

UNIVERSIDAD DE SONORA  
DIVISIÓN DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA



**“El saber de mis hijos  
hará mi grandeza”**

Estudio teórico de un sistema de dos iones ligados armónicamente  
por un campo central y confinados en una caja esférica  
impenetrable

Tesis que para obtener el grado de Doctor en Nanotecnología

Presenta:

Héctor Antonio Villa Martínez

Comité de tesis:

Dr. Arnulfo Castellanos Moreno (Director)

Dr. Rodrigo A. Rosas Burgos (Co-director)

Dr. Adalberto Corella Madueño

Dr. Raúl Riera Aroche

Dr. Martín Eduardo Molinar Tabares (Externo)

# Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos  
hará mi grandeza"**



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

# Tabla de contenido

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Motivación . . . . .	1
1.2. Problema a resolver . . . . .	2
1.3. Metodología . . . . .	3
1.4. Contribuciones . . . . .	4
1.5. Contenido de la tesis . . . . .	4
<b>2. Comportamiento cuántico y visualización del sistema</b>	<b>5</b>
2.1. Introducción . . . . .	5
2.2. Método de solución . . . . .	8
2.3. Gráficas de energía . . . . .	11
2.4. Gráficas de las funciones de onda . . . . .	16
2.5. Visualización en 3D . . . . .	17
2.6. Conclusiones . . . . .	27
<b>3. Determinación de los coeficientes <math>A</math> y <math>B</math> de Einstein</b>	<b>28</b>
3.1. Introducción . . . . .	28
3.2. Método de solución . . . . .	31
3.3. Resultados . . . . .	32
3.4. Conclusiones . . . . .	40
<b>4. Conclusiones</b>	<b>46</b>
<b>A. Desarrollo analítico de la ecuación radial</b>	<b>48</b>

<b>B. Método de disparo</b>	<b>56</b>
B.1. Algoritmo básico . . . . .	56
B.2. Aplicación del método de disparo a la ecuación de Schrödinger	57
<b>C. Artículos y ponencias</b>	<b>59</b>
C.1. Artículos en revistas de impacto . . . . .	59
C.2. Ponencias . . . . .	59

# Índice de figuras

2.1. Energía contra parámetros . . . . .	15
2.2. Efecto de variar el coeficiente del término de oscilador armónico sobre la función de onda del estado base . . . . .	18
2.3. Efecto de variar el coeficiente del término de oscilador armónico del potencial sobre la función de onda del estado base . . . . .	19
2.4. Efecto de variar el momento angular sobre la función de onda del estado base . . . . .	20
2.5. Efecto de variar el momento angular sobre la función de onda del estado base . . . . .	21
2.6. Interface para editar la función de transferencia . . . . .	24
2.7. Gráfica 3D de un sistema confinado . . . . .	25
2.8. Gráfica 3D para un sistema no confinado . . . . .	26
2.9. Gráfica 3D para un sistema no confinado . . . . .	26
3.1. Espectro no confinado atractivo . . . . .	38
3.2. Espectro no confinado repulsivo . . . . .	39

# Índice de tablas

2.1. Comparación entre los resultados obtenidos por Taut [50] y el método de disparo . . . . .	12
2.2. Comparación entre los resultados obtenidos por Hall et al [55] y el método de disparo para un sistema no confinado. . . . .	13
2.3. Comparación entre los resultados obtenidos por Hall et al [55] y el método de disparo para un sistema confinado por una caja esférica de radio $R = 1$ . . . . .	14
2.4. Máximos en la funciones de onda del estado base para distintos valores del coeficiente del término de oscilador armónico del potencial, $b$ . . . . .	22
2.5. Máximos en la funciones de onda del estado base para distintos valores del momento angular, $l$ . . . . .	23
3.1. Comparación de los máximos en el coeficiente $A$ de Einstein para distintos valores del coeficiente de oscilador armónico, $b$ . . . . .	34
3.2. Máximos y mínimos en la longitud de onda para $b = 0.010$ . . . . .	35
3.3. Comparación de transiciones en el visible para un sistema no confinado atractivo para distintos valores del coeficiente de oscilador armónico, $b$ . . . . .	36
3.4. Comparación de transiciones en el visible para un sistema no confinado repulsivo para distintos valores del coeficiente de oscilador armónico, $b$ . . . . .	37
3.5. Máximos en la longitud de onda para $b = 0.5$ . . . . .	40
3.6. Longitud de onda de las transiciones entre $s$ ( $l = 0$ ) y $p$ ( $l = 1$ ) para el caso no confinado repulsivo. . . . .	41

3.7. Longitud de onda de las transiciones entre $p$ ( $l = 1$ ) y $d$ ( $l = 2$ ) para el caso no confinado repulsivo. . . . .	42
3.8. Longitud de onda de las transiciones entre $d$ ( $l = 2$ ) y $f$ ( $l = 3$ ) para el caso no confinado repulsivo. . . . .	43
3.9. Longitud de onda de las transiciones entre $f$ ( $l = 3$ ) y $g$ ( $l = 4$ ) para el caso no confinado repulsivo. . . . .	44
3.10. Estados con vida media más larga. . . . .	45

Nuper Tarpeio quae sedit culmine cornix,  
'Est bene' non potuit dicere, dixit: 'Erit.'

Gaius Suetonius Tranquillus, *De Vita Caesarum: Vita Domitiani*.

# Agradecimientos

Esta tesis es producto de un trabajo de poco más de cuatro años. Hay muchas personas que participaron de una u otra forma a lo largo de este tiempo y sin las cuales esta tesis no existiría.

En primer lugar tengo que agradecer al director de tesis, Dr. Arnulfo Castellanos Moreno, y al co-director, Dr. Rodrigo A. Rosas Burgos, por el tiempo y esfuerzo dedicado a este trabajo.

A los demás miembros del comité de tesis, Dr. Adalberto Corella Madueño y Dr. Raúl Riera Aroche, por participar en los seminarios semestrales con sus valiosas aportaciones y al Dr. Martín Eduardo Molinar Tabares por tomarse el tiempo para servir en el comité y revisar la tesis.

Al director del posgrado en Nanotecnología, Dr. Mario Enrique Alvarez Ramos, y a las secretarías académicas, Lic. Ana Dolores y Denisse, por las atenciones recibidas.

A los profesores del posgrado por impartir sus conocimientos de manera atinada.

Al Dr. José Luis Poom Medina por presentarme al futuro director y co-director de tesis y a la M. C. Margarita Franco Ortíz por ayudarme en las tareas de mecánica cuántica.

A mis padres, hermanas y familia extendida por su apoyo incondicional.

Por último, a mi esposa Maribell e hija Maribel por su infinita paciencia, dedicación y cariño.

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Motivación

En esta tesis se discuten algunas propiedades físicas de un posible metamaterial. Este puede ser imaginado como un queso gruyere que tiene espacios vacíos de tamaño tan pequeño que en cada uno de ellos caben a lo sumo dos iones. Para los fines de este trabajo, por metamaterial se entiende a un material modificado con el propósito de que tenga propiedades físicas específicas que son determinadas por alguna o algunas necesidades. El objetivo es abrir la oportunidad para pensar en diversas aplicaciones.

El desarrollo tecnológico de las últimas décadas ha dado lugar a la aparición de diversos sistemas físicos que permiten pensar en ellos como constituyentes de materiales de tamaño nanoscópico y cuyo interés se centra en que poseen propiedades físicas que pueden ser manipuladas para lograr con ellos fines concretos.

Si se les compara con las herramientas desarrolladas en la física para estudiar las propiedades de bulto en materiales tradicionales, estos sistemas físicos pueden ser modelados mediante elementos novedosos de la física teórica, por ejemplo pozos cuánticos, alambres cuánticos y puntos cuánticos. Las propiedades físicas de estos materiales son de tal naturaleza que en ellas se reconoce que existen efectos que son provenientes del volumen del sistema y otros que resultan de la presencia de la superficie, de modo que conforme se reduce el tamaño, la superficie empieza a tomar más importancia. Una de las claves para abordar el estudio de estos modelos es el concepto de confinamiento, el cuál permite partir de un sistema físico usual para imponer condiciones de frontera que reducen el espacio accesible a las partículas. En este sentido, la experiencia que brinda la investigación es que los efectos de confinamiento tienden a

desaparecer cuando se alcanzan tamaños del orden de 2 nm o más. Por lo tanto, puede ser conveniente que toda propuesta nueva de un metamaterial sea estudiada mediante las herramientas de la física cuántica, a fin de establecer en que momento empieza a perder importancia dicho confinamiento.

A continuación se presenta una definición de lo que es un sistema cuántico confinado y se mencionan algunas de sus aplicaciones. Un sistema cuántico confinado es aquel que está "descrito por una función de onda que satisface determinadas condiciones de frontera para valores finitos de las coordenadas." [1] Al reducir el tamaño del confinamiento a un rango nanométrico y limitar el movimiento de electrones, se produce el llamado *efecto de confinamiento cuántico*, el cual se nota en que las propiedades del sistema físico empiezan a cambiar, lo cual incluye las funciones de onda y que los niveles de energía se modifiquen [2]. Además la geometría del sistema es importante. Así, si el confinamiento tiene simetría esférica será distinto de uno que tenga simetría cilíndrica.

Con base en las direcciones de confinamiento, los sistemas cuánticos confinados se clasifican de la siguiente manera: [3]

- Bulto. Ninguna dimensión está confinada.
- Pozo cuántico. Una dimensión está confinada y las otras dos libres.
- Alambre cuántico. Dos dimensiones están confinadas y la restante libre.
- Punto cuántico. Las tres dimensiones están confinadas.

Los sistemas cuánticos confinados son importantes porque muchos fenómenos físicos y químicos pueden ocurrir en medios ambientes que se pueden modelar como cavidades, por ejemplo, átomos y moléculas bajo alta presión, impurezas en sólidos y reacciones químicas en tamices moleculares [4]. Los sistemas confinados también tienen aplicación en algunos problemas de astronomía, estado sólido, sistemas libres, propiedades de metales, superconductividad [1].

## 1.2. Problema a resolver

En este trabajo se estudian algunas propiedades físicas de un posible metamaterial que tiene en su interior cavidades de tamaño nanométrico en cada una de las cuales se encuentra una pareja de iones puntuales. La interacción entre cada pareja de iones puede ser modelada por un potencial coulombiano más un potencial de oscilador armónico y una pared de confinamiento duro.

Se supone que las parejas de iones están aisladas, es decir, una pareja de iones en una cavidad no interactúa con otra pareja de iones en otra cavidad. Los iones pueden tener cargas iguales (caso repulsivo) o distintas (caso atractivo).

La familia de potenciales centrales considerada para cada sistema de dos iones está definida por:

$$V(r) = \begin{cases} -a/r + br^2 & \text{si } r < R \\ \infty & \text{si } r \geq R \end{cases} \quad (1.1)$$

donde  $a \in \mathfrak{R}$  es el coeficiente del término coulombiano y  $b > 0$  es el coeficiente del término de oscilador armónico. Para  $a > 0$  el término coulombiano es atractivo, mientras que para  $a < 0$  es repulsivo. El caso especial  $a = 0$  produce un potencial de oscilador armónico puro. La caja esférica impenetrable tiene un radio  $R$ ; el caso no confinado se representa por  $R \rightarrow \infty$ .

Con lo anterior, se establecen los siguientes objetivos:

1. Encontrar la ecuación de Schrödinger que describa el estado cuántico del sistema de dos iones ligados.
2. Resolver numéricamente dicha ecuación de Schrödinger para obtener las funciones de onda.
3. Estudiar la influencia del potencial armónico, del momento angular y del tamaño de la caja confinante sobre la energía y las funciones de onda del estado base.
4. Estudiar la influencia del potencial armónico, del momento angular y del tamaño de la caja confinante sobre el espectro de emisión electromagnética.

### 1.3. Metodología

El trabajo se dividió en dos etapas, como se explica a continuación.

En la primera etapa se hicieron las siguientes tareas: se planteó el sistema de dos iones ligados armónicamente como un problema de dos cuerpos y de forma analítica se encontró la correspondiente ecuación radial de Schrödinger. Como esta ecuación no es soluble analíticamente, se programó una variante del método de disparo para obtener las funciones de onda numéricamente. Se estudió el impacto sobre la energía y las funciones de onda al modificar los parámetros del potencial efectivo. Esta tarea se realizó mediante otro programa

para obtener los datos y usando MatLab para obtener las gráficas de las funciones de onda y de energía. Por último, se programó una versión del método de ray-casting volumétrico para visualizar en 3-D el espacio de probabilidades correspondientes a las funciones de onda.

En la segunda etapa se implementó un programa para obtener las transiciones permitidas entre los estados cuánticos del sistema de dos iones, calcular los coeficientes  $A$  y  $B$  de Einstein y obtener las vida media de los estados excitados. Mediante otro programa se hizo una visualización del diagrama espectral de aquellas transiciones con longitud de onda cercanas al visible.

## 1.4. Contribuciones

El modelo de sistema confinado de dos iones puntuales ligados armónicamente por un potencial central desarrollado en este trabajo se puede adaptar a iones de cualquier material. Lo único que hay que hacer es substituir los parámetros del material (masa, signo del producto de las cargas y la carga neta) en la Ecuación 2.4.

## 1.5. Contenido de la tesis

El Capítulo 2 describe el comportamiento cuántico y visualización del sistema de dos iones. En el Capítulo 3 se describe lo correspondiente al estudio de la vida media de los estados excitados del sistema. El Capítulo 4 presenta las conclusiones de este trabajo. El Apéndice A presenta el desarrollo analítico para obtener la ecuación radial (Ecuación 2.4). El Apéndice B explica tanto el algoritmo básico del método de disparo como la variante utilizada en este trabajo. El Apéndice C lista los artículos y ponencias obtenidos al realizar el presente trabajo.

## Capítulo 2

# Comportamiento cuántico y visualización del sistema

El objetivo de este capítulo es presentar el método usado para obtener las funciones de onda que describen el comportamiento cuántico del sistema de dos iones ligados armónicamente y mostrar las correspondientes gráficas de las funciones de onda, de energía y una visualización en 3-D del espacio de probabilidades asociado a las funciones de onda.

El capítulo está organizado de la siguiente manera: la Sección 2.1 presenta una introducción y una breve reseña histórica. La Sección 2.2 discute el modelo teórico utilizado y el método de solución. Los resultados del estudio son presentados y discutidos en las secciones 2.3 y 2.4. La visualización de estos resultados se incluye en la Sección 2.5. Las conclusiones de este capítulo están en la Sección 2.6.

