 y 21, 2010, México, D. F.

-
3. Guo-Hua Sun y Eugenio Ley-Koo,
Distribución de presión y momento dipolar eléctrico en el átomo de hidrógeno confinado en ángulo diedro, LIII Congreso Nacional de Física, 25 de octubre a 29 de 2010, Boca del Río Veracruz, México.
 4. Guo-Hua Sun y Eugenio Ley-Koo,
The Hydrogen Atom Confined in Dihedral Angles International Meeting on Confined Quantum Systems, 7-9 de Septiembre de 2011, UAM-Iztapalapa.

Apéndice A: Las funciones e integrales usadas

1. La función Gamma

La definición integral (Euler)

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt, \quad R(z) > 0. \quad (\text{A.1})$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} \quad (\text{A.2})$$

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin(z\pi)} \quad (\text{A.3})$$

La formula de duplicación de Legendre:

$$\Gamma(1+z)\Gamma\left(z+\frac{1}{2}\right) = 2^{-2z} \sqrt{\pi} \Gamma(2z+1) \quad (\text{A.4})$$

2. La función Beta

$$B(m+1, n+1) \equiv 2 \int_0^{\pi/2} \cos^{2m+1} \theta \sin^{2n+1} \theta d\theta = \frac{m!n!}{(m+n+1)!} \quad (\text{A.5})$$

$$B(p, q) = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)} = B(q, p) \quad (\text{A.6})$$

3. La integral

$$I_{FF}(n, \Delta n, \beta, \Delta\beta, \lambda) = \int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^{\beta+\lambda} {}_1F_1(-n, \beta; \rho) {}_1F_1(-n-\Delta n, \beta+\Delta\beta; \rho) d\rho \quad (\text{A.7})$$

Unas soluciones de (A.7) que ocupamos en la investigación son

λ	Δn	$\Delta\beta$	I_{FF}
0	0	0	$\frac{(2n+\beta)n!\Gamma(\beta)^2}{\Gamma(n+\beta)}$
-1	0	0	$\frac{n!\Gamma(\beta)^2}{\Gamma(n+\beta)}$