

Efectos de confinamiento en átomos hidrogenoides bidimensionales

N. Aquino y E. Castaño

*Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana
Av. Michoacán y Purísima, Apartado postal 55-534, 09340 México, D.F., Mexico.*

Recibido el 23 de abril de 1998; aceptado el 7 de julio de 1998

En este trabajo estudiamos efectos cuánticos de confinamiento de átomos hidrogenoides bidimensionales (AHB), como un ejemplo simple que, al mismo tiempo, es altamente relevante en la investigación actual de fenómenos cuánticos en sistemas mesoscópicos. Nuestro modelo considera que el electrón está confinado a moverse en el interior de una región circular plana centrada en el núcleo del átomo: describimos así a un átomo hidrogenoide bidimensional confinado (AHBC). En este caso, no es posible obtener soluciones analíticas en forma cerrada, por lo que utilizamos teoría de perturbaciones a primer orden, así como un método variacional. En este último, las funciones de prueba se proponen con base en las funciones de onda de AHBD libres, que también contienen términos de corte para que simultáneamente satisfagan las condiciones de frontera y la simetría cilíndrica del sistema. Nuestros resultados tienden a los esperados cuando el radio de confinamiento tiende ya sea a cero o a infinito: de partícula libre en una caja o un AHB libre, respectivamente. El método de perturbaciones da resultados muy sencillos que claramente muestran la competencia entre la energía cinética y la coulombiana. Al comparar los resultados obtenidos por ambos métodos, se observa que para radios muy pequeños se obtienen resultados muy similares, pero notando que el método variacional presenta dificultades numéricas en el primer estado excitado con momento angular cero. Esta dificultad se presenta para radios de la caja de confinamiento comparables con el valor promedio de la coordenada radial en el estado base de un AHB, que es el radio de Bohr bidimensional. Además se observa que los efectos de confinamiento son más severos en dos dimensiones, que en tres.

Descriptores: Puntos cuánticos; átomos hidrogenoides; confinamiento cuántico

In this work we study quantum confinement effects on two-dimensional hydrogenic atoms (2DHA) as a simple example that, at the same time, is highly relevant to current research of quantum phenomena in mesoscopic systems. Our model considers that the electron is confined to move to the interior of a circular region centered on the nucleus: confined two-dimensional hydrogenic atom (C2DHA). In this case it is not possible to obtain explicit analytic solutions in a closed form, reason for which we use a first order perturbation theory, as well as a variational approach. For the later method, the test functions are proposed based on the wave functions of a free 2DHA, but also including cut-off terms that make them satisfy at the same time the boundary conditions and the cylindrical symmetry of the system. Our results tend to the expected ones when the radius of the confining region tends either to zero or to infinity: free particle in a box or 2DHA, respectively. The first order perturbation results give very simple expressions where the competition between the kinetic energy and the coulombian attraction can be readily appreciated. Comparing both approaches we see that for small radii we obtain very similar results, but that the variational approach presents numerical difficulties, for the first excited state with zero angular momentum. This behaviour presents itself for radii of the confining circular box that are comparable with the mean expected value of the radial coordinate in the ground state of a free 2DHA, a 2D Bohr radius. Besides, it is observed that confinement effects are more severe in two than in three-dimensional systems.

Keywords: quantum dots; hydrogenic atoms; quantum confinement

PACS: 73.23.-b; 73.20.Dx; 71.24.+q; 85.30.Vw; 31.15.Pf

1. Introducción

El estudio del átomo de hidrógeno tridimensional es tópico obligado en todo curso de física cuántica [1], independientemente del nivel de presentación, pues, entre otras razones, fue uno de los primeros sistemas que reveló las deficiencias de la física clásica. Es también uno de los ejemplos más claros y poderosos para apreciar la mecánica cuántica y sus consecuencias y, además, sirve como un modelo base para estudiar fenómenos en los que la interacción coulombiana entre partículas es de importancia, algo que frecuentemente se presenta en todos los campos de la física contemporánea.

Este sistema también ha sido estudiado ampliamente en una y en dos dimensiones. Los resultados obtenidos son generalmente analíticos, exactos y elegantes [2–17]. Estos sistemas son particularmente relevantes en la investigación que se

realiza en el área de sistemas confinados a nivel mesoscópico, de la física de la materia condensada en general, y de la física del estado sólido en particular. En este sentido, una de las primeras aplicaciones la desarrollaron Khon y Luttinger [15], hace ya más de 40 años, cuando estudiaron átomos hidrogenoides bidimensionales como casos límite de impurezas en cristales anisótropos.

En este trabajo estudiaremos átomos hidrogenoides doblemente confinados. Por una parte consideramos que tanto el núcleo como el electrón están obligados a moverse en un mismo plano bidimensional y, por otra parte, que se limita el movimiento del electrón al interior de una región circular plana que está centrada en el núcleo, tal como se muestra en la Fig. 1. El potencial de interacción entre el electrón y el núcleo es coulombiano: inversamente proporcional a la distancia núcleo-electrón. En el pasado esto ha ocasionado

confusiones innecesarias, se arguye que este potencial, al no obedecer la ley de Gauss en dos dimensiones, no puede ser el adecuado, y que en su lugar debe incluirse un potencial que varía como el logaritmo de la distancia entre las cargas. Si bien es cierto que el potencial que utilizamos no es, sin duda alguna, una solución de la ley de Gauss en *dos dimensiones*, también debe quedar claro que esto es completamente irrelevante para la situación que nos interesa: nosotros consideramos un sistema tridimensional cuya dinámica está restringida a regiones planas, bidimensionales. La dimensionalidad de nuestro sistema debe entenderse con base en el número de restricciones impuestas a un sistema inmerso en tres dimensiones. El utilizar un potencial logarítmico correspondería, en nuestro caso, a estudiar la interacción entre líneas de carga, infinitas y paralelas, con una densidad de carga constante, que al mismo tiempo viven en un mundo tridimensional. Sin duda, los efectos de cuantización por tamaño en este último sistema deben ser estudiados, pero esto nos alejaría demasiado del objetivo del presente trabajo.