### 2.1. Introducción

Las técnicas de nanofabricación permiten la obtención de una gama de estructuras nanométricas, tales como puntos cuánticos, alambres cuánticos, y pozos cuánticos con gran precisión [5, 6]. En particular, los puntos cuánticos dentro de campos magnéticos han sido ampliamente estudiados en el contexto de la nanotecnología, tanto teórica, como experimentalmente [7–13]. El confinamiento para estos sistemas se puede producir a través de diferencias en las bandas prohibidas de un semiconductor, mediante la aplicación de campos eléctricos o magnéticos, o una combinación de ambas técnicas. Por lo tanto, algunas propiedades de estos materiales se pueden controlar, lo cual hace posible utilizarlos con fines tecnológicos. Los estudios teóricos de estos sistemas

permiten desarrollar la comprensión de su comportamiento. Un sistema cuántico está completamente resuelto cuando se obtienen el espectro de energía y las funciones de onda correspondientes. Por lo tanto, un enfoque numérico, además de otras técnicas computacionales, se puede usar para dar una idea del efecto del confinamiento y la influencia de dos o más potenciales en un sistema. Para esto, se pueden utilizar varios potenciales modelo [14–18].

El sistema objeto de este estudio consta de dos iones puntuales ligados armónicamente por un potencial de campo central confinado por una caja esférica de radio  $R$ . Los iones pueden tener cargas iguales (caso repulsivo) o distintas (caso atractivo).

La familia de potenciales centrales considerada para este sistema está definida por:

$$V(r) = \begin{cases} -a/r + br^2 & \text{si } r < R \\ \infty & \text{si } r \geq R \end{cases} \quad (2.1)$$

donde  $a \in \Re$  es el coeficiente del término coulombiano y  $b > 0$  es el coeficiente del término de oscilador armónico. Para  $a > 0$  el término coulombiano es atractivo, mientras que para  $a < 0$  es repulsivo. El caso especial  $a = 0$  produce un potencial de oscilador armónico puro. La caja esférica impenetrable tiene un radio  $R$ ; el caso no confinado se representa por  $R \rightarrow \infty$ .

Este tipo de potencial no es un problema sencillo. De acuerdo con la clasificación desarrollada por Infeld y Hull [19], el problema de Kepler es una factorización<sup>1</sup> de tipo F, mientras que un problema de oscilador lineal es una factorización tipo D. La tabla de factorizaciones dadas por los autores no presenta una combinación entre ellos. Por lo tanto, no hay manera de reemplazar la ecuación diferencial de segundo orden por un par equivalente de ecuaciones de primer orden, de tal manera que cada una de ellas tenga asociados tanto un operador como un método para encontrar todas las soluciones con sus valores propios.

A continuación se presenta una breve reseña histórica de resultados relacionados con el presente trabajo. El modelo del átomo de hidrógeno confinado por una caja esférica con paredes impenetrables fue propuesto por primera vez en 1937 [20] y resuelto en términos de funciones hipergeométricas confluentes

---

<sup>1</sup>El problema de Kepler es el caso de potencial atractivo que varía como  $1/r$ . Se llama coulombiano si incluye también el repulsivo. El método de factorización permite resolver problemas con condiciones en la frontera que son expresados mediante ecuaciones diferenciales de segundo orden. Proporciona un método algebraico para calcular las funciones y valores propios correspondientes.

en 1938 [21]. Después de estos trabajos pioneros, el modelo de caja de confinamiento con límites duros o suaves ha sido ampliamente estudiado [22–31].

La ecuación de Schrödinger para un electrón en un campo magnético uniforme confinado por un potencial de oscilador armónico fue resuelto en 1928 por Fock [32] y tres años después de nuevo por Darwin [33]. Desde entonces, numerosos estudios sobre una variedad de aplicaciones de los potenciales de tipo oscilador armónico se han publicado [34–36]. Una variedad de modelos exacta y cuasi-exactamente solubles se han discutido recientemente [37]. Muchos otros ejemplos se pueden encontrar en el libro de Ushveridze [38] y en un artículo de revisión de Jaskolski [30]. Modelos de puntos cuánticos confinados por un potencial de oscilador armónico [39–41], y por otros tipos de potenciales [42], han recibido especial atención.

El confinamiento suave regular de sistemas coulombianos se ha desarrollado mediante la superposición del apantallamiento de Debye [43]. Ese potencial confinante ha tenido éxito en la explicación del corrimiento en la frecuencia de las líneas espectrales de rayos X emitidos por plasmas implosionados por láser en el límite de alta densidad del plasma [44, 45], en donde el potencial efectivo adopta la forma dada por el potencial coulombiano más un oscilador. Una revisión que abarca el desarrollo y las aplicaciones de potenciales modelo confinantes ha sido publicado [46, 47]. Se han estudiado de forma independiente el átomo de hidrógeno y los potenciales de oscilador armónico isotrópicos bajo el efecto de confinamiento de una cavidad esférica impenetrable de radio  $R$ , y sus características espectrales han sido analizados [48, 49] en términos de resultados cuasi-exactos.

El problema de encontrar los valores propios de un hamiltoniano que describe un sistema de dos electrones interactuando en un potencial coulombiano en un potencial externo de oscilador armónico se demostró ser analíticamente soluble [50]. Con anterioridad, se han reportado algunos cálculos exploratorios [51–54]. El tratamiento de potenciales como el estudiado en este trabajo ha aparecido recientemente en la literatura. Hall et al [55] investiga las características espectrales de un potencial del tipo  $-a/r + br^2$  confinado de manera esférica. A. Soylyu [56] estudia dos electrones que interactúan dentro de un punto cuántico influenciados por campos eléctricos y magnéticos mediante el uso de un método asintótico, de modo que los valores propios de la energía se pueden calcular a partir de una condición de cuantización. Sus resultados dan la energía espectral del problema. A. Mathew y M. K. Nandy [57] estudia dos electrones en un punto cuántico cilíndrico. Lozovski y Piatnytsia [58] investiga las partes atractivas y repulsivas del potencial interactuante entre dos nanopartículas no puntuales. Jayalatha y Rayappan [59] analiza la naturaleza de la interacción de las partículas y calculan la energía cohesiva de las

nanopartículas de plata que emplean el potencial de Lennard-Jones.

## 2.2. Método de solución

La estructura interna de los iones no se toma en cuenta. Por lo tanto, el sistema se reduce a un problema de dos cuerpos. El hamiltoniano para este sistema es (ver Apéndice A):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(r) \quad (2.2)$$

donde  $\hbar$  es la constante reducida de Planck y  $m_1$  y  $m_2$  son las masas del ion 1 y del ion 2, respectivamente.

$V(r)$  es un potencial central de la forma:

$$V(r) = \sigma \frac{N_1 N_2 e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{1}{r} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \quad (2.3)$$

donde  $N_1$  y  $N_2$  son las cargas netas del ion 1 y 2, respectivamente;  $\sigma = +1$  si las cargas del ion 1 y del ion 2 tienen el mismo signo, o -1 en otro caso;  $\mu$  es la masa reducida;  $r$  es la distancia entre los dos iones;  $\epsilon_0$  es la permitividad eléctrica del espacio libre;  $\epsilon$  es la permitividad relativa del material en el cual los iones están inmersos;  $\omega$  es la frecuencia angular del término de oscilador armónico.

Después de escribir el hamiltoniano en coordenadas del centro de masa de los dos iones y de realizar el procedimiento descrito en el Apéndice A, la ecuación radial resultante es adimensionalizada para obtener la siguiente ecuación:

$$-\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \left( \sigma \frac{a}{x} + bx^2 + \frac{l(l+1)}{x^2} \right) u(x) = \alpha E u(x) \quad (2.4)$$

donde  $\alpha = \mu/m$  ( $\mu$  es la masa reducida de los dos iones,  $m$  es la masa del electrón);  $a = \frac{2\alpha N_1 N_2}{\epsilon}$ ;  $b = \frac{4^4 \alpha^2 \pi^4 \epsilon_0^4 \hbar^6}{m^2 e^8} \omega^2$ ;  $e$  es la carga elemental;  $N_1$  y  $N_2$  son las cargas netas del ion 1 y 2, respectivamente;  $\epsilon_0$  es la permitividad eléctrica del espacio libre;  $\epsilon$  es la permitividad relativa del material en el cual los iones están inmersos;  $\hbar$  es la constante reducida de Planck;  $\sigma = +1$  si las cargas del ion 1 y del ion 2 tienen el mismo signo, o -1 en otro caso;  $\omega$  es la frecuencia angular del término de oscilador armónico.

La Ecuación 2.4 es una ecuación de Schrödinger con un potencial efectivo dado por:

$$V_{eff}(x) = \sigma \frac{a}{x} + bx^2 + \frac{l(l+1)}{x^2} \quad (2.5)$$

donde  $l(l+1)/x^2$  es el término centrífugo y  $l = 0, 1, 2, \dots$

La Ecuación 2.4 es un ejemplo de un problema de valores propios con valores en la frontera. Tiene dos incógnitas: la función de onda  $u(x)$  y la energía propia  $E$ , la cual es un valor propio porque solo puede tomar una selección de valores para que una solución sea considerada como aceptable una vez aplicados los valores en la frontera. Para el sistema de dos iones ligados armónicamente el valor en la frontera izquierda es  $u(0) = 0$ . El valor de la frontera derecha depende de si el sistema es confinado o no. Para un sistema confinado por una caja esférica de radio  $R$ , el valor en la frontera derecha es  $u(R) = 0$ . Por otro lado, para un sistema no confinado, como  $u(x) \rightarrow 0$  cuando  $x \rightarrow \infty$ , se puede fijar un límite de integración,  $x_{max}$ , para el cual  $|u(x_{max})| < \varepsilon$  para cualquier  $\varepsilon$  arbitrario, y considerar el valor en la frontera derecha como  $u(x_{max}) \approx 0$ .

Considerando lo anterior utilizamos las siguientes técnicas para resolver la Ecuación 2.4: una variante del método de disparo para encontrar las energías propias, el método de Numerov para integrar la ecuación diferencial y el método de bisección para aproximar dichas energías con una precisión arbitraria.

El método de disparo es una alternativa para resolver ecuaciones diferenciales con valores en la frontera. El método básico se describe en Burden y Faires [60, p. 606] y se puede modificar para resolver problemas de valores propios que involucren la ecuación de Schrödinger [61–63].

Se escogió el método de Numerov porque permite resolver directamente ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden en las cuales el término con la primera derivada no aparece, mientras que otros métodos, como Runge-Kutta, solo pueden resolver ecuaciones de segundo orden planteando un sistema de ecuaciones simultáneas de primer orden.

En resumen, nuestro algoritmo de disparo para resolver la ecuación radial de Schrödinger se expresa en pseudocódigo como sigue:

```

DISPAROSCHRODINGER(a, b, l, N, r0)
1 // a y b son los coeficientes del potencial
2 // l es el valor del momento angular.
3 // N es la cantidad de funciones de onda que se desean encontrar.
4 // r0 es el limite de integracion.
5 n = 0
6 e = eMin
7 u1[] = NUMEROV(e, a, b, l, N)
8 e = e + stepE
9 while n < N
10     u2[] = NUMEROV(e, a, b, l, N)
11     if u1[r0] * u2[r0] < 0
12         usol[], esol = BISECCION(e - stepE, e, u1[], u2[])
13         GUARDA(usol[], esol)
14         n = n + 1
15     u1[] = u2[]
16     e = e + stepE
17 return

```

Antes de abundar en la solución del sistema de dos iones ligados armónicamente, validamos el método de disparo recién descrito comparando nuestros resultados con los reportados en dos artículos en los cuales se emplean potenciales similares al estudiado en este trabajo (Ecuación 2.1).

En el primer artículo, Taut [50] describe un sistema de dos electrones en un potencial externo de oscilador armónico. Para este sistema, el hamiltoniano es:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 + \frac{1}{2}\omega^2 r_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 + \frac{1}{2}\omega^2 r_2^2 + \frac{1}{|r_1 - r_2|} \quad (2.6)$$

Taut utiliza unidades atómicas en las cuales  $\hbar = m = e = 1$ .

En el segundo artículo Hall et al [55] estudian las propiedades analíticas generadas por la clase de potenciales centrales determinada por  $V(r) = -\frac{a}{r} + br^2$ . Aquí, el hamiltoniano es:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V(r) \quad V(r) = -\frac{a}{r} + br^2 \quad (2.7)$$

donde  $a \in \Re$  y  $b > 0$  son los coeficientes de los términos coulombiano y de oscilador armónico, respectivamente. Al igual que en el artículo de Taut  $\hbar = m = e = 1$ .

La Tabla 2.1 muestra la comparación entre los resultados reportados en la Tabla I de Taut [50] y nuestro método de disparo. El significado de cada columna es como sigue.  $n$  y  $N_r$  son el orden y el número de ceros del polinomio de la función de onda calculado por Taut.  $1/\omega_r$  es el inverso de la raíz cuadrada del coeficiente del término de oscilador armónico en la función potencial mostrada en la Ecuación (2.6).  $e'$  es la energía reportada por Taut.  $e$  es la energía obtenida a través de nuestro método de disparo.  $|e - e'|$  es el valor absoluto de la diferencia entre las dos energías.

La Tabla 2.2 muestra la comparación entre los resultados reportados en la Tabla 2 de Hall et al [55] y nuestro método de disparo para el caso de un sistema no confinado. El significado de cada columna es como sigue.  $l$ ,  $n$  y  $e'$  son el momento angular, el número de función de onda y la energía, respectivamente, tal y como se reporta en Hall et al.  $e$  es la energía obtenida a través de nuestro método de disparo.  $|e - e'|$  es el valor absoluto de la diferencia entre las dos energías.

Por último, la Tabla 2.3 muestra la comparación entre los resultados reportados en la Tabla 3 de Hall et al [55] y nuestro método de disparo para el caso de un sistema confinado por una caja esférica de radio  $R = 1$ . El significado de las columnas es el mismo que en el párrafo anterior.

En conclusión, pudimos reproducir los resultados presentados en los dos artículos arriba citados.

## 2.3. Gráficas de energía

Ahora se presentan los principales resultados obtenidos en esta parte del trabajo. Se estudió el efecto de cambiar los parámetros del potencial efectivo (Ecuación 2.5) sobre la energía del estado base (esta sección), sobre las funciones de onda del estado base (Sección 2.4) y sobre las densidades de probabilidad (Sección 2.5).

La primera gráfica de energía, que se muestra en la Figura 2.1(a), se obtiene variando el coeficiente del término de oscilador armónico,  $b$ , de 0.01 a 1 en incrementos de 0.01, dejando fijo el impulso angular  $l = 0$  y teniendo en cuenta dos casos para el coeficiente del término coulombiano,  $a$ . Un caso es con  $a = +1$  (potencial coulombiano atractivo) y otro por  $a = -1$  (potencial coulombiano repulsivo). Esto se hizo para varios radios de confinamiento,  $R = 1$ ,  $R = 1.5$ ,  $R = 2$  y  $R = \infty$  (no confinado). El eje horizontal en la gráfica de la energía es el valor de  $b$ , mientras que el eje vertical es el valor de la energía del estado base en hartrees.

La segunda gráfica de energía, que se muestra en la Figura 2.1(b), se obtiene

Tabla 2.1: Comparación entre los resultados obtenidos por Taut [50] y el método de disparo.  $n$  y  $N_r$  son el orden y el número de ceros de los polinomios de las funciones de onda calculadas en Taut.  $\omega_r$  es el coeficiente del término de oscilador armónico en la Ecuación (2.6).  $e'$  es la energía reportada en la Tabla I de [50].  $e$  es la energía obtenida por nuestro método de disparo.  $|e - e'|$  es el error absoluto entre las dos energías. Pudimos reproducir los valores reportados en Taut.

$n$	$1/\omega_r$	$N_r$	$e'$	$e$	$ e - e' $
2	4.00000	0	0.6250	0.6250	0.0000
3	20.00000	0	0.1750	0.1750	0.0000
4	54.73860	0	0.0822	0.0822	0.0000
4	5.26137	1	0.8553	0.8553	0.0000
5	115.29900	0	0.0477	0.0477	0.0000
5	24.70100	1	0.2227	0.2227	0.0000
6	208.80300	0	0.0311	0.0311	0.0000
6	64.81310	1	0.1003	0.1003	0.0000
6	6.38432	2	1.0181	1.0181	0.0000
7	342.36600	0	0.0219	0.0219	0.0000
7	132.63800	1	0.0565	0.0565	0.0000
7	28.99620	2	0.2587	0.2587	0.0000
8	523.10200	0	0.0162	0.0162	0.0000
8	235.30100	1	0.0361	0.0361	0.0000
8	74.17740	2	0.1146	0.1146	0.0000
8	7.41903	3	1.1457	1.1457	0.0000
9	758.12400	0	0.0125	0.0125	0.0000
9	379.92500	1	0.0250	0.0250	0.0000
9	148.94200	2	0.0638	0.0638	0.0000
9	33.00880	3	0.2878	0.2878	0.0000
10	1054.54000	0	0.0100	0.0100	0.0000
10	573.62500	1	0.0183	0.0183	0.0000
10	260.42700	2	0.0403	0.0403	0.0000
10	83.01520	3	0.1265	0.1265	0.0000
10	8.39091	4	1.2514	1.2515	0.0001
11	1419.47000	0	0.0081	0.0081	0.0000
11	823.51500	1	0.0140	0.0140	0.0000
11	415.76400	2	0.0277	0.0277	0.0000
11	164.44500	3	0.0699	0.0700	0.0001
11	36.80970	4	0.3124	0.3125	0.0001

Tabla 2.2: Comparación entre los resultados obtenidos por Hall et al [55] y el método de disparo para un sistema no confinado.  $a$  y  $b$  son los coeficientes de la función de potencial en la Ecuación 2.7.  $l$ ,  $n$  y  $e'$  son el momento angular, el número de función de onda y la energía, respectivamente, tal y como están reportados en la Tabla 2 de [55].  $e$  es la energía obtenida por nuestro método de disparo.  $|e - e'|$  es el error absoluto entre las dos energías. Pudimos reproducir los resultados reportados en Hall et al.

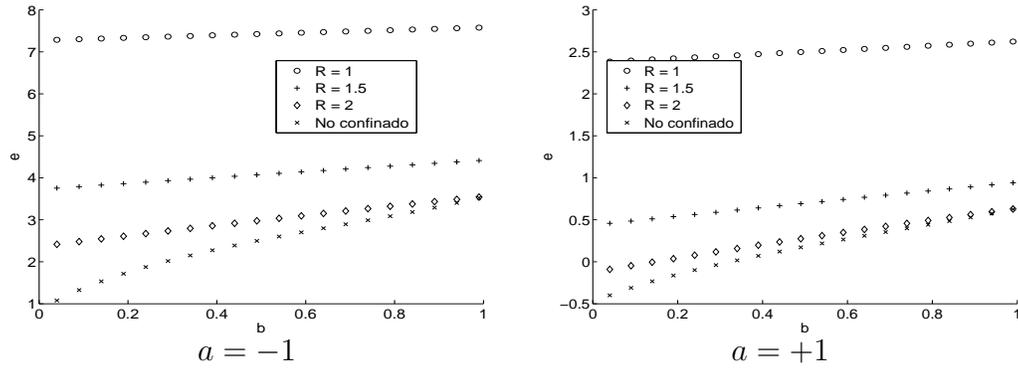
$a = 1, b = 0.5$				
$n$	$l$	$e'$	$e$	$ e - e' $
0	0	0.179668484653553873	0.179668588412385640	1.04E-07
1	0	2.500000000000000000	2.500000092772058500	9.28E-08
2	0	4.631952408873053214	4.631952505117724000	9.62E-08
3	0	6.712595725661429760	6.712595826486423000	1.01E-07
4	0	8.769519600328899714	8.769519705910994000	1.06E-07
1	1	3.801929609626278046	3.801929609564119500	6.21E-11
1	2	4.930673420047524772	4.930673420017106000	3.04E-11
1	3	6.006537298710828780	6.006537298778420500	6.76E-11
1	4	7.058140776824529475	7.058140776815444000	9.08E-12

$a = -1, b = 0.5$				
$n$	$l$	$e'$	$e$	$ e - e' $
0	0	2.500000000000000000	2.499999995136125400	4.86E-09
1	0	4.380233836413610273	4.380233825894184000	1.05E-08
2	0	6.301066353339463595	6.301066337473399000	1.59E-08
3	0	8.243517978923477298	8.243517957766368000	2.12E-08
4	0	10.199062810923865963	10.199062784913053000	2.60E-08
5	0	12.163259523048320928	12.163259492479558000	3.06E-08
0	1	3.219314119830611360	3.219314119846713000	1.61E-11
0	2	4.087227795734562981	4.087227795732852000	1.71E-12
0	3	5.007681882732318957	5.007681882633564000	9.88E-11
0	4	5.953327675284371524	5.953327675249616000	3.48E-11

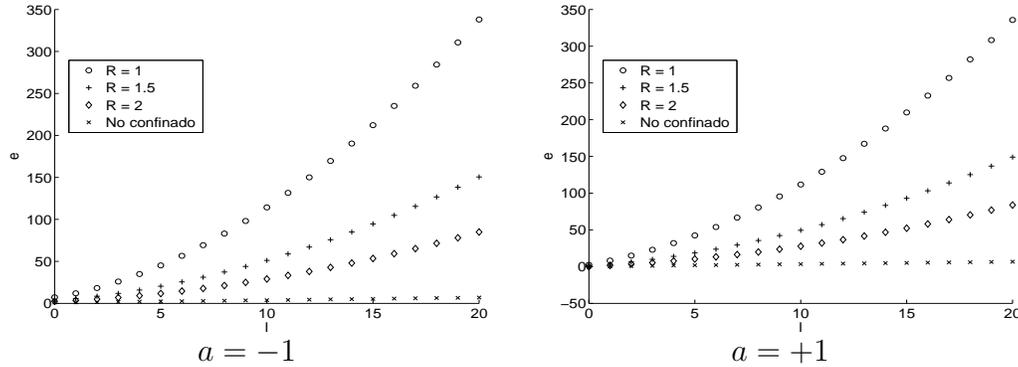
Tabla 2.3: Comparación entre los resultados obtenidos por Hall et al [55] y el método de disparo para un sistema confinado por una caja esférica de radio  $R = 1$ .  $a$  y  $b$  son los coeficientes de la función potencial en la Ecuación 2.7.  $l$ ,  $n$  y  $e'$  son el momento angular, el número de función de onda y la energía, respectivamente, tal y como está reportado en la Tabla 3 de [55].  $e$  es la energía obtenida con el método de disparo.  $|e - e'|$  es el error absoluto entre las dos energías. Pudimos reproducir los resultados reportados en Hall et al.

$a = 1, b = 0.5, R = 1$				
$n$	$l$	$e'$	$e$	$ e - e' $
0	0	2.500000000000000000	2.500000488281086000	4.88E-07
1	0	16.733064961893308967	16.733066406247467000	1.44E-06
2	0	41.029002263262675364	41.029003906245080000	1.64E-06
3	0	75.297038665283580892	75.297042968745490000	4.30E-06
4	0	119.493804921354632859	119.493812500206520000	7.58E-06
0	1	8.404448391842929575	8.404448391543934000	2.99E-10
0	2	15.183570193031143001	15.183570193021886000	9.30E-12
0	3	23.137256709545767885	23.137256709548865000	3.10E-12
0	4	32.295207272878341541	32.295207272949895000	7.15E-11

$a = -1, b = 0.5, R = 1$				
$n$	$l$	$e'$	$e$	$ e - e' $
0	0	7.427602986235605737	7.427602905274252000	8.10E-08
1	0	22.954866627528634394	22.954866210942573000	4.17E-07
2	0	48.054781032847609425	48.054779296853700000	1.74E-06
3	0	82.897495765909946966	82.897492187531780000	3.58E-06
4	0	127.540759830804826131	127.540757812744940000	2.02E-06
0	1	12.118629877542593085	12.118629877184269000	3.58E-10
0	2	18.456796172766948526	18.456796172490762000	2.76E-10
0	3	26.173002039626403748	26.173002039505710000	1.21E-10
0	4	35.179533437869611594	35.179533437719044000	1.51E-10



(a) Energía contra el término de oscilador armónico.



(b) Energía contra momento angular.

Figura 2.1: Gráficas de la energía del estado base contra parámetros. En ambos casos la energía del estado base disminuye conforme crece el radio de confinamiento.

variando el valor del momento angular,  $l$ , de 0 a 20, dejando fijo el coeficiente del término de oscilador armónico  $b = 0.05$ . Al igual que en el primer estudio, esto se hizo primero para un potencial coulombiano atractivo y luego para uno repulsivo. En ambos casos se utilizaron los mismos radios de confinamiento del primer estudio. En esta gráfica de energía el eje horizontal es el valor de  $l$ , mientras que el eje vertical es el valor de la energía del estado base en hartrees.

Se observa que en ambos casos la energía del estado base disminuye a medida que el radio de confinamiento crece.

## 2.4. Gráficas de las funciones de onda

Esta sección presenta las gráficas de las funciones de onda obtenidas al investigar el efecto de cambiar los valores de los parámetros del potencial efectivo (Ecuación 2.5) en la función de onda del estado base. Con este fin, se realizaron dos estudios.

En el primer estudio el valor del momento angular se deja fijo en  $l = 0$  y se compara la función de onda del estado base para los siguientes valores del término de oscilador armónico  $b = 0.01$ ,  $b = 0.5$  y  $b = 1$ . Esto se hizo primero para un potencial coulombiano atractivo ( $a = +1$ ) y luego para uno repulsivo ( $a = -1$ ), en ambos casos para distintos radios de confinamiento ( $R = 1$ ,  $R = 1.5$ ,  $R = 2$  y  $R = \infty$ ). La Figura 2.2 muestra el resultado de esta comparación para  $R = 1$  y  $R = 1.5$ , mientras que la Figura 2.3 lo hace para  $R = 2$  y  $R = \infty$ . En la parte inferior de cada figura se muestra la función de onda del estado base para cada valor de  $b$ . La parte superior muestra la gráfica del potencial correspondiente. Como puede verse en dichas figuras, al aumentar el valor de  $b$  la función de onda se comprime hacia la izquierda. El efecto es más notorio cuando el radio de confinamiento crece, de tal forma que para  $b = 1$  la función de onda para un sistema no confinado es semejante a la del sistema confinado con  $R = 2$ . Este corrimiento a la izquierda se puede comprobar en la Tabla 2.4 la cual muestra los valores máximos para cada función de onda. Además, la misma tabla muestra que para valores iguales de  $b$  y  $R$ , el máximo de la función de onda está más a la derecha para  $a = -1$  (potencial coulombiano repulsivo) que para  $a = +1$  (potencial coulombiano atractivo).

En el segundo estudio el valor del coeficiente del término de oscilador armónico se deja fijo en  $b = 0.05$  y se compara la función de onda del estado base para los siguientes valores del momento angular  $l = 0$ ,  $l = 10$  y  $l = 20$ . Esto se hizo primero para un potencial coulombiano atractivo ( $a = +1$ ) y luego para uno repulsivo ( $a = -1$ ), y para distintos radios de confinamiento ( $R = 1$ ,  $R = 1.5$ ,  $R = 2$  y  $R = \infty$ ). Las Figuras 2.4 y 2.5 muestran el resultado de esta comparación para  $R = 1$  y  $R = 1.5$ , y para  $R = 2$  y  $R = \infty$ , respectivamente. En la parte inferior de cada figura se muestra la función de onda del estado base para cada valor de  $l$ . Por otro lado, en la parte superior está la gráfica del potencial correspondiente. Como puede verse en dichas figuras, al aumentar el valor de  $l$  la función de onda se comprime hacia la derecha. Este corrimiento a la derecha se puede comprobar en la Tabla 2.5 la cual muestra los valores máximos para cada función de onda. Aquí también se nota que para valores iguales de  $l$  y  $R$ , el máximo de la función de onda está más a la derecha para un potencial coulombiano repulsivo que para uno atractivo. Sin embargo, para

$l = 20$  este último efecto casi desaparece.

## 2.5. Visualización en 3D

En esta sección investigamos la visualización en tres dimensiones (3D) del sistema de dos iones armónicamente ligados usando ray casting volumétrico, un método que permite la visualización de campos escalares tridimensionales [64, Ch. 7], [65, Part III]. En este caso, el campo escalar proviene de la interpretación standard del módulo cuadrado de la función de onda como una densidad de probabilidad. Es decir, el campo escalar se obtiene de evaluar la siguiente ecuación:

$$|U(\mathbf{r})|^2 = \frac{u^2(r)}{r^2} |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 \quad (2.8)$$

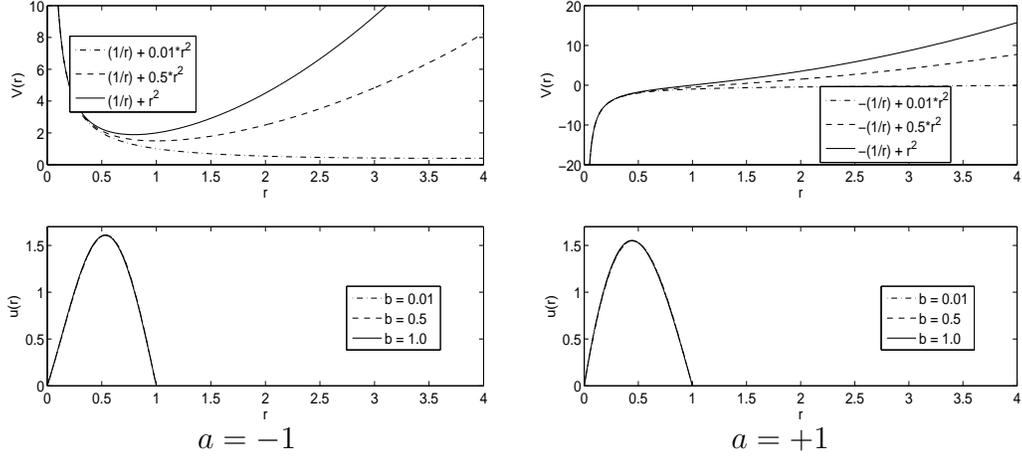
donde  $u(\mathbf{r})$  es la solución a la Ecuación 2.4 que se obtiene empleando el método de disparo descrito en la Sección 2.2.