Cabe mencionar que este tipo de dimensionalidad, reducida o restringida, de tres a dos, a una e incluso a cero dimensiones, ha sido ampliamente utilizada en años recientes al estudiar teórica y experimentalmente fenómenos en sistemas mesoscópicos, ya que muchos de los fenómenos que presentan estos sistemas se pueden interpretar en base a efectos de cuantización debidos al confinamiento a regiones espaciales muy reducidas. Muchos sistemas han sido estudiados, entre los cuales mencionamos a los alambres cuánticos, las nanoconstricciones balísticas (también llamadas guías de ondas cuánticas), puntos cuánticos, arreglos de puntos cuánticos, nanopartículas de muy diverso tipo y origen, heteroestructuras, pozos cuánticos, películas delgadas, *fullerenos* y cuasicristales, entre otros.

El resto de este trabajo está organizado de la manera siguiente. En la Sec. 2 presentamos en forma muy breve los resultados que se conocen para AHBD sin confinamiento alguno, obteniendo las *eigenfunciones* y las *eigenenergías*; en la Sec. 3 se estudia una partícula libre en una caja circular. Estas dos secciones contienen material ya conocido; lo incluimos con el propósito de presentar una discusión autocontenida, de fácil referencia y con una notación uniforme; además nos será muy útil en la discusión de nuestros resultados. En la Sec. 4 estudiamos los *eigenvalores* de nuestro modelo utilizando la teoría de perturbaciones a primer orden. En la Sec. 5 presentamos material que de acuerdo a la información que poseemos no ha sido tratado con anterioridad, en el cual estudiamos los efectos de confinamiento sobre un AHB utilizando el método variacional. En la Sec. 6 presentamos nuestras conclusiones, discutiendo los resultados obtenidos.

2. Átomo hidrogenoide libre en dos dimensiones

En esta sección estudiamos detalladamente el caso de un átomo hidrogenoide bidimensional libre, en el cual el núcleo

y el electrón están confinados a un mismo plano [17], digamos el xy . El núcleo tiene una carga igual a Ze y está fijo en el centro de coordenadas, el electrón se mueve sobre el plano sin restricción alguna y tiene una masa efectiva m^* , y la interacción coulombiana se ve afectada por una constante dieléctrica κ .

En esta sección encontraremos las energías de los estados ligados y las correspondientes funciones de onda. Si bien esto ya ha sido estudiado anteriormente por otros autores, consideramos necesario presentar estos cálculos para hacer fácil referencia a diversos resultados que nos serán de utilidad posteriormente.

En coordenadas polares la ecuación de Schrödinger por resolver es entonces

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \frac{Ze^2}{\kappa \epsilon_0 \rho} \right\} \times \Psi(\rho, \phi) = E \Psi(\rho, \phi), \quad (1)$$

donde ρ es la distancia del electrón al núcleo, Ze es la carga nuclear, m^* es la masa efectiva del electrón, κ es la constante dieléctrica del medio y ϵ_0 la permitividad del vacío.

Para resolver (1) se utiliza el método de separación de variables, proponiendo que la función de onda sea de la forma

$$\Psi(\rho, \phi) = R(\rho)\Phi(\phi). \quad (2)$$

Substituyendo (2) en (1) se obtienen las siguientes ecuaciones para la función de onda angular y la función de onda radial:

$$\frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} = -m^2 \Phi(\phi), \quad (3)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} \right) - \frac{Ze^2}{\kappa \epsilon_0 \rho} \right] \times R(\rho) = E R(\rho). \quad (4)$$

Dado que $R(\rho)$ depende de m solamente a través de m^2 , y en consecuencia, tan sólo de $|m|$, por lo que los niveles energéticos para m y $-m$ están degenerados para toda $m \neq 0$. En esta forma se ha reducido el problema a una sola ecuación, pero a costa de introducir un potencial centrífugo que depende del valor del momento angular, m^2/ρ^2 , que junto con el potencial coulombiano produce un potencial efectivo atractivo que puede sostener estados ligados, que en el caso clásico corresponden a órbitas cerradas.

Pidiendo que $\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi)$, las soluciones normalizadas de (3) son

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \quad (5)$$

las cuales forman un sistema ortonormal completo para la variable angular. Dado que el potencial tiende a cero cuando ρ tiende a infinito, los estados ligados tienen una energía negativa, razón por la cual, la función de onda debe decaer muy

rápida en esta región asintótica. Tomando el límite correspondiente a radios grandes en (4) obtenemos que

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{d\rho^2} R(\rho) \approx ER(\rho).$$

La solución físicamente aceptable de esta ecuación es

$$R(\rho) \approx \exp\left(-\sqrt{-\frac{2m^*E}{\hbar^2}} \rho\right),$$

expresión, que al hacer los siguientes cambios de variable,

$$\begin{aligned} E &= -\frac{\hbar^2}{8m^*\alpha^2}, \\ \rho &= \alpha x, \end{aligned} \quad (6)$$

queda expresada como:

$$R(x) \approx \exp\left(-\frac{x}{2}\right),$$

lo cual, en retrospectiva, es motivado por desear trabajar con densidades (módulos cuadrados de la función de onda) que decaigan como $\exp(-x)$ y no como $\exp(-2x)$, una práctica común en la literatura sobre el tema.

En esta forma, si hacemos los cambios de variable indicados, la ecuación radial resultante es

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} - \frac{m^2}{x^2} + \frac{\lambda}{x} - \frac{1}{4}\right] R(x) = 0, \quad (7)$$

donde

$$\lambda = \frac{2m^*\alpha Ze^2}{\kappa\epsilon_0\hbar^2}. \quad (8)$$

Utilizando el resultado para distancias muy lejanas del núcleo podemos escribir, en forma tentativa, que

$$R(x) = \exp\left(-\frac{x}{2}\right) F(x), \quad x = \frac{\rho}{\alpha}, \quad (9)$$

Lo cual conduce a la siguiente ecuación para $F(x)$:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F(x)}{dx^2} + \left(\frac{1}{x} - 1\right) \frac{dF(x)}{dx} \\ + \left[-\frac{m^2}{x^2} + \frac{1}{x} \left(\lambda - \frac{1}{2}\right)\right] F(x) = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Para avanzar en la solución de esta ecuación, estudiemos ahora el límite en el que x tiende a cero, *i.e.*, para regiones muy cercanas al núcleo. En este caso es conveniente hacer el siguiente cambio de variable:

$$x = \frac{1}{z},$$

con lo cual obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F(z)}{dz^2} + \left(\frac{1}{z} + \frac{1}{z^2}\right) \frac{dF(z)}{dz} \\ + \left(-\frac{m^2}{z^2} + \frac{\lambda}{z^3} - \frac{1}{2z^3}\right) F(z) = 0, \end{aligned}$$

expresión que cuando $z \rightarrow \infty$ ($x \rightarrow 0$) se reduce a

$$\frac{d^2 F(z)}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dF(z)}{dz} - \frac{m^2}{z^2} F(z) \approx 0,$$

al conservar únicamente los términos dominantes. La solución regular en el origen, con respecto a x es $F(z) \approx z^{-|m|} = x^{|m|}$, con lo que obtenemos una nueva factorización de la función de onda radial:

$$F(x) = x^{|m|} L(x).$$

Al substituir esta expresión en (10) obtenemos que

$$\begin{aligned} xL''(x) + (2|m| + 1 - x)L'(x) + \\ (\lambda - |m| - 1/2)L(x) = 0, \end{aligned} \quad (11)$$

la cual es la ecuación asociada de Laguerre. Para que la función de onda sea normalizable a la unidad, es necesario pedir que $\lambda - |m| - 1/2$ sea igual a un número entero N mayor o igual que cero, pues de otra forma la función de onda diverge en una forma físicamente inaceptable, pues ya no es del tipo cuadrado integrable. Por lo tanto, las soluciones (11) que son físicamente aceptables son los polinomios asociados de Laguerre:

$$L_{\lambda-|m|-1/2}^{2|m|}(x) = L_N^{2|m|}(x),$$

y que en consecuencia las energías propias están dadas por

$$\begin{aligned} E_n = -\frac{\hbar^2}{8m^*\alpha^2} = -\frac{m^*Z^2e^4}{2\kappa^2\epsilon_0^2\hbar^2(n-1/2)^2}, \\ n = 1, 2, 3, \dots, \end{aligned} \quad (12)$$

donde hemos definido

$$n = N + |m| + 1, \quad N \geq 0, \quad n \geq |m| + 1 \quad (13)$$

y hemos encontrado que el factor de escala es igual a

$$\alpha_n = \frac{\kappa\epsilon_0\hbar^2}{2m^*Ze^2} \left(n - \frac{1}{2}\right) = \frac{a_B}{2Z} \left(n - \frac{1}{2}\right), \quad (14)$$

donde

$$a_B = \frac{\kappa\epsilon_0\hbar^2}{m^*e^2} = 0.53\kappa \frac{m_0}{m^*} \text{Å}, \quad (15)$$

es el radio de Bohr efectivo del sistema. Por lo tanto, las energías propias del sistema se pueden escribir como

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m^*a_B^2} \frac{Z^2}{\left(n - \frac{1}{2}\right)^2} = -\frac{E_B Z^2}{\left(n - \frac{1}{2}\right)^2}, \quad (16)$$

con

$$E_B = \frac{\hbar^2}{2m^*a_B^2} = \frac{13600m_0}{\kappa^2m^*} \text{ meV.} \quad (17)$$

Es importante notar que las energías propias no dependen de m y que dada una n la degeneración de ese nivel es igual a $2n + 1$. Esto también sucede en el caso 3D y se dice que existe una degeneración accidental que se puede explicar en términos del vector de Runge-Lenz, el es una no muy obvia cantidad conservada que hace explícita la razón de esta degeneración accidental.

Finalmente, con respecto a esta sección, un cálculo directo nos permite obtener las eigenfunciones normalizadas del átomo hidrogenoide bidimensional libre:

$$\Psi_{n,m}(\rho, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha_n}} \sqrt{\frac{(n - |m| - 1)!}{(n + |m| - 1)!}} e^{(-\rho/2\alpha_n)} \times \left(\frac{\rho}{\alpha_n}\right)^{|m|} L_{n-|m|-1}^{2|m|} \left(\frac{\rho}{\alpha_n}\right) e^{im\phi}. \quad (18)$$

La forma de estas eigenfunciones es marcadamente similar a sus contrapartes tridimensionales por el tipo de funciones involucradas. Cabe remarcar que en el caso bidimensional el factor de escala, [véase (14)], depende linealmente del número cuántico principal n , pero que no es directamente proporcional a n misma, como sucede en el caso tridimensional, excepto cuando n es mucho mayor que $1/2$.

3. Electrón libre confinado al interior de un disco plano

En este caso el electrón se mueve como una partícula libre en el interior de un disco de radio ρ_0 confinado por una barrera de potencial de altura infinita [18] (Figs. 1 y 2), es decir, que las condiciones de frontera imponen que $\Psi(\rho = \rho_0, \phi) = 0$. La simetría del problema permite utilizar la separación de variables empleada en la sección anterior, de hecho se obtienen las mismas ecuaciones pero ahora con $Z = 0$. Para la variable angular obtenemos la misma solución que en la sección anterior, y para la variable radial la ecuación correspondiente es

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} \right) R(\rho) = ER(\rho), \quad (19)$$

la cual es la ecuación diferencial de Bessel de orden m . Por lo tanto, después de normalizar se obtiene que las *eigenfunciones* de onda son:

$$\Psi_{n,m}(\rho, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2\pi\rho_0} |J_{|m|+1,n}(x_{|m|n})|} \times J_{|m|}(x_{|m|n} \frac{\rho}{\rho_0}) e^{im\phi}, \quad (20)$$

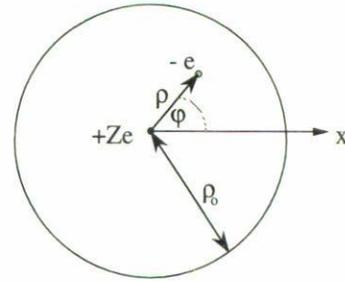


FIGURA 1. Representación del modelo, en el cual una carga $+Ze$ se encuentra colocada en el centro de una caja circular de radio ρ_0 y una carga $-e$ se mueve alrededor de la primera.