El campo escalar resultante es un conjunto de puntos del tipo  $(x, y, z, v)$ , donde  $x, y$  y  $z$  son las coordenadas cartesianas del punto y  $v$  es proporcional al valor de la probabilidad asociada con ese punto. En este trabajo, los valores de las probabilidades se normalizaron entre 0 y 1. A continuación, a cada punto en el espacio se le asigna un color y una opacidad por medio de una función de transferencia, que puede ser definida en parte por los usuarios utilizando la interface mostrada en la figura 2.6. Como se ve en la parte superior, el color se le asigna usando una interpolación lineal entre el azul (probabilidad baja) y rojo (probabilidad alta). La opacidad, por otro lado, puede ser editada por los usuarios a través de la inserción, eliminación y movimiento de puntos de control.

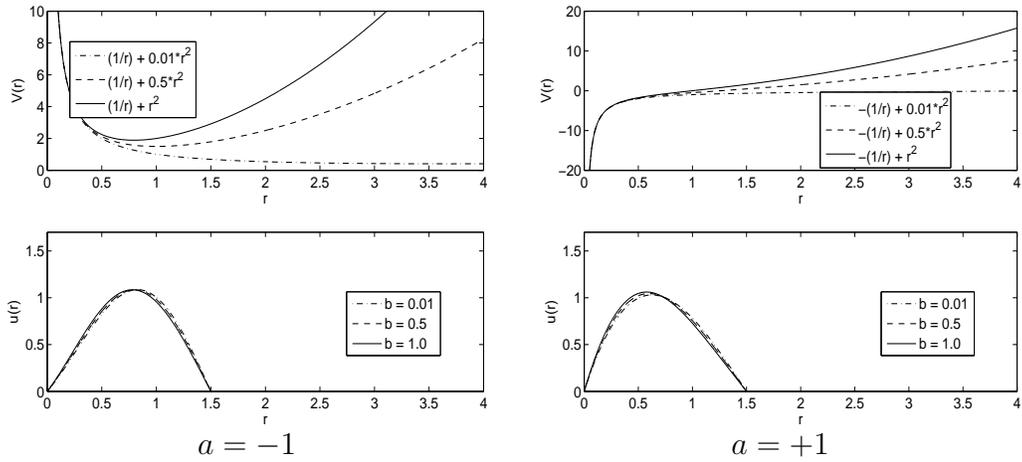
En las siguientes figuras, las regiones de puntos asociados con una alta probabilidad se muestran en un tono rojizo. Por otro lado, las regiones de puntos con una baja probabilidad se muestran en un tono azul. Hay que tener en cuenta que los puntos con probabilidad 0 son transparentes, lo que permite observar la estructura interna del sistema.

La Figura 2.7 muestra la visualización de un sistema confinado con  $R = 2$ . Los valores de los parámetros son como siguen:  $a = +1$ ,  $b = 0.05$ ,  $l = 4$ ,  $n = 3$ ,  $m = 1$ . La cámara virtual está alineada con el eje  $y$  a 2.5 radios de Bohr del origen.

La Figura 2.8 muestra el efecto del parámetro de oscilador armónico,  $b$ , para un sistema no confinado. Los valores de los demás parámetros:  $a = +1$ ,  $l = 2$ ,  $n = 0$ ,  $m = 0$ . La cámara virtual está alineada con el eje  $y$  a 5.5 radios de

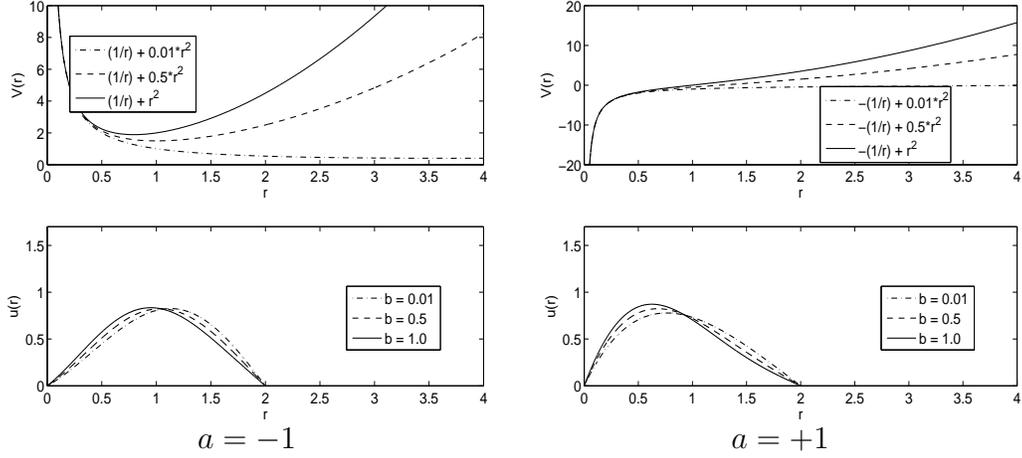


(a)  $R = 1$ .

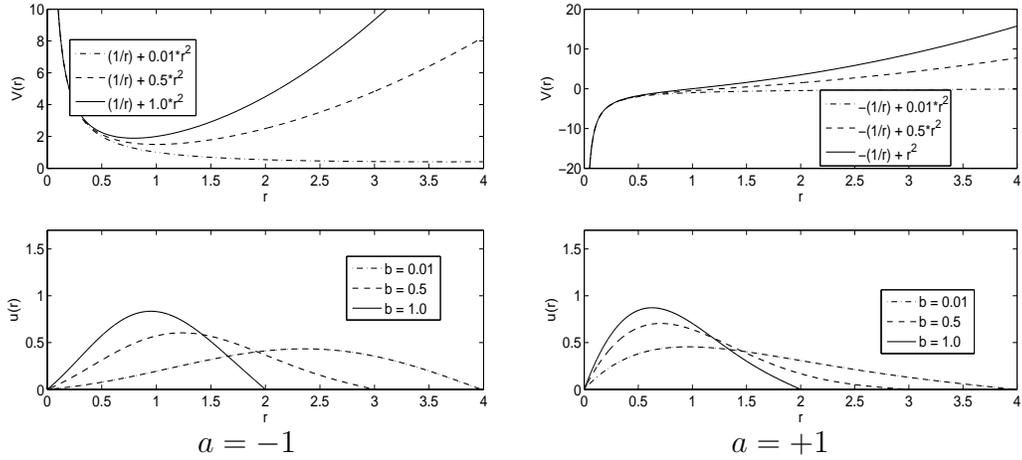


(b)  $R = 1.5$ .

Figura 2.2: Efecto de variar el coeficiente del término de oscilador armónico,  $b$ , sobre la función de onda del estado base para distintos radios de confinamiento  $R$ . La función de onda se corre a la izquierda conforme  $b$  crece. Además, para valores iguales de  $b$  y  $R$ , el máximo de la función de onda está más a la derecha para  $a = -1$  (potencial coulombiano repulsivo) que para  $a = +1$  (potencial coulombiano atractivo).

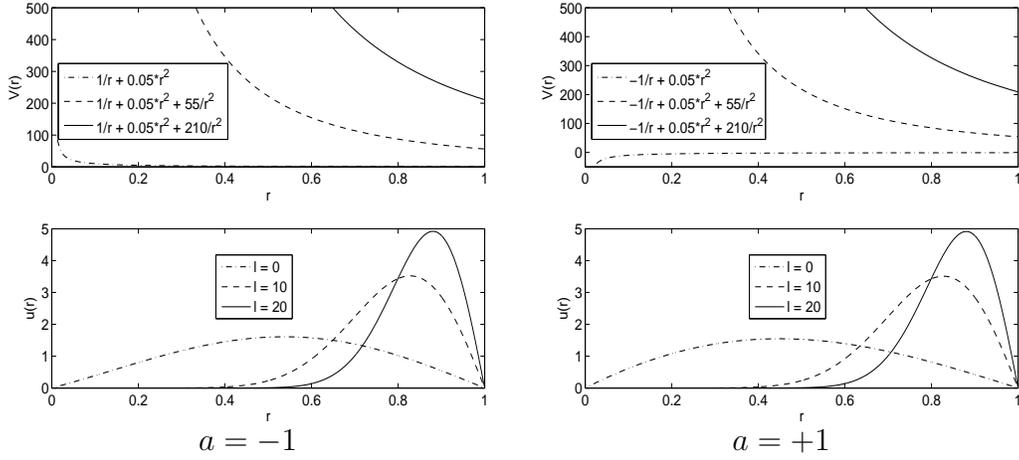


(c)  $R = 2$ .

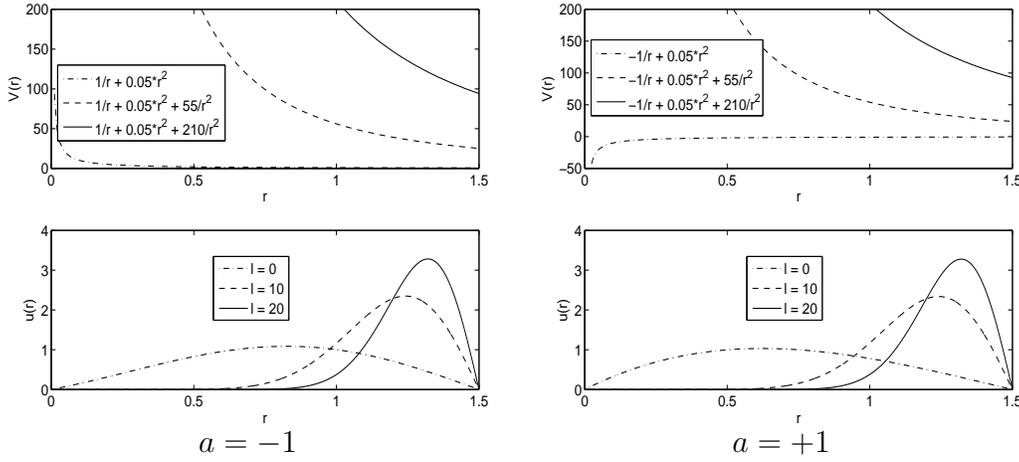


(d) No confinado.

Figura 2.3: Efecto de variar el coeficiente del término de oscilador armónico,  $b$ , sobre la función de onda del estado base para distintos radios de confinamiento  $R$ . La función de onda se corre a la izquierda conforme  $b$  crece. Además, para valores iguales de  $b$  y  $R$ , el máximo de la función de onda está más a la derecha para  $a = -1$  (potencial coulombiano repulsivo) que para  $a = +1$  (potencial coulombiano atractivo).

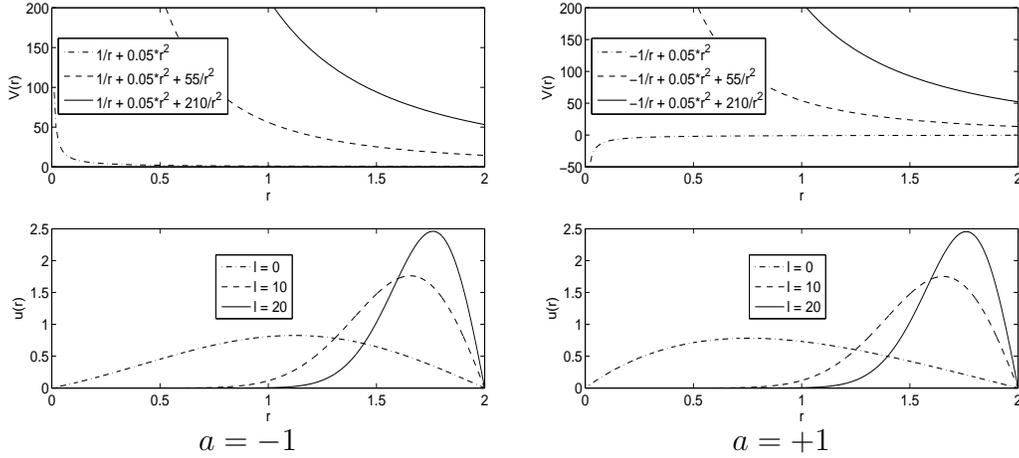


(a)  $R = 1$ .

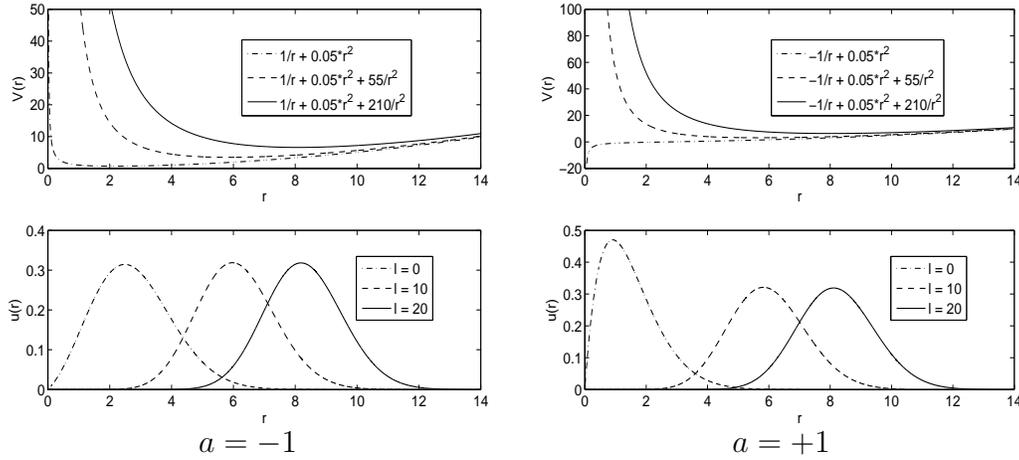


(b)  $R = 1.5$ .

Figura 2.4: Efecto de variar el momento angular sobre la función de onda del estado base para distintos radios de confinamiento  $R$ . La función de onda se corre a la derecha conforme  $l$  crece. Además, para valores iguales de  $l$  y  $R$ , el máximo de la función de onda está más a la derecha para  $a = -1$  (potencial coulombiano repulsivo) que para  $a = +1$  (potencial coulombiano atractivo).



(c)  $R = 2$ .



(d) No confinado.