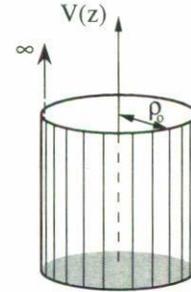


FIGURA 2. Potencial de confinamiento de tipo impenetrable para radios mayores que ρ_0 .

donde $x_{|m|n}$ es el n -ésimo cero de la función de Bessel de orden $|m|$.

Además, las energías propias son

$$E_{nm} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{x_{|m|n}}{\rho_0} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m^*a_B^2} \left(\frac{x_{|m|n}}{\beta} \right)^2 = E_B \left(\frac{x_{|m|n}}{\beta} \right)^2, \quad (21)$$

donde hemos definido

$$\beta = \frac{\rho_0}{a_B}. \quad (22)$$

La degeneración para una n dada es igual a 2 para toda $m \neq 0$, lo cual se entiende en términos clásicos al recordar la simetría cilíndrica del problema. Es importante notar que cuando $\rho_0 \rightarrow \infty$ las energías forman un continuo y cuando $\rho_0 \rightarrow 0$ las energías divergen, y que en todo caso son positivas. El ordenamiento de las energías propias en términos de los ceros de las funciones de Bessel es algo caprichoso y para los primeros nueve niveles se tiene que

$$E_{10} < E_{11} < E_{12} < E_{20} < E_{13} < E_{21} < E_{14} < E_{22} < E_{30} < \dots$$

El conjunto de funciones obtenidas en esta sección puede utilizarse como una base para diagonalizar directamente problemas de otro tipo, tales como cuando el electrón se ve afectado por campos externos o por otras cargas fijas presentes en el sistema.

En la siguiente sección emplearemos los resultados obtenidos en la presente y calcularemos algunas de las energías del AHBC.

4. El átomo de hidrógeno 2D confinado. Teoría de perturbaciones a primer orden

El hamiltoniano del AHBC se puede escribir como

$$H = H_0 - \frac{e^2}{\kappa\epsilon_0\rho}, \tag{23}$$

donde H_0 es el hamiltoniano de la partícula libre discutido en la sección anterior, y el término coulombiano $e^2/\kappa\epsilon_0\rho$ se trata como una perturbación.

Las funciones y valores propios de la energía del hamiltoniano no perturbado H_0 están dadas por (20) y (21), respectivamente.

La energía corregida a primer orden está dada por

$$E_{nk} = E_{nk}^0 + \langle nk | -\frac{e^2}{\kappa\epsilon_0\rho} | nk \rangle, \tag{24}$$

donde E_{nk}^0 está dada por (21) y $|nk\rangle$ por (20). Después de algunas sencillas operaciones algebraicas obtenemos

$$E_{10}(\rho_0) = \frac{\hbar^2 x_{01}^2}{2m^* \rho_0^2} - \frac{2e^2}{\rho_0} \frac{\int_0^1 J_0^2(x_{01}u) du}{J_1^2(x_{01})},$$

$$E_{20}(\rho_0) = \frac{\hbar^2 x_{02}^2}{2m^* \rho_0^2} - \frac{2e^2}{\rho_0} \frac{\int_0^1 J_0^2(x_{02}u) du}{J_1^2(x_{02})}, \tag{25}$$

y

$$E_{21}(\rho_0) = \frac{\hbar^2 x_{11}^2}{2m^* \rho_0^2} - \frac{2e^2}{\rho_0} \frac{\int_0^1 J_1^2(x_{11}u) du}{J_2^2(x_{11})}.$$

Las integrales involucradas pueden evaluarse numéricamente, y finalmente podemos escribir las energías a primer orden para el estado base y los dos primeros estados excitados como

$$E_{10}(\rho') = \frac{2.8916}{\rho_0'^2} - \frac{3.5135}{\rho_0'},$$

$$E_{20}(\rho') = \frac{15.2356}{\rho_0'^2} - \frac{4.3576}{\rho_0'}, \tag{26}$$

$$E_{21}(\rho') = \frac{7.3010}{\rho_0'^2} - \frac{2.0540}{\rho_0'};$$

las distancias están dadas en Bohrs efectivos y las energías en múltiplos de $2E_B$ (21). De estas ecuaciones se hace evidente que para radios muy pequeños el término dominante es el debido a la energía cinética de la partícula (que se mueve en el interior del disco circular), razón por la cual la energía total es positiva. Este hecho también nos hace comprender que la degeneración del problema (para radios pequeños) es la misma que el de la partícula libre en la caja circular y no el del AHB.

5. El átomo de hidrógeno 2D confinado. Enfoque variacional

El problema del átomo de hidrógeno en dos dimensiones confinado mediante paredes impenetrables [19], está descrito por la ecuación de Schrödinger (1), donde el potencial $V(r)$ es ahora (las distancias están dadas en a_B y las energías en múltiplos de $2E_B$)

$$V(r) = \begin{cases} +\infty, & r \geq \rho_0, \\ -\frac{1}{\rho}, & \rho < \rho_0. \end{cases} \tag{27}$$

La función de onda que es solución de (1) con el potencial (27) debe satisfacer la condición de frontera

$$\psi(\rho = \rho_0, \phi) = 0. \tag{28}$$

Las eigenfunciones de este problema siguen siendo de la misma forma que para el caso libre (2), la solución angular es la dada por la Ec. (5).

Las *eigenfunciones* radiales que ahora llamaremos R'_{nm} satisfacen la ecuación radial de Schrödinger en dos dimensiones

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2 R'_{nm}}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR'_{nm}}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} R'_{nm} \right) + V(\rho) R'_{nm} = E_{nm} R'_{nm}. \tag{29}$$

Nótese que, como en el caso libre, la solución $R'_{nm}(\rho)$ depende de n y del valor absoluto de $|m|$. La solución (5) es eigenfunción del momento angular en la dirección z :

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}, \tag{30}$$

el cual conmuta con el hamiltoniano, por lo que m es un buen número cuántico.

De acuerdo al método variacional directo [22], la función radial de prueba se escoge como $R'_{nm}(\rho; \alpha) = R_{nm}(\rho; \alpha)\chi(\rho; \rho_0)$ donde $R_{nm}(\rho)$ es la solución radial del problema libre [17], α es un parámetro variacional y $\chi(\rho, \rho_0)$ es una función de corte que se anula en $\rho = \rho_0$. La función $R'_{nm}(\rho; \alpha)$ claramente satisface la condición de frontera (28). La función de corte más sencilla es $\chi(\rho; \rho_0) = \rho_0 - \rho$; que es precisamente la que usaremos en este trabajo.

Las funciones de onda radiales $R_{nm}(\rho)$ del problema libre están dadas en (18), a partir de estas podemos construir las funciones de onda de prueba para los diferentes niveles energéticos del problema confinado. A continuación se dan explícitamente algunas de las funciones $R'_{nm}(\rho; \alpha)$ para el estado base y los dos primeros estados excitados:

$$R'_{10} = e^{-\alpha_1 \rho} (\rho_0 - \rho),$$

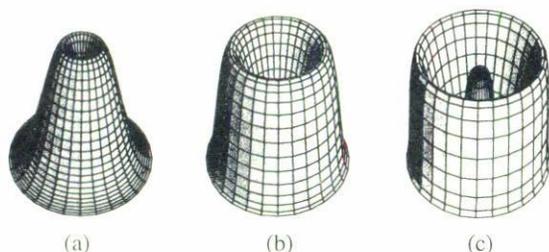
$$R'_{20} = e^{-\alpha_2 \rho} [\rho_1(\alpha_2) - \rho] (\rho_0 - \rho), \tag{31}$$

$$R'_{21} = \rho e^{-\alpha_3 \rho} (\rho_0 - \rho),$$

donde $\rho_1(\alpha_2)$ es el nodo de la función radial R'_{20} , que se determina a partir de la condición de ortogonalidad $\langle R'_{10} | R'_{20} \rangle = 0$.

TABLA I. *Eigenvalores* del estado base y algunos estados excitados del átomo de hidrógeno bidimensional confinado. Las distancias están dadas en Bohrs efectivos y las energías en múltiplos de $2E_B$.

ρ_0	α_1	E_{10}	α_3	E_{21}	α_2	ρ_1	E_{20}
0.5	0.3709	3.9259	0.9000	25.4852	0.0380	0.1658	51.9215
1.0	0.8624	-1.3460	0.5812	5.2922	0.0420	0.3090	10.4845
2.0	1.3595	-1.9732	0.4361	0.7659	0.2720	0.5115	1.5667
4.0	1.7124	-1.9994	0.4011	-0.1101	0.3816	0.6897	-0.0461
6.0	1.8176	-1.9999	0.4335	-0.2031	0.4287	0.7399	-0.1924
8.0	1.8663	-2.0000	0.4825	-0.2184	0.4783	0.7521	-0.2164
10.0	1.8946	-2.0000	0.5249	-0.2213	0.5214	0.7532	-0.2208
15.0	1.9310	-2.0000	0.5825	-0.2221	0.5811	0.7514	-0.2221
20.0	1.9487	-2.0000	0.6074	-0.2222	0.6069	0.7506	-0.2222
25.0	1.9592	-2.0000	0.6209	"	0.6207	0.7503	"
30.0	1.9661	-2.0000	0.6295	"	0.6293	0.7502	"
40.0	1.9747	-2.0000	0.6397	"	0.6395	0.7502	"
50.0	1.9798	-2.0000	0.6454	"	0.6452	0.7501	"
60.0	1.9831	-2.0000	0.6491	"	0.6489	0.7500	"
∞	2.0000	-2.0000	0.6666	-0.2222	0.6666	0.7500	-0.2222

FIGURA 3. Densidades de probabilidad (a) $|\psi_{10}(\rho, \phi)|^2$, (b) $|\psi_{21}(\rho, \phi)|^2$ y (c) $|\psi_{20}(\rho, \phi)|^2$ para un tamaño de caja $\rho_0 = 1$ Bohr.

En las Figs. 3a, 3b y 3c se muestra una gráfica del módulo al cuadrado de las funciones de onda $|\psi(r, \phi)|^2$ para un tamaño de caja r_0 de 1 Bohr. Las gráficas de $|\psi(r, \phi)|^2$ representan el sólido de revolución que se obtiene al hacer girar las densidades radiales $D_{nm}(r)$ alrededor de su eje vertical, que se muestran en las Figs. 3a, 3b y 3c. En todas estas figuras se utilizaron los parámetros variacionales obtenidos al minimizar las energías correspondientes.

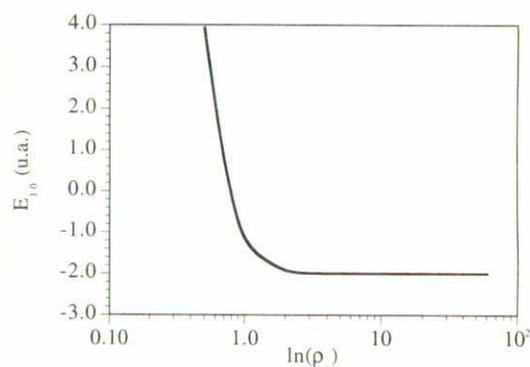
5.1. Eigenvalores de la energía

Las energías óptimas se encuentran minimizando el funcional $E(\alpha; \rho_0)$ respecto al parámetro variacional α , donde $E(\alpha; \rho_0)$ está dada por:

$$E_{nl}(\alpha; \rho_0) = \frac{\langle R'_{nm} | H | R'_{nm} \rangle}{\langle R'_{nm} | R'_{nm} \rangle}, \quad (32)$$

y H es el hamiltoniano del sistema asociado con la ecuación radial de Schrödinger en dos dimensiones (29).

Las energías y valores de α óptimos se encuentran reportados en la Tabla I. De esta tabla podemos observar que cuan-

FIGURA 4. Variación de la energía del estado base E_{00} como función del radio de la caja que lo confina.

do el radio de la caja $\rho_0 \rightarrow \infty$, los valores de la energía se aproximan a los del átomo bidimensional libre, como era de esperarse. Este comportamiento puede apreciarse con mayor facilidad en las Figs. 4 y 5. Mientras que cuando ρ_0 se hace muy pequeño, la energía se vuelve positiva indicando que la energía cinética se vuelve más grande que la energía potencial, a pesar de que la distancia entre el núcleo y el electrón se vuelve muy pequeña. En este caso, el potencial coulombiano se vuelve una perturbación ante el efecto del confinamiento y los niveles de energía deben de ser similares a los de una partícula confinada en una caja circular como se muestra en la Fig. 6. Nótese que esto sucede cuando $\rho_0 = \langle \rho \rangle$ del estado base de un AHB libre.