Figura 2.5: Efecto de variar el momento angular sobre la función de onda del estado base para distintos radios de confinamiento  $R$ . La función de onda se corre a la derecha conforme  $l$  crece. Además, para valores iguales de  $l$  y  $R$ , el máximo de la función de onda está más a la derecha para  $a = -1$  (potencial coulombiano repulsivo) que para  $a = +1$  (potencial coulombiano atractivo).

Tabla 2.4: Maximos en la funciones de onda del estado base para distintos valores del coeficiente del termino de oscilador armonico del potencial,  $b$ . En todos los casos,  $l$  es 0.

<b>Confinado, <math>R = 1</math></b>			
$a$	$b$	$r$	$u(r)$
+1	0.01	0.449	1.5464408738964368
+1	0.5	0.445	1.5493823553440569
+1	1.0	0.441	1.6263538435935774
-1	0.01	0.537	1.6088154916023616
-1	0.5	0.534	1.6085294059395672
-1	1.0	0.531	1.6083762308302185

<b>Confinado, <math>R = 1.5</math></b>			
$a$	$b$	$r$	$u(r)$
+1	0.01	0.625	1.0301234192356863
+1	0.5	0.599	1.0446986301919781
+1	1.0	0.576	1.0610724251444184
-1	0.01	0.828	1.0864677447440314
-1	0.5	0.804	1.0847595360191247
-1	1.0	0.780	1.0852044749292704

<b>Confinado, <math>R = 2</math></b>			
$a$	$b$	$r$	$u(r)$
+1	0.01	0.762	0.77818334451889037
+1	0.5	0.680	0.82369498060023771
+1	1.0	0.626	0.87173539324555704
-1	0.01	1.129	0.82538600851092170
-1	0.5	1.035	0.82326667285703592
-1	1.0	0.950	0.83447308074386894

<b>No confinado</b>			
$a$	$b$	$r$	$u(r)$
+1	0.01	0.962	0.45491977368269626
+1	0.5	0.707	0.70432776407033226
+1	1.0	0.626	0.87173539324555704
-1	0.01	2.335	0.43317935680892605
-1	0.5	1.236	0.60368482106652677
-1	1.0	0.950	0.83447308074386894

Tabla 2.5: Maximos en la funciones de onda del estado base para distintos valores del momento angular,  $l$ . En todos los casos  $b$  es 0.05.

<b>Confinado, <math>R = 1</math></b>			
$a$	$l$	$r$	$u(r)$
+1	0	0.449	1.5466941802070191
+1	10	0.827	3.5104077573664463
+1	20	0.880	4.9154786415210214
-1	0	0.537	1.6087923315203916
-1	10	0.828	3.5210712939476743
-1	20	0.880	4.9204295479149742

<b>Confinado, <math>R = 1.5</math></b>			
$a$	$l$	$r$	$u(r)$
+1	0	0.623	1.0312423132573165
+1	10	1.241	2.3379302932175539
+1	20	1.320	3.2757892148174683
-1	0	0.826	1.0862459590691536
-1	10	1.242	2.3485813015357726
-1	20	1.321	3.2807892455509942

<b>Confinado, <math>R = 2</math></b>			
$a$	$l$	$r$	$u(r)$
+1	0	0.754	0.78166324357045835
+1	10	1.654	1.75096784781772060
+1	20	1.760	2.45549224225264950
-1	0	1.121	0.82465074219527412
-1	10	1.656	1.76162330137550800
-1	20	1.761	2.46048917243243310

<b>No confinado</b>			
$a$	$l$	$r$	$u(r)$
+1	0	0.910	0.47021871936457571
+1	10	5.825	0.32105795012430011
+1	20	8.111	0.31892098696572818
-1	0	2.489	0.31440006186675012
-1	10	5.970	0.31867310171519447
-1	20	8.187	0.31815135660365945

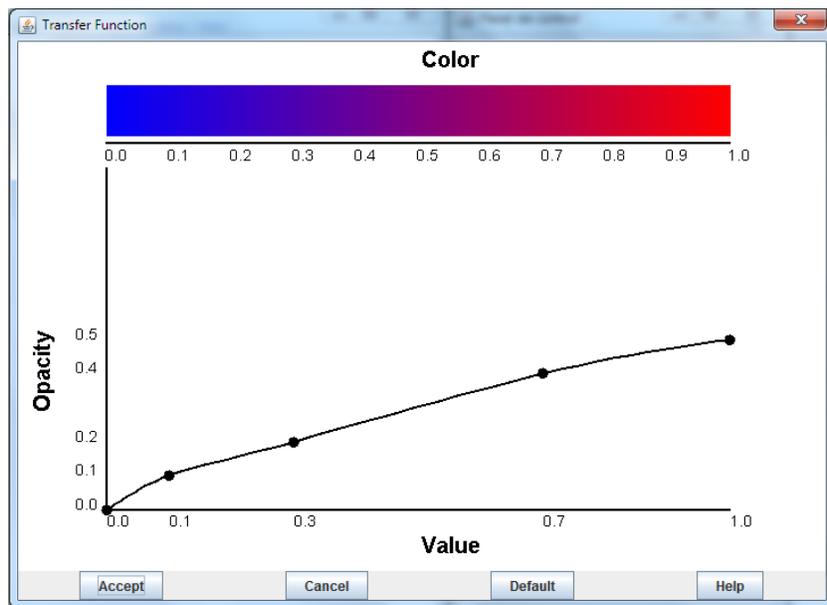


Figura 2.6: Interface para editar la función de transferencia. Como se muestra en la parte superior, el color se asigna a cada punto en el espacio usando interpolación lineal entre el azul y rojo. En la parte inferior, los usuarios pueden cambiar la opacidad asignada a cada punto moviendo, borrando o insertando puntos de control.

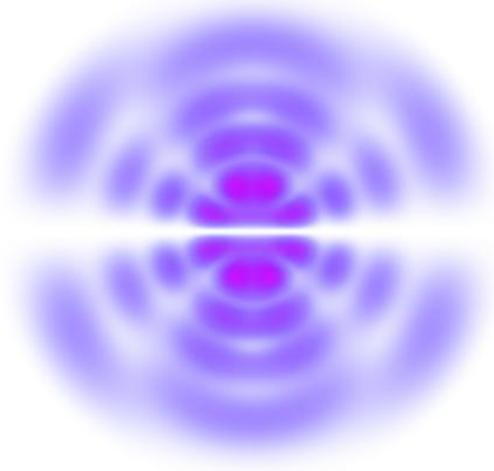


Figura 2.7: Sistema confinado con  $R = 2$ . Los valores de los parámetros son:  $a = +1, b = 0.05, l = 4, n = 3, m = 1$ . La cámara virtual está alineada con el eje  $y$  a 2.5 radios de Bohr del origen. Los puntos con una alta probabilidad tienen un tono rojo. Los puntos con una baja probabilidad tienen un tono azul. La opacidad disminuye con la probabilidad permitiendo apreciar la estructura interna.

Bohr del origen. La Figura 2.8(a) es para  $b = 0.5$ , mientras que la Figura 2.8(b) es para  $b = 0.00001$ . El efecto confinante del parámetro de oscilador armónico se nota en la Figura 2.8(a).

La Figura 2.9 muestra el efecto del parámetro coulombiano,  $a$ , para un sistema no confinado. Los valores de los demás parámetros son:  $b = 0.0001, l = 2, n = 4, m = 0$ . a cámara virtual está alineada con el eje  $y$  a 10 radios de Bohr del origen. La Figura 2.9(a) es para  $a = +1$  (potencial coulombiano atractivo), mientras que la Figura 2.9(b) es para  $a = -1$  (potencial coulombiano repulsivo). En el caso repulsivo, los lóbulos centrales están ligeramente más expandidos que en el caso atractivo.

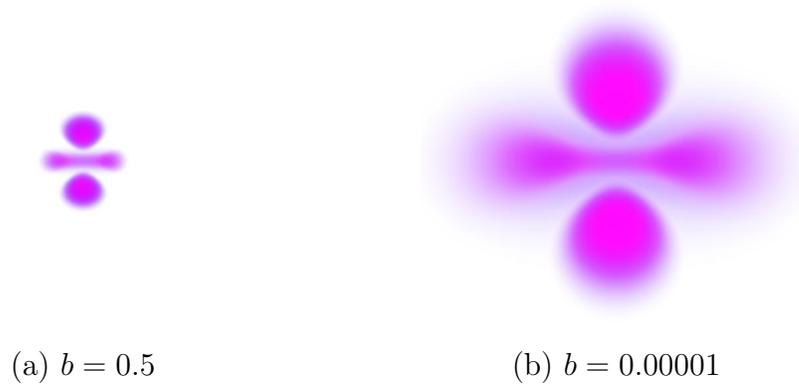


Figura 2.8: Sistema no confinado. Los valores de los parámetros son:  $a = +1, l = 2, n = 0, m = 0$ . La cámara virtual está alineada con el eje  $y$  a 5.5 radios de Bohr del origen. El efecto confinante del parámetro de oscilador armónico es visible en el lado izquierdo. Los puntos con una alta probabilidad tienen un tono rojo. Los puntos con una baja probabilidad tienen un tono azul. La opacidad disminuye con la probabilidad permitiendo apreciar la estructura interna.

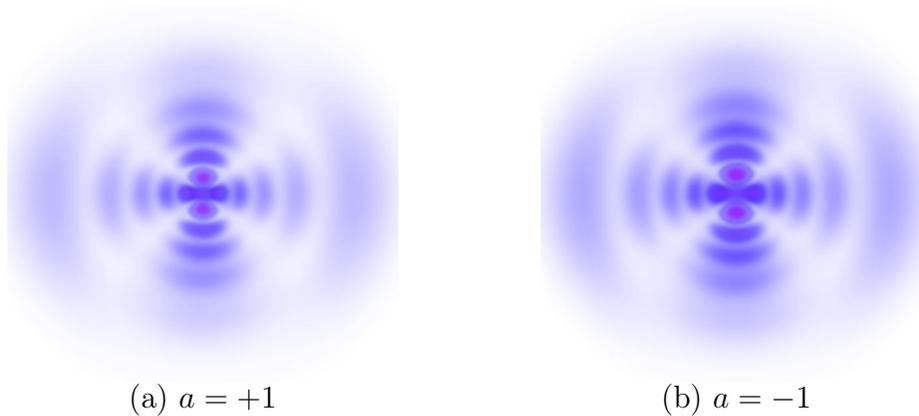


Figura 2.9: Sistema no confinado. Los valores de los parámetros son:  $b = +0.0001, l = 2, n = 4, m = 0$ . La cámara virtual está alineada con el eje  $y$ -axis a 10 radios de Bohr del origen. En el caso repulsivo (lado derecho) los lóbulos centrales están ligeramente más expandidos que en el caso atractivo (lado izquierdo). Los puntos con una alta probabilidad tienen un tono rojo. Los puntos con una baja probabilidad tienen un tono azul. La opacidad disminuye con la probabilidad permitiendo apreciar la estructura interna.

## 2.6. Conclusiones

En este capítulo se estudia un sistema compuesto de dos iones puntuales bajo el efecto de un potencial coulombiano más uno de oscilador armónico. Se añade una pared de confinamiento para estudiar el efecto sobre el espectro de energía y sobre la forma de la función de onda. Como se trata de una familia de potenciales centrales, el problema se reduce a resolver una ecuación diferencial radial, cuyas soluciones se encuentran utilizando una variante del método de disparo. Este método fue validado mediante la reproducción de los valores propios reportados en dos artículos publicados. La evaluación del espectro de energía se realiza para varios valores del potencial y del radio de la esfera dura confinante. Como era de esperar, la energía del estado base crece conforme disminuye el radio de confinamiento; esto se debe al trabajo realizado en el sistema para obtener el confinamiento. Se obtienen las funciones de onda para un sistema con un potencial coulombiano atractivo y para uno repulsivo con diferentes radio de la esfera de confinamiento. Se explora la influencia del potencial armónico y del momento angular sobre las funciones de onda del estado base. Primero se grafican las funciones de onda del estado base para distintos valores del potencial y radios de confinamiento. Se nota claramente el efecto confinante del potencial de oscilador armónico, sobre todo en un sistema no confinado. Luego se grafican las funciones de onda del estado base para distintos valores del momento angular y radios de confinamiento. Se observa un efecto centrífugo sobre los picos de la función de onda. Por último, se presentan visualizaciones en 3D de las densidades de probabilidad para algunos sistemas seleccionados.

El sistema que hemos discutido sugiere la construcción de un material dieléctrico con cavidades incrustadas de tamaño nanométrico, que es capaz de atrapar dos iones en cada cavidad y en el que la interacción de cada pareja de iones puede ser modelado por un potencial coulombiana más un potencial de oscilador armónico y una pared de confinamiento duro. De esta manera, dos parámetros están disponibles para ajustar las propiedades de absorción y de emisión para una amplia gama del espectro electromagnético.

# Capítulo 3

## Determinación de los coeficientes $A$ y $B$ de Einstein

El objetivo de este capítulo es presentar los resultados obtenidos al estudiar la vida media de los estados excitados de un sistema de dos iones puntuales ligados armónicamente.

El capítulo está estructurado de la siguiente forma. La Sección 3.1 presenta una introducción. La Sección 3.2 explica el método seguido para obtener la integral  $\langle n'l'|r|nl\rangle$  presente en la Ecuación 3.6. La Sección 3.3 muestra los principales resultados obtenidos al estudiar las transiciones espontáneas de un sistema de dos iones. Por último, la Sección 3.4 presenta las conclusiones.

### 3.1. Introducción

Cualquier sistema atómico sometido a la influencia de un campo electromagnético externo presenta transiciones entre sus estados cuánticos. Existen las *transiciones de absorción* que se producen cuando los electrones absorben radiación y saltan de un estado de menor energía a otro de mayor energía y las *transiciones de emisión* que se presentan cuando los electrones emiten radiación al saltar de un estado de mayor energía a uno de menor energía. Las transiciones de emisión se deben a que, con excepción del estado base, los demás estados son inestables, es decir, con vida media finita. Existen dos clases de transiciones de emisión: *inducidas* que son las que se producen en presencia del campo externo y *espontáneas* que son las que se producen en ausencia de dicho campo.

El coeficiente  $A$  de Einstein da cuenta de la magnitud de la emisión espontánea. Sea 1 un estado de mayor energía y 2 un estado de menor energía, el

coeficiente  $A$  de Einstein para una transición del estado 1 (estado origen) al estado 2 (estado destino) está dado como sigue [66, p. 274]:

$$A_{1,2} = k_e \frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3} |\langle 2|r|1\rangle|^2 \quad (3.1)$$

Esta expresión fue obtenida en 1916 por Albert Einstein para sistemas de dos estados con balance detallado. La forma específica de los coeficientes se encontró posteriormente mediante la electrodinámica cuántica.