También es evidente que la degeneración en el momento angular se remueve cuando el sistema se confina dentro del recinto impenetrable y la degeneración vuelve a aparecer solo para tamaños de cajas mayores de 20 Bohrs, como puede observarse de la Tabla I y en la Fig. 5. El estado base del áto-

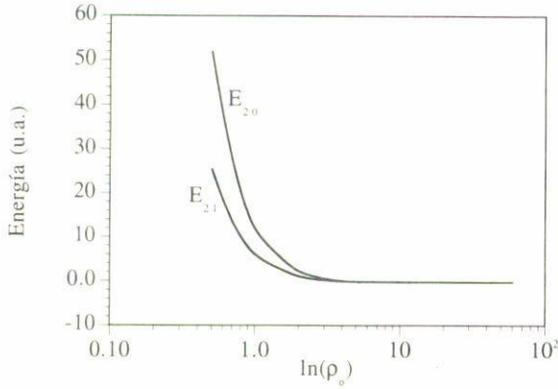


FIGURA 5. Variación de la energía de los dos primeros estados excitados E_{20} y E_{21} como función del radio de la caja de confinamiento. Para radios pequeños estos estados no presentan degeneración, pero a medida que el radio de la caja aumenta la degeneración de los estados aparece.

mo bidimensional libre está más ligado que el estado base de su análogo en tres dimensiones, lo mismo sucede para los otros estados. De igual manera los estados del átomo bidimensional confinado poseen energías más bajas que sus análogos de tres dimensiones. Esto tiene consecuencias de interés práctico al estudiar estados de impurezas hidrogenoides localizadas en la región interfacial de dos materiales semiconductores.

Todas las integrales necesarias para evaluar la energía se pueden hacer de manera analítica. Por comodidad decidimos hacer la optimización de la energía numéricamente mediante el método de búsqueda con la sección áurea (*golden section search*) en una dimensión [21], optimizando al parámetro α hasta una incertidumbre absoluta de 0.0001 a.u. En la Fig. 7 mostramos una gráfica de la energía del estado base para $r_0 = 0.5$ Bohrs como función del parámetro variacional α , en donde se puede apreciar claramente que la curva de la energía tiene un mínimo.

5.2. Valores esperados de ρ

Los valores esperados de ρ^k para algunos cuantos valores enteros k , son de mucha utilidad en el problema tridimensional, porque están relacionados con propiedades físicas del sistema como la presión, la polarizabilidad, el apantallamiento magnético nuclear y el desdoblamiento hiperfino (Refs. 20, 22 y 23) algo que dejaremos para un trabajo posterior, para el modelo aquí estudiado. En el caso bidimensional los valores esperados de ρ^k están dados por

$$\langle \rho_{nm} \rangle = \frac{\int_0^{\rho_0} \rho^{k+1} R_{nm}^2 d\rho}{\int_0^{\rho_0} \rho R_{nm}^2 d\rho} \tag{33}$$

En la Tabla II se reportan los valores esperados $\langle \rho \rangle, \langle \rho^2 \rangle, \langle \rho^{-1} \rangle$ y para $m \neq 0$ también $\langle \rho^{-2} \rangle$, el valor $\langle \rho \rangle$ representa la distancia promedio a la que el electrón se encuentra del núcleo.

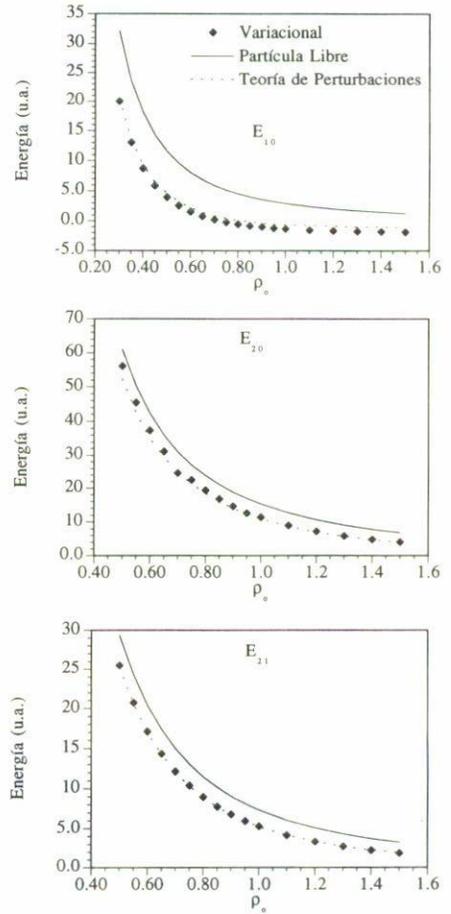


FIGURA 6. Energías del estado de algunos estados del ABC obtenida mediante teoría de perturbaciones (línea punteada), el método variacional (rombos) y la energía del estado correspondiente de la partícula libre (línea continua) para : el estado base E_{10} , el primer estado excitado con nodo E_{20} y el primer estado excitado sin nodo E_{21} .

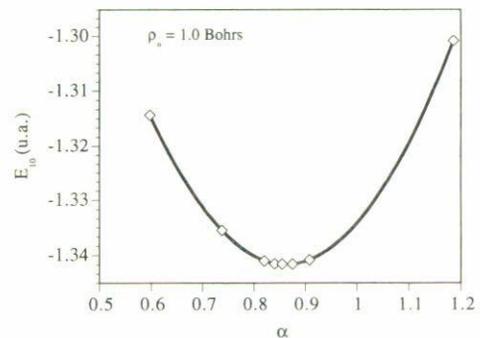


FIGURA 7. Energía del estado base como función del parámetro variacional α para $\rho_0 = 1.0$ Bohrs efectivos.