Por otro lado, el coeficiente  $B$  de Einstein da cuenta de la magnitud de la emisión inducida y está relacionado con el coeficiente  $A$  [66, p. 270]:

$$B_{1,2} = \frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3} A_{1,2} \quad (3.2)$$

donde  $k_e$  es la constante de Coulomb,  $e$  es la carga elemental,  $\omega$  es la frecuencia de emisión dipolar,  $\hbar$  es la constante reducida de Planck y  $c$  es la velocidad de la luz.

Como demostramos para el caso de dos iones confinados ligados por un potencial de oscilador armónico, estos coeficientes  $A$  y  $B$  dependen de la intensidad de este potencial, por lo tanto, la posibilidad de modificarlo se traduce en la oportunidad de controlar o modular la potencia de la radiación espontánea o inducida del sistema.

Para calcular los coeficientes  $A$  y  $B$  de Einstein es necesario encontrar las funciones de onda de cada estado cuántico de interés. Dado que el sistema de dos iones es el mismo que fue descrito en el Capítulo 2, aquí solo recordaremos las dos condiciones iniciales. Primero, no se toma en cuenta la estructura interna de los dos iones y por lo tanto el sistema se reduce a un problema de dos cuerpos. Segundo, se supone que los iones están ligados por un potencial de simetría central de la forma:

$$V(r) = \begin{cases} -a/r + br^2 & \text{para } r < R \\ \infty & \text{para } r \geq R \end{cases} \quad (3.3)$$

dónde  $a$  es el término coulombiano y  $b$  el término de oscilador armónico. Para el caso repulsivo se tiene  $a < 0$  y para el caso atractivo  $a > 0$ .  $R$  es el radio de la caja esférica. El caso no confinado se representa por  $R \rightarrow \infty$ .

Las funciones de onda del sistema de dos iones ligados armónicamente constan de una parte radial y otra angular y están dadas por la siguiente ecuación:

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = U_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (3.4)$$

donde  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  son los armónicos esféricos y  $U_{nl}(r) = u_{nl}(r)/r$ , con  $u_{nl}(r)$  la solución a la ecuación radial de Schrödinger adimensional mostrada en la Ecuación 3.5.

$$-\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left( \sigma \frac{a}{r} + br^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u(r) = \alpha Eu(r) \quad (3.5)$$

donde  $\alpha = \mu/m$  ( $\mu$  es la masa reducida de los dos iones,  $m$  es la masa del electrón);  $a = \frac{2\alpha N_1 N_2}{\epsilon}$ ;  $b = \frac{4^4 \alpha^2 \pi^4 \epsilon_0^4 \hbar^6}{m^2 e^8} \omega^2$ ;  $e$  es la carga elemental;  $N_1$  y  $N_2$  son las cargas netas del ion 1 y 2, respectivamente;  $\epsilon_0$  es la permitividad eléctrica del espacio libre;  $\epsilon$  es la permitividad relativa del material en el cual los iones están inmersos;  $\hbar$  es la constante reducida de Planck;  $\sigma = +1$  si las cargas del ion 1 y del ion 2 tienen el mismo signo, o  $-1$  en otro caso;  $\omega$  es la frecuencia angular del término de oscilador armónico.

Considerando que para el sistema estudiado en este trabajo las funciones de onda son de la forma descrita en la Ecuación 3.4, la probabilidad por unidad de tiempo de que ocurra una transición entre los estados  $\psi_{n,l,m} = |n, l, m\rangle$  y  $\psi_{n',l',m'} = |n', l', m'\rangle$  se expresa como el producto de una integral radial y otra angular [66, p. 432], es decir:

$$\begin{aligned} A_{n,l,m;n',l',m'} &= k_e \frac{4e^2 \omega^3}{3\hbar c^3} |\langle n', l', m' | \mathbf{r} | n l m \rangle|^2 \\ &= k_e \frac{4e^2 \omega^3}{3\hbar c^3} |\langle n', l' | r | n, l \rangle \langle l' m' | \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{r}} | l, m \rangle|^2 \end{aligned} \quad (3.6)$$

En sistemas con potenciales que presentan simetría central, la integral  $\langle l', m' | \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{r}} | l, m \rangle$  se anula excepto en aquellos casos que cumplen con las siguientes reglas de selección: [66, p. 427]

$$\begin{aligned} |l - l'| &= 1 \\ |m - m'| &= 0, 1 \end{aligned} \quad (3.7)$$

En los casos en que no se anula, los valores de la integral  $\langle l', m' | \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{r}} | l, m \rangle$  son independientemente de  $m$  y  $m'$ : [66, p. 434]

$$\langle l', m' | \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{r}} | l m \rangle = \begin{cases} \frac{l+1}{2l+1} & \text{para } l' = l + 1 \\ \frac{l}{2l-1} & \text{para } l' = l - 1 \end{cases} \quad (3.8)$$

Por lo anterior, la probabilidad por unidad de tiempo de que ocurra una transición del estado  $|n, l, m\rangle$  al estado  $|n', l + 1, m'\rangle$  para todas las  $m'$  permitidas es:

$$A_{n,l,m;n',l+1, \text{ toda } m'} = k_e \frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3} \frac{l+1}{2l+1} |\langle n', l+1 | r | n, l \rangle|^2 \quad (3.9)$$

De la misma forma, la probabilidad por unidad de tiempo de que ocurra una transición del estado  $|n, l, m\rangle$  al estado  $|n', l-1, m'\rangle$  para todas las  $m'$  permitidas es:

$$A_{n,l,m;n',l-1, \text{ toda } m'} = k_e \frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3} \frac{l}{2l-1} |\langle n', l-1 | r | n, l \rangle|^2 \quad (3.10)$$

La vida media de un estado excitado  $|n, l, m\rangle$  se denota por  $T_{n,l,m}$  y se obtiene sumando las razones de transición de cada una de las transiciones posibles que tengan origen en el estado  $|n, l, m\rangle$ , es decir:

$$T_{n,l,m}^{-1} = \sum_{n'l'm' \text{ permitidas}} A_{n,l,m;n',l',m'} \quad (3.11)$$

En la discusión anterior, no se ha mencionado la forma de calcular la integral  $\langle n', l' | r | n, l \rangle$ . La Sección 3.2 presenta un método para evaluar esta integral.

El estudio de las transiciones atómicas y del espectro resultante tiene aplicaciones en diferentes ramas de la ciencia como en la física de plasmas, astrofísica, ciencias del espacio y nanociencias [67–75]. Su importancia es tal que desde los años 1960s se empezó a hacer compilaciones de datos para distintos elementos [67]. Una recopilación bibliográfica de artículos publicados entre 1914 y 1977 se presenta en Fuhr et al [76]. La versión que se mantiene constantemente actualizada está disponible en línea [77].

## 3.2. Método de solución

Esta sección explica el método seguido en este trabajo para calcular la integral  $\langle n', l' | r | n, l \rangle$  presente en la Ecuación 3.6.

Se parte de la siguiente igualdad:

$$\langle n', l' | r | n, l \rangle = \int U_{n',l'}(r) U_{n,l}(r) r^3 dr \quad (3.12)$$

Dados los números cuánticos  $n, l$  se obtiene  $u_{n,l}(r)$  mediante el método de disparo para potenciales que están siendo especificados por los valores  $a, b$  y  $R$  (radio de confinamiento). Enseguida se calcula  $U_{n,l}(r) = u_{n,l}(r)/r$  y se normaliza.

Sin embargo, se nota lo siguiente:

$$\int_0^R U_{n,l}^2(r)r^2 dr = \int_0^R \left(\frac{u_{n,l}(r)}{r}\right)^2 r^2 dr = \int_0^R u_{n,l}^2(r) dr \quad (3.13)$$

Por lo tanto, no se necesita calcular  $U_{n,l}(r)$ , basta con normalizar  $u_{n,l}(r)$ .

Por último, usando  $u_{n,l}(r)$  normalizada, la integral  $\langle n', l' | r | n, l \rangle$  se calcula como sigue:

$$\langle n', l' | r | n, l \rangle = \left| \int_0^R u_{n',l'}(r)u_{n,l}(r)r^3 dr \right|^2 \quad (3.14)$$

Notando que las reglas de selección dadas en la Ecuación 3.7 implican que la Ecuación 3.14 solo se necesita calcular en aquellos casos para los cuales  $|l - l'| = 1$ .

### 3.3. Resultados

Usando el método descrito en la Sección 3.2 se obtuvieron numéricamente las primeras cinco funciones de onda para cada valor del momento angular,  $l$ , entre 0 y 4 y para distintos radios de confinamiento<sup>1</sup> ( $R = 1$ ,  $R = 2$ ,  $R = 4$ ,  $R = 10$  y  $R \rightarrow \infty$ ). Para cada uno de estos sistemas se consideró un potencial coulombiano atractivo ( $a = +1$ ) y uno repulsivo ( $a = -1$ ). Cada sistema se estudió para valores del coeficiente de oscilador armónico,  $b$ , entre 0.010 y 0.500.

Los principales resultados que se encontraron en este estudio se listan a continuación.

Para cada sistema, la transición con mayor intensidad, es decir, la que tiene el coeficiente  $A$  de Einstein mayor, es la misma. La Tabla 3.1 la transición más intensa para cada sistema estudiado.

Los casos confinados con  $R$  pequeña ( $R = 1, 2, 4$ ) producen transiciones con longitudes de onda pequeñas (más pequeñas que el espectro visible). Por otro lado, para algunos valores de  $b$  (ver párrafo siguiente) los casos no confinados y el confinado con  $R = 10$  producen transiciones con longitudes de onda que incluyen el visible. Este fenómeno se observa en la Tabla 3.2, la cual muestra las transiciones con longitudes de onda máximas y mínimas en cada sistema para los distintos radios de confinamiento. El valor del coeficiente de oscilador armónico está fijo en  $b = 0.010$ .

En términos porcentuales, la frecuencia de emisión es más sensible que el coeficiente  $A$  de Einstein a los cambios en el coeficiente de oscilador armónico,

---

<sup>1</sup>Las unidades del confinamiento son radios de Bohr

$b$ . Un incremento relativamente pequeño en  $b$  provoca que la longitud de onda de las transiciones se recorra de forma substancial hacia el ultravioleta. Como ejemplo, se compararon las transiciones que producen longitudes de onda en el visible para valores de  $b = 0.010$  y  $b = 0.011$ . El corrimiento mencionado se puede observar numéricamente para un sistema no confinado en la Tabla 3.3 (caso atractivo) y en la Tabla 3.4 (caso repulsivo) y visualmente en la Figura 3.1 (atractivo) y en la Figura 3.2 (repulsivo). Este corrimiento al ultravioleta continua conforme  $b$  crece hasta que, como se muestra en la Tabla 3.5, para valores como  $b = 0.500$  no hay transiciones de emisión en el visible.

Para un sistema con coeficientes  $a$  y  $b$  fijos, las transiciones forman grupos en su diagrama espectral. Las transiciones en un grupo pertenecen al mismo conjunto. En este contexto, un conjunto se define como aquellas transiciones que tienen el mismo momento angular en su estado origen y el mismo momento angular en su estado destino. En algunas ocasiones, como en el sistema no confinado repulsivo (ver Tabla 3.4 y Figura 3.2), los grupos son muy notorios. Para este sistema, las transiciones marcadas con las letras  $a$ ,  $e$ ,  $j$  y  $o$ , cuyas líneas de emisión forman un grupo en el diagrama espectral, pertenecen al mismo conjunto porque son transiciones de  $s$  ( $l = 0$ ) a  $p$  ( $l = 1$ )<sup>2</sup>. Similarmente, las transiciones  $b$ ,  $f$ ,  $k$  y  $p$ , que pertenecen al conjunto de transiciones de  $p$  a  $d$ , forman otro grupo en el diagrama espectral. En otras ocasiones, como en el caso no confinado atractivo (ver Tabla 3.3 y Figura 3.1), los grupos no son notorios a primera vista aunque de todos modos se pueden identificar. Por ejemplo, las transiciones  $a$ ,  $e$ ,  $k$  y  $q$ , que son transiciones de  $d$  a  $p$ , forman un grupo que se traslapa con el grupo formado por las transiciones  $j$ ,  $p$  y  $v$  que son transiciones de  $p$  a  $s$  y con el grupo formado por las transiciones  $b$ ,  $f$ ,  $l$ ,  $r$  y  $x$  que son transiciones de  $f$  a  $d$ . Este agrupamiento se hace más notorio al aumentar el valor de  $b$  debido al poder compresor del potencial de oscilador armónico. Las Tablas 3.6, 3.7, 3.8 y 3.9 presentan la longitud de onda de todas las transiciones en el caso no confinado repulsivo para valores de  $b = 0.010$  y  $b = 0.050$ .

En todos los casos estudiados, el estado  $(0, 1)$ , cuya única transición permitida es al estado de menor energía  $(0, 0)$ , es el que tiene vida media mayor. La Tabla 3.10 muestra este resultado para  $b = 0.010$  y para  $b = 0.050$ .

---

<sup>2</sup>A partir de aquí, se utiliza la notación tradicional del momento angular,  $s$  para  $l = 0$ ,  $p$  para  $l = 1$ ,  $d$  para  $l = 2$ ,  $f$  para  $l = 3$ , etc.

Tabla 3.1: Comparación de los máximos en el coeficiente  $A$  de Einstein para distintos valores del coeficiente de oscilador armónico,  $b$ . Las primeras cuatro columnas muestran el estado origen y destino de la transición ( $n$  es el número de ceros de la función de onda,  $l$  es el valor del momento angular). La quinta columna muestra la razón de transición. Se observa que en todos los casos la transición de mayor intensidad se produce del estado  $(4, 4)$  al  $(3, 3)$ .

$b = 0.010$					
Caso	Estado origen		Estado destino		$A_{nlm,n'l'm'}$ ( $\text{s}^{-1}$ )
	$n$	$l$	$n$	$l$	
Confinado ( $R = 1$ ) atractivo	4	4	3	3	$1.9108 \times 10^{13}$
Confinado ( $R = 1$ ) repulsivo	4	4	3	3	$1.9322 \times 10^{13}$
Confinado ( $R = 2$ ) atractivo	4	4	3	3	$1.9001 \times 10^{13}$
Confinado ( $R = 2$ ) repulsivo	4	4	3	3	$1.9429 \times 10^{13}$
Confinado ( $R = 4$ ) atractivo	4	4	3	3	$1.8790 \times 10^{13}$
Confinado ( $R = 4$ ) repulsivo	4	4	3	3	$1.9648 \times 10^{13}$
Confinado ( $R = 10$ ) atractivo	4	4	3	3	$1.7500 \times 10^{13}$
Confinado ( $R = 10$ ) repulsivo	4	4	3	3	$2.0170 \times 10^{13}$
No confinado atractivo	4	4	3	3	$8.8843 \times 10^{12}$
No confinado repulsivo	4	4	3	3	$1.2190 \times 10^{13}$
$b = 0.050$					
Caso	Estado origen		Estado destino		$A_{nlm,n'l'm'}$ ( $\text{s}^{-1}$ )
	$n$	$l$	$n$	$l$	
Confinado ( $R = 1$ ) atractivo	4	4	3	3	$1.9108 \times 10^{13}$
Confinado ( $R = 1$ ) repulsivo	4	4	3	3	$1.9322 \times 10^{13}$
Confinado ( $R = 2$ ) atractivo	4	4	3	3	$1.9002 \times 10^{13}$
Confinado ( $R = 2$ ) repulsivo	4	4	3	3	$1.9430 \times 10^{13}$
Confinado ( $R = 4$ ) atractivo	4	4	3	3	$1.8800 \times 10^{13}$
Confinado ( $R = 4$ ) repulsivo	4	4	3	3	$1.9670 \times 10^{13}$
Confinado ( $R = 10$ ) atractivo	4	4	3	3	$9.7534 \times 10^{12}$
Confinado ( $R = 10$ ) repulsivo	4	4	3	3	$1.2299 \times 10^{13}$
No confinado atractivo	4	4	3	3	$9.4267 \times 10^{12}$
No confinado repulsivo	4	4	3	3	$1.1642 \times 10^{13}$

Tabla 3.2: Máximos y mínimos en la longitud de onda para  $b = 0.010$ . Las primeras cuatro columnas muestran el estado origen y destino de la transición ( $n$  es el número de ceros de la función de onda,  $l$  es el valor del momento angular). La quinta columna muestra la longitud de onda en nanómetros de la energía emitida durante la transición. Se observa que para los casos confinados con  $R = 1, 2, 4$  no se producen transiciones en el visible. Además, se nota cierta regularidad en los estados origen y destino de las transiciones en las cuales se presentan estos máximos y mínimos en la longitud de onda.

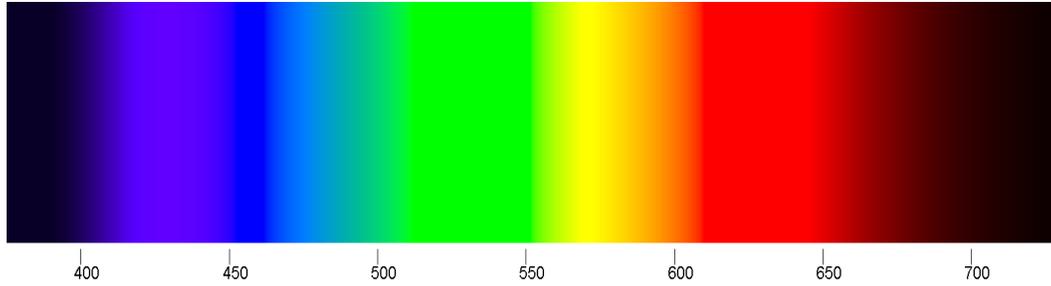
Máximos					
Caso	Estado origen		Estado destino		$\lambda$ (nm)
	$n$	$l$	$n$	$l$	
Confinado ( $R = 1$ ) atractivo	0	1	0	0	15.68
Confinado ( $R = 1$ ) repulsivo	0	1	0	0	19.58
Confinado ( $R = 2$ ) atractivo	0	1	0	0	53.41
Confinado ( $R = 2$ ) repulsivo	0	1	0	0	85.22
Confinado ( $R = 4$ ) atractivo	1	0	0	1	323.45
Confinado ( $R = 4$ ) repulsivo	0	1	0	0	377.95
Confinado ( $R = 10$ ) atractivo	1	0	0	1	1417.13
Confinado ( $R = 10$ ) repulsivo	0	1	0	0	1312.06
No confinado atractivo	1	0	0	1	1417.61
No confinado repulsivo	0	1	0	0	1317.96
Mínimos					
Caso	Estado origen		Estado destino		$\lambda$ (nm)
	$n$	$l$	$n$	$l$	
Confinado ( $R = 1$ ) atractivo	4	4	0	3	0.44
Confinado ( $R = 1$ ) repulsivo	4	4	0	3	0.44
Confinado ( $R = 2$ ) atractivo	4	4	0	3	1.77
Confinado ( $R = 2$ ) repulsivo	4	4	0	3	1.75
Confinado ( $R = 4$ ) atractivo	4	4	0	3	7.15
Confinado ( $R = 4$ ) repulsivo	4	4	0	3	6.94
Confinado ( $R = 10$ ) atractivo	4	4	0	3	45.12
Confinado ( $R = 10$ ) repulsivo	4	4	0	3	43.68
No confinado atractivo	4	1	0	0	52.36
No confinado repulsivo	4	4	0	3	73.96

Tabla 3.3: Comparación de transiciones en el visible para un sistema no confinado atractivo para distintos valores del coeficiente de oscilador armónico,  $b$ . Las primeras cuatro columnas muestran el estado origen y destino de la transición ( $n$  es el número de ceros de la función de onda,  $l$  es el valor del momento angular). La quinta y sexta columna muestran la razón de transición,  $A$ , para todas las  $m$  permitidas y la longitud de onda en nanómetros de la energía emitida durante la transición, respectivamente, para el caso  $b = 0.010$ . Por su lado, la séptima y octava columna muestran lo mismo para el caso  $b = 0.011$ . Por último, la novena columna muestra un índice para localizar con facilidad la transición en el diagrama espectral de la Figura 3.1. Se observa que en términos porcentuales, la longitud de onda es más sensible que el coeficiente  $A$  al cambio en  $b$ .

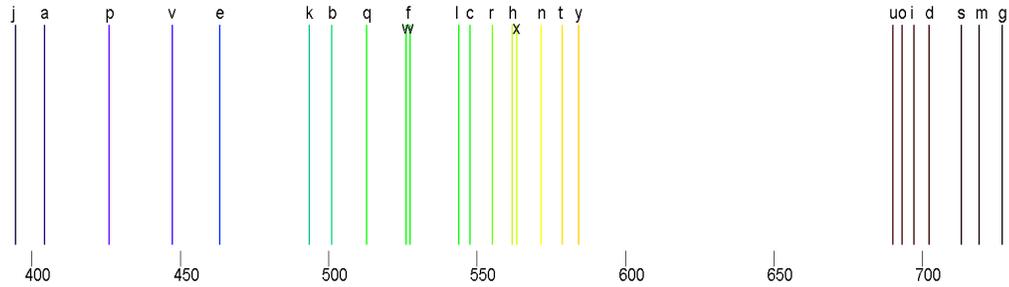
Origen		Destino		$b = 0.010$		$b = 0.011$		Id
$n$	$l$	$n$	$l$	$A_{nlm,n'l'm'}$ ( $s^{-1}$ )	$\lambda$ (nm)	$A_{nlm,n'l'm'}$ ( $s^{-1}$ )	$\lambda$ (nm)	
0	2	0	1	$7.0751 \times 10^{10}$	404.29	$7.0356 \times 10^{10}$	390.30	a
0	3	0	2	$1.2816 \times 10^{11}$	500.87	$1.2780 \times 10^{11}$	480.67	b
0	4	0	3	$2.2215 \times 10^{11}$	547.41	$2.2180 \times 10^{11}$	524.07	c
1	3	0	4	$1.1432 \times 10^{11}$	702.20	$1.1576 \times 10^{11}$	668.00	d
1	2	1	1	$3.6650 \times 10^{11}$	463.10	$3.6423 \times 10^{11}$	445.09	e
1	3	1	2	$4.8794 \times 10^{11}$	527.33	$4.8596 \times 10^{11}$	505.28	f
2	2	1	3	$2.6123 \times 10^{11}$	726.87	$2.6518 \times 10^{11}$	690.82	g
1	4	1	3	$6.7985 \times 10^{11}$	561.69	$6.7808 \times 10^{11}$	537.35	h
2	3	1	4	$4.0382 \times 10^{11}$	697.02	$4.0792 \times 10^{11}$	663.23	i
2	1	2	0	$1.2189 \times 10^{12}$	394.31	$1.2136 \times 10^{12}$	379.44	j
2	2	2	1	$1.0080 \times 10^{12}$	493.45	$1.0016 \times 10^{12}$	473.41	k
2	3	2	2	$1.1828 \times 10^{12}$	543.69	$1.1777 \times 10^{12}$	520.51	l
3	2	2	3	$6.7155 \times 10^{11}$	719.00	$6.7995 \times 10^{11}$	683.57	m
2	4	2	3	$1.4909 \times 10^{12}$	571.47	$1.4866 \times 10^{12}$	546.45	n
3	3	2	4	$9.4455 \times 10^{11}$	693.10	$9.5269 \times 10^{11}$	659.62	o
3	1	3	0	$2.8658 \times 10^{12}$	425.95	$2.8471 \times 10^{12}$	409.29	p
3	2	3	1	$2.1119 \times 10^{12}$	512.60	$2.0987 \times 10^{12}$	491.31	q
3	3	3	2	$2.3101 \times 10^{12}$	554.99	$2.3003 \times 10^{12}$	531.04	r
4	2	3	3	$1.3718 \times 10^{12}$	713.10	$1.3865 \times 10^{12}$	678.14	s
3	4	3	3	$2.7450 \times 10^{12}$	578.66	$2.7369 \times 10^{12}$	553.15	t
4	3	3	4	$1.8133 \times 10^{12}$	689.99	$1.8270 \times 10^{12}$	656.75	u
4	1	4	0	$5.4918 \times 10^{12}$	447.13	$5.4504 \times 10^{12}$	429.28	v
4	2	4	1	$3.7918 \times 10^{12}$	526.04	$3.7684 \times 10^{12}$	503.88	w
4	3	4	2	$3.9661 \times 10^{12}$	563.35	$3.9496 \times 10^{12}$	538.83	x
4	4	4	3	$4.5310 \times 10^{12}$	584.20	$4.5177 \times 10^{12}$	558.31	y

Tabla 3.4: Comparación de transiciones en el visible para un sistema no confinado repulsivo para distintos valores del coeficiente de oscilador armónico,  $b$ . Las primeras cuatro columnas muestran el estado origen y destino de la transición ( $n$  es el número de ceros de la función de onda,  $l$  es el valor del momento angular). La quinta y sexta columna muestran la razón de transición,  $A$ , para todas las  $m$  permitidas y la longitud de onda en nanómetros de la energía emitida durante la transición, respectivamente, para el caso  $b = 0.010$ . Por su lado, la séptima y octava columna muestran lo mismo para el caso  $b = 0.011$ . Por último, la novena columna muestra un índice para localizar con facilidad la transición en el diagrama espectral de la Figura 3.2. Se observa que en términos porcentuales, la longitud de onda es más sensible que el coeficiente  $A$  al cambio en  $b$ .

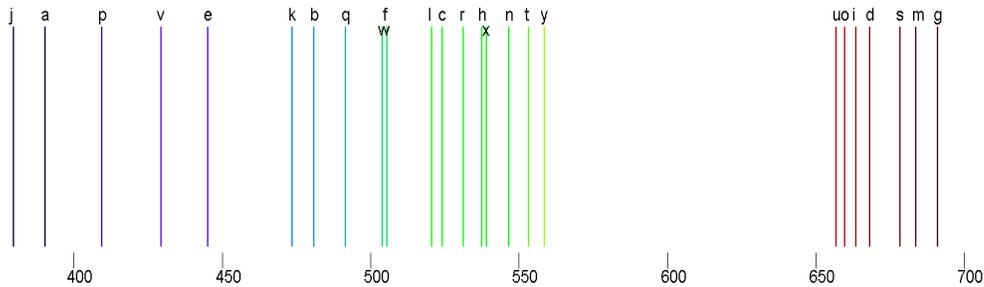
Origen		Destino		$b = 0.010$		$b = 0.011$		Id
$n$	$l$	$n$	$l$	$A_{nlm,n'l'm'} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	$\lambda \text{ (nm)}$	$A_{nlm,n'l'm'} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	$\lambda \text{ (nm)}$	
1	0	0	1	$2.7859 \times 10^{11}$	485.93	$2.7271 \times 10^{11}$	464.91	a
1	1	0	2	$2.0013 \times 10^{11}$	553.23	$1.9706 \times 10^{11}$	528.90	b
1	2	0	3	$2.2552 \times 10^{11}$	584.93	$2.2299 \times 10^{11}$	558.79	c
1	3	0	4	$2.7552 \times 10^{11}$	602.08	$2.7318 \times 10^{11}$	574.83	d
2	0	1	1	$1.0395 \times 10^{12}$	492.23	$1.0215 \times 10^{12}$	471.05	e
2	1	1	2	$6.9176 \times 10^{11}$	558.45	$6.8287 \times 10^{11}$	533.87	f
1	4	1	3	$5.4467 \times 10^{11}$	730.73	$5.4605 \times 10^{11}$	694.76	g
2	2	1	3	$7.2733 \times 10^{11}$	588.28	$7.2045 \times 10^{11}$	561.94	h
2	3	1	4	$8.3856 \times 10^{11}$	604.26	$8.3250 \times 10^{11}$	576.93	i
3	0	2	1	$2.4956 \times 10^{12}$	498.35	$2.4577 \times 10^{12}$	476.97	j
3	1	2	2	$1.5897 \times 10^{12}$	562.93	$1.5720 \times 10^{12}$	538.12	k
2	4	2	3	$1.1580 \times 10^{12}$	721.59	$1.1615 \times 10^{12}$	686.24	l
3	2	2	3	$1.6020 \times 10^{12}$	591.11	$1.5888 \times 10^{12}$	564.61	m
3	3	2	4	$1.7782 \times 10^{12}$	606.13	$1.7668 \times 10^{12}$	578.68	n
4	0	3	1	$4.8497 \times 10^{12}$	504.02	$4.7824 \times 10^{12}$	482.43	o
4	1	3	2	$3.0068 \times 10^{12}$	566.79	$2.9767 \times 10^{12}$	541.78	p
3	4	3	3	$2.1112 \times 10^{12}$	714.55	$2.1183 \times 10^{12}$	679.68	q
4	2	3	3	$2.9451 \times 10^{12}$	593.55	$2.9233 \times 10^{12}$	566.91	r
4	3	3	4	$3.1828 \times 10^{12}$	607.75	$3.1645 \times 10^{12}$	580.20	s
4	3	4	2	$2.6721 \times 10^{12}$	735.22	$2.6852 \times 10^{12}$	698.88	t
4	4	4	3	$3.4818 \times 10^{12}$	708.95	$3.4929 \times 10^{12}$	674.46	u