La probabilidad de encontrar al electrón dentro del elemento de área $ds = \rho d\rho d\phi$ en la vecindad del punto de coordenadas (ρ, ϕ) para cualquier orbital es

$$\psi_{nm}^*(\rho, \phi)\psi_{nm}(\rho, \phi)\rho d\rho d\phi \tag{34}$$

TABLA II. Valores esperados de ρ y ρ_{max} para el estado base y algunos estados excitados del átomo de hidrógeno bidimensional confinado. Las distancias están dadas en Bohrs efectivos. El valor correspondiente a $\rho_0 \rightarrow \infty$ se obtuvo de las fórmulas analíticas de la referencia [17].

ρ_0	$\langle \rho \rangle$	$\langle \rho^2 \rangle$	$\langle 1/\rho \rangle$	ρ_{max}	$\langle \rho \rangle$	$\langle \rho^2 \rangle$	$\langle 1/\rho \rangle$	ρ_{max}	$\langle \rho \rangle$	$\langle \rho^2 \rangle$	$\langle 1/\rho \rangle$	$\langle 1/\rho^2 \rangle$	ρ_{max}
	$n = 1 \quad l = 0$				$n = 2 \quad l = 0$				$n = 2 \quad l = 1$				
0.5	0.193	0.047	8.456	0.154	0.286	0.098	8.004	3.52	0.272	0.082	4.274	23.416	0.278
1.0	0.335	0.147	5.147	0.138	0.593	0.408	3.483	0.694	0.535	0.318	2.180	6.136	0.542
2.0	0.461	0.300	4.092	0.259	1.169	1.543	1.621	1.288	1.034	1.195	1.140	1.705	1.026
4.0	0.493	0.361	4.002	0.253	2.150	5.127	0.736	2.144	1.885	4.047	0.641	0.558	1.767
6.0	0.498	0.370	4.000	0.251	2.830	8.987	0.519	2.616	2.473	7.134	0.503	0.356	2.161
8.0	0.499	0.372	4.000	0.254	3.202	11.729	0.458	2.789	2.778	9.212	0.460	0.305	2.282
10.0	0.499	0.373	4.000	0.250	3.361	13.126	0.444	2.821	2.898	10.207	0.449	0.295	2.291
15.0	0.500	0.374	4.000	0.250	3.461	14.171	0.444	2.819	2.972	10.932	0.445	0.295	2.269
20.0	0.500	0.375	4.000	0.250	3.482	14.409	0.444	2.805	2.987	11.103	0.444	0.295	2.260
25.0	0.500	0.375	4.000	0.250	3.489	14.500	0.444	2.802	2.993	11.168	0.444	0.296	2.256
30.0	0.500	0.375	4.000	0.250	3.493	14.544	0.444	2.801	2.995	11.194	0.444	0.296	2.254
40.0	0.500	0.375	4.000	0.250	3.496	14.583	0.444	2.800	2.997	11.217	0.444	0.296	2.252
50.0	0.500	0.375	4.000	0.250	3.498	14.603	0.444	2.800	2.998	11.231	0.444	0.296	2.251
60.0	0.500	0.375	4.000	0.250	3.499	14.614	0.444	2.800	2.999	11.238	0.444	0.296	2.251
∞	0.500	0.375	4.000	0.250	3.500	14.625	0.444	2.800	3.000	11.250	0.444	0.296	2.250

Integrando sobre el ángulo ϕ obtenemos la siguiente expresión:

$$N(\rho_0, \alpha) \rho R_{nm}^{\prime 2}(\rho) d\rho = D_{nm}(\rho) d\rho, \quad (35)$$

donde $N(\rho_0, \alpha) = 1/\langle R_{nm}' | R_{nm}' \rangle$ es el cuadrado de la constante de normalización.

La Ec. (35) representa la probabilidad de encontrar al electrón entre las distancias ρ y $\rho + d\rho$ del núcleo. Esta misma ecuación sirve para definir a la *función de distribución radial de probabilidad* $D_{nm}(\rho)$, que es de mucha utilidad para describir el tamaño de los orbitales en particular en física atómica.

Para un orbital dado la *distancia más probable* (ρ_{max}) se obtiene al maximizar la correspondiente D_{nm} . Para los orbitales con $n - m > 0$, ρ_{max} se define como la distancia medida desde el núcleo hasta el máximo principal es decir, el más externo y más prominente de los máximos. En la Tabla II también hemos incluido el valor de ρ_{max} , para los diferentes valores de ρ_0 .

Como puede observarse de la Tabla II, los valores esperados de la posición varían monótonamente (el mismo comportamiento lo presenta la energía) y tienden de manera asintótica a los valores del átomo libre, como era de esperarse. El comportamiento de ρ_{max} no es monótono en general, para observarlo basta con comparar los valores que toma para los estados $n = 2, m = 0$ y $n = 2, m = 1$, en ambos casos se encuentra un máximo, para un valor de ρ_0 cercano a 10 a.u.

En la Fig. 8 se muestran las gráficas de las funciones de onda R_{nm} y las densidades radiales D_{nm} , de los tres prime-

ros estados del átomo de hidrógeno bidimensional confinado. Es decir, el estado base y los dos primeros estados excitados para $\rho_0 = 1, 6$ Bohrs. En esta figura también se muestra la posición de $\bar{\rho} = \langle \rho \rangle$ y ρ_{max} para cada caso.

6. Conclusiones

En el problema del átomo de hidrógeno en dos y tres dimensiones (libres y confinados) existen semejanzas y diferencias importantes. Empecemos analizando el caso libre; lo primero que llama la atención es que al reemplazar al número cuántico principal n por $n - \frac{1}{2}$, en la fórmula para la energía del átomo de hidrógeno en 3 dimensiones, se obtiene el espectro de energías para el caso bidimensional, así como otras fórmulas importantes [17]. La diferencia importante en el caso de dos dimensiones es que las funciones propias solo tienen una parte angular que va como $e^{im\phi}$ y no los armónicos esféricos, así que las funciones de onda para el caso bidimensional no se obtienen trivialmente (haciendo $\phi = \pi/2$) de las soluciones del caso de tres dimensiones. Sin embargo las densidades radiales $D_{nm}(\rho)$ del átomo bidimensional (libre y confinado) tienen la misma forma que la de su análogo en tres dimensiones, aunque las dimensiones espaciales son claramente diferentes.