(a) Espectro de referencia

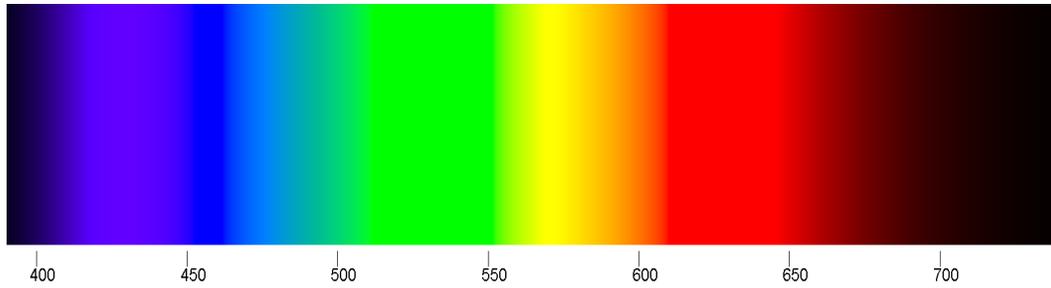


(b)  $b = 0.010$

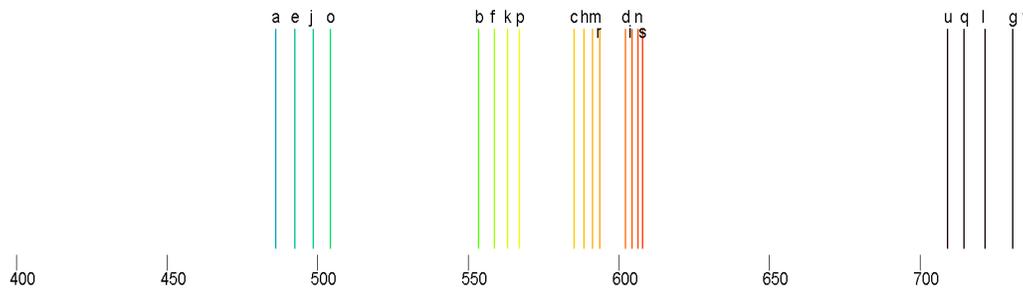


(c)  $b = 0.011$

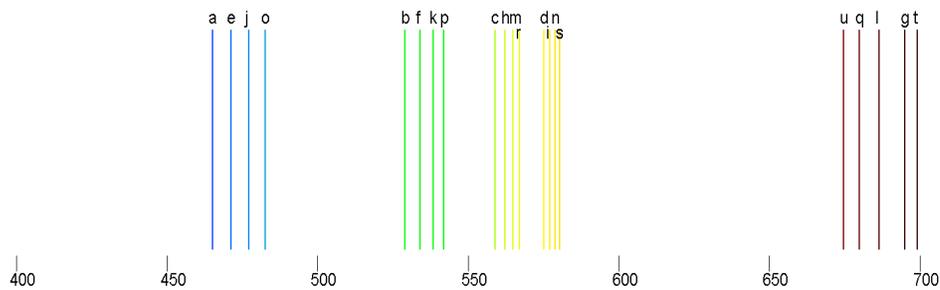
Figura 3.1: Comparación de los espectros de emisión para el caso no confinado atractivo con diferentes coeficientes de oscilador armónico,  $b$ . La longitud de onda está en nanómetros. El valor del potencial coulombiano es  $a = +1$ . Las letras sobre las líneas de emisión hacen referencia a las transiciones listadas en la Tabla 3.3. Se observa que el incremento en  $b$  produce un corrimiento al ultravioleta de la energía emitida durante las transiciones.



(a) Espectro de referencia



(b)  $b = 0.010$



(c)  $b = 0.011$

Figura 3.2: Comparación de los espectros de emisión para el caso no confinado repulsivo con diferentes coeficientes de oscilador armónico,  $b$ . La longitud de onda está en nanómetros. El valor del potencial coulombiano es  $a = -1$ . Las letras sobre las líneas de emisión hacen referencia a las transiciones listadas en la Tabla 3.4 Se observa que el incremento en  $b$  produce un corrimiento al ultravioleta de la energía emitida durante las transiciones.

Tabla 3.5: Maximos en la longitud de onda para  $b = 0.5$ . Las primeras cuatro columnas muestran el estado origen y destino de la transicion ( $n$  es el numero de ceros de la funcion de onda,  $l$  es el valor del momento angular). La quinta columna muestra la longitud de onda en nanometros de la energa emitida durante la transicion. Se observa que en ningun caso se produce una transicion con longitud de onda en el espectro visible.

Caso	Estado origen		Estado destino		$\lambda$ (nm)
	$n$	$l$	$n$	$l$	
Confinado ( $R = 1$ ) atractivo	0	1	0	0	15.43
Confinado ( $R = 1$ ) repulsivo	0	1	0	0	19.43
Confinado ( $R = 2$ ) atractivo	1	0	0	1	52.16
Confinado ( $R = 2$ ) repulsivo	0	1	0	0	75.54
Confinado ( $R = 4$ ) atractivo	1	0	0	1	115.14
Confinado ( $R = 4$ ) repulsivo	0	1	0	0	126.63
Confinado ( $R = 10$ ) atractivo	1	0	0	1	115.20
Confinado ( $R = 10$ ) repulsivo	0	1	0	0	126.69
No confinado atractivo	1	0	0	1	115.21
No confinado repulsivo	0	1	0	0	126.68

### 3.4. Conclusiones

Se considera un cuerpo formado por un material transparente a la luz que tiene en su interior cavidades en las cuales se encuentran un par de iones puntuales ligados por un potencial de la forma  $-a/r + br^2$  y con un confinamiento en forma de caja esferica impenetrable. Se supone que las parejas de iones no interactuan entre si y ası cada pareja se modela como fue reportado en el Capıtulo 2. Se obtienen las primeras cinco funciones de onda para valores de momento angular entre 0 y 4 y varios radios de confinamiento, incluyendo el caso no confinado. Se obtienen los coeficientes  $A$  de Einstein para todas las transiciones posibles, prestando especial atencion a las transiciones con longitudes de onda de emision cercanas al visible. Se presentan tablas y diagramas espectrales que muestran el efecto compresor que produce el coeficiente de oscilador armonico sobre las longitudes de onda de las transiciones.

Tabla 3.6: Longitud de onda de las transiciones entre  $s$  ( $l = 0$ ) y  $p$  ( $l = 1$ ) para el caso no confinado repulsivo.  $n$  es el número de ceros de la función de onda,  $l$  es el valor del momento angular.

Transiciones de $p$ a $s$					
Estado origen		Estado destino		Longitud de onda (nm)	
$n$	$l$	$n$	$l$	$b = 0.010$	$b = 0.050$
0	1	0	0	1317.96	489.92
1	1	0	0	272.57	115.64
2	1	0	0	151.00	65.20
3	1	0	0	104.11	45.29
4	1	0	0	79.31	34.65
1	1	1	0	1173.51	441.65
2	1	1	0	262.76	111.67
3	1	1	0	147.31	63.70
4	1	1	0	102.13	44.49
2	1	2	0	1084.63	413.99
3	1	2	0	256.11	109.19
4	1	2	0	144.77	62.74
3	1	3	0	1024.58	396.05
4	1	3	0	251.31	107.48
4	1	4	0	981.25	383.42
Transiciones de $s$ a $p$					
Estado origen		Estado destino		Longitud de onda (nm)	
$n$	$l$	$n$	$l$	$b = 0.010$	$b = 0.050$
1	0	0	1	485.93	230.29
2	0	0	1	202.36	91.90
3	0	0	1	127.06	57.09
4	0	0	1	92.33	41.30
2	0	1	1	492.23	233.93
3	0	1	1	201.61	91.67
4	0	1	1	126.26	56.80
3	0	2	1	498.35	237.07
4	0	2	1	201.34	91.62
4	0	3	1	504.02	239.75

Tabla 3.7: Longitud de onda de las transiciones entre  $p$  ( $l = 1$ ) y  $d$  ( $l = 2$ ) para el caso no confinado repulsivo.  $n$  es el número de ceros de la función de onda,  $l$  es el valor del momento angular.

Transiciones de $d$ a $p$					
Estado origen		Estado destino		Longitud de onda (nm)	
$n$	$l$	$n$	$l$	$b = 0.010$	$b = 0.050$
0	2	0	1	907.04	366.54
1	2	0	1	245.52	105.81
2	2	0	1	141.45	61.65
3	2	0	1	99.16	43.44
4	2	0	1	76.26	33.51
1	2	1	1	859.94	351.62
2	2	1	1	240.40	104.03
3	2	1	1	139.37	60.93
4	2	1	1	98.00	43.04
2	2	2	1	829.06	342.17
3	2	2	1	236.89	102.85
4	2	2	1	137.93	60.44
3	2	3	1	807.22	335.63
4	2	3	1	234.33	102.02
4	2	4	1	790.91	330.80
Transiciones de $p$ a $d$					
Estado origen		Estado destino		Longitud de onda (nm)	
$n$	$l$	$n$	$l$	$b = 0.010$	$b = 0.050$
1	1	0	2	553.23	257.84
2	1	0	2	210.03	94.62
3	1	0	2	129.14	57.76
4	1	0	2	93.05	41.51
2	1	1	2	558.45	259.99
3	1	1	2	209.50	94.43
4	1	1	2	128.59	57.58
3	1	2	2	562.93	261.73
4	1	2	2	209.22	94.34
4	1	3	2	566.79	263.19

Tabla 3.8: Longitud de onda de las transiciones entre  $d$  ( $l = 2$ ) y  $f$  ( $l = 3$ ) para el caso no confinado repulsivo.  $n$  es el número de ceros de la función de onda,  $l$  es el valor del momento angular.

Transiciones de $f$ a $d$					
Estado origen		Estado destino		Longitud de onda (nm)	
$n$	$l$	$n$	$l$	$b = 0.010$	$b = 0.050$
0	3	0	2	793.11	332.57
1	3	0	2	234.33	102.12
2	3	0	2	137.16	60.22
3	3	0	2	96.84	42.66
4	3	0	2	74.79	33.01
1	3	1	2	771.02	325.72
2	3	1	2	231.46	101.17
3	3	1	2	135.94	59.82
4	3	1	2	96.15	42.43
2	3	2	2	755.56	321.01
3	3	2	2	229.40	100.51
4	3	2	2	135.06	59.53
3	3	3	2	744.09	317.56
4	3	3	2	227.85	100.02
4	3	4	2	735.22	314.91
Transiciones de $d$ a $f$					
Estado origen		Estado destino		Longitud de onda (nm)	
$n$	$l$	$n$	$l$	$b = 0.010$	$b = 0.050$
1	2	0	3	584.93	269.15
2	2	0	3	212.47	95.38
3	2	0	3	129.51	57.86
4	2	0	3	93.02	41.48
2	2	1	3	588.28	270.37
3	2	1	3	212.08	95.25
4	2	1	3	129.14	57.73
3	2	2	3	591.11	271.37
4	2	2	3	211.85	95.17
4	2	3	3	593.55	272.22

Tabla 3.9: Longitud de onda de las transiciones entre  $f$  ( $l = 3$ ) y  $g$  ( $l = 4$ ) para el caso no confinado repulsivo.  $n$  es el número de ceros de la función de onda,  $l$  es el valor del momento angular.

Transiciones de $g$ a $f$					
Estado origen		Estado destino		Longitud de onda (nm)	
$n$	$l$	$n$	$l$	$b = 0.010$	$b = 0.050$
0	4	0	3	743.13	317.67
1	4	0	3	228.57	100.28
2	4	0	3	134.85	59.47
3	4	0	3	95.56	42.24
4	4	0	3	73.96	32.75
1	4	1	3	730.73	313.86
2	4	1	3	226.80	99.72
3	4	1	3	134.07	59.23
4	4	1	3	95.11	42.10
2	4	2	3	721.59	311.09
3	4	2	3	225.47	99.30
4	4	2	3	133.49	59.04
3	4	3	3	714.55	308.97
4	4	3	3	224.44	98.98
4	4	4	3	708.95	307.29
Transiciones de $f$ a $g$					
Estado origen		Estado destino		Longitud de onda (nm)	
$n$	$l$	$n$	$l$	$b = 0.010$	$b = 0.050$
1	3	0	4	602.08	274.90
2	3	0	4	213.48	95.68
3	3	0	4	129.53	57.85
4	3	0	4	92.89	41.43
2	3	1	4	604.26	275.65
3	3	1	4	213.19	95.59
4	3	1	4	129.27	57.77
3	3	2	4	606.13	276.28
4	3	2	4	213.00	95.52
4	3	3	4	607.75	276.82

Tabla 3.10: Estados con vida media más larga.  $n$  es el número de cruces de la función de onda por el eje de las abscisas,  $l$  es el valor del momento angular.  $T$  es la vida media en segundos del estado. Se observa que en todos los casos, el estado con vida media más larga es el mismo.

$b = 0.010$			
Caso	Estado		$T$ (s)
	$n$	$l$	
Confinado ( $R = 1$ ) atractivo	0	1	$5.3339 \times 10^{-11}$
Confinado ( $R = 1$ ) repulsivo	0	1	$7.4948 \times 10^{-11}$
Confinado ( $R = 2$ ) atractivo	0	1	$4.3550 \times 10^{-11}$
Confinado ( $R = 2$ ) repulsivo	0	1	$8.5659 \times 10^{-11}$
Confinado ( $R = 4$ ) atractivo	0	1	$2.8759 \times 10^{-11}$
Confinado ( $R = 4$ ) repulsivo	0	1	$1.0248 \times 10^{-10}$
Confinado ( $R = 10$ ) atractivo	0	1	$2.1418 \times 10^{-11}$
Confinado ( $R = 10$ ) repulsivo	0	1	$8.2348 \times 10^{-11}$
No confinado atractivo	0	1	$2.1418 \times 10^{-11}$
No confinado repulsivo	0	1	$8.1663 \times 10^{-11}$
$b = 0.050$			
Caso	Estado		$T$ (s)
	$n$	$l$	
Confinado ( $R = 1$ ) atractivo	0	1	$5.3300 \times 10^{-11}$
Confinado ( $R = 1$ ) repulsivo	0	1	$7.4892 \times 10^{-11}$
Confinado ( $R = 2$ ) atractivo	0	1	$4.3105 \times 10^{-11}$
Confinado ( $R = 2$ ) repulsivo	0	1	$8.4698 \times 10^{-11}$
Confinado ( $R = 4$ ) atractivo	0	1	$2.7346 \times 10^{-11}$
Confinado ( $R = 4$ ) repulsivo	0	1	$8.8312 \times 10^{-11}$
Confinado ( $R = 10$ ) atractivo	0	1	$2.3725 \times 10^{-11}$
Confinado ( $R = 10$ ) repulsivo	0	1	$6.7479 \times 10^{-11}$
No confinado atractivo	0	1	$2.3726 \times 10^{-11}$
No confinado repulsivo	0	1	$6.7479 \times 10^{-11}$

# Capítulo 4

## Conclusiones

En este trabajo se considera un cuerpo formado por un material que tiene en su interior cavidades en las cuales se encuentran un par de iones puntuales sometidos a un potencial de la forma  $-a/r + br^2$  y a un confinamiento en forma de caja esférica impenetrable. Se supone que una pareja de iones en una cavidad no interactúa con otra pareja de iones de otra cavidad y así cada pareja aislada se modela