El átomo de hidrógeno bidimensional libre se encuentra más ligado que su análogo en tres dimensiones pues la energía del estado base es $-4E_B$ para ABH libres y $-E_B$ para átomos hidrogenoides tridimensionales. El mismo comportamiento de los *eigenvalores* de la energía se encuentra en los sistemas confinados, es decir, para un tamaño de caja da-

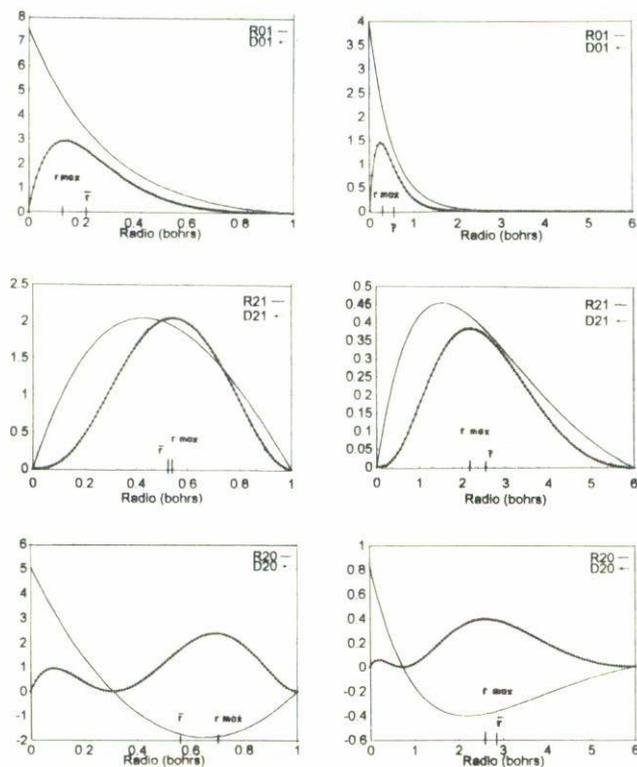


FIGURA 8. Funciones de onda $R'_{nm}(r)$ y las densidades radiales $D_{nm}(\rho)$ para un tamaño de caja $\rho_0 = 1, 6$.

do ρ_0 la energía del átomo de hidrógeno bidimensional es menor que la correspondiente energía del átomo en tres dimensiones.

De la Tabla I vemos que la energía del estado base del átomo bidimensional confinado es casi igual a la del átomo (bidimensional) libre para un valor de $\rho_0 = 4$ Bohrs, mientras que para el átomo de tres dimensiones confinado el correspondiente radio ρ_0 es de 8 Bohrs (ver Ref. 23). Mientras que para los estados E_{21} y E_{20} del átomo de dos dimensiones el valor de ρ_0 , para el cual se tiene la mayor parte de la energía del caso libres es 10 Bohrs, los correspondientes valores para el átomo de tres dimensiones dan un valor cercano a 12 Bohrs. La teoría de perturbaciones junto con el modelo de la partícula libre predicen correctamente los valores de la energía de los AHB para cajas pequeñas ($r_0 < 2$ Bohrs). Este método tan sencillo proporciona una herramienta útil cuando el confinamiento es muy fuerte, ya que entonces la energía cinética de la partícula es mayor que la atracción coulombiana, volviéndose de esta manera un problema muy parecido al de la partícula libre. Es precisamente en este régimen de confinamiento fuerte en donde el método variacional puede presentar inestabilidades numéricas (para algún estado excitado), ya que los parámetros variacionales se pueden volver muy pequeños y las funciones de onda muy planas.

Agradecimientos

Deseamos agradecer al Dr. Salvador Cruz sus comentarios sobre una versión preliminar de este trabajo, y a los doctores José Luis Jiménez y Eugenio Ley-Koo por sus valiosas observaciones en relación a este trabajo. Agradecemos ampliamente el apoyo del CONACyT vía los convenios 0383-N9108 y 400200-5-1399-PE.

1. L. Pauling and E.B. Wilson Jr., *Introduction to Quantum Mechanics*, (McGraw-Hill, New York, 1935); L.I. Schiff, *Quantum Mechanics*, (McGraw-Hill, New York, 1968); L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory*, (Pergamon Press, Oxford, 1965); etc.
2. R. Loudon, *Am. J. Phys.* **27** (1959) 649.
3. M. Andrews, *Am. J. Phys.* **34** (1966) 1194.
4. L.K. Haines and D.H. Roberts, *Am. J. Phys.* **37** (1969) 1145.
5. J.F. Gomes and A.H. Zimmerman, *Am. J. Phys.* **48** (1980) 579.
6. I.R. Lapidus, *Am. J. Phys.* **49** (1981) 807.
7. H.N. Nuñez Yopez, C.A. Vargas, and A.L. Salas-Brito, *Eur. J. Phys.* **8** (1987) 189.
8. G.Q. Hassoun, *Am. J. Phys.* **49** (1981) 143.
9. J.W.K. Huang and A. Kozycki, *Am. J. Phys.* **47** (1979) 1005.
10. T.I. Shibuya and C.E. Wulfman, *Am. J. Phys.* **33** (1965) 570.
11. B. Zaslow and M.E. Zandler, *Am. J. Phys.* **35** (1967) 1118.
12. B.B. Dasgupta, *Am. J. Phys.* **49** (1981) 189.
13. M.M. Nieto, *Am. J. Phys.* **47** (1979) 1067.
14. K. Andrew, *Am. J. Phys.* **58** (1990) 1177.
15. W. Khon and J.M. Luttinger, *Phys. Rev.* **98** (1955) 915.
16. A. Cisneros and H. McIntosh, *J. Math. Phys.* **10** (1969) 277.
17. X.L. Yang *et al.*, *Phys. Rev. A* **43** (1991) 1186.
18. N. Aquino y E. Castaño, *ContactoS* **24** (1998) 16.
19. N. Aquino, Tesis Doctoral, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, México (1997).
20. J.L. Marín and S.A. Cruz, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24** (1991) 2899.
21. W.H. Press, S.A. Teukolski, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, Second edition, (Cambridge university Press, 1992).
22. E. Ley-Koo and S. Rubinstein, *J. Chem. Phys.* **71** (1979) 351.
23. N. Aquino, *Int. J. Quantum Chem.* **54** (1995) 107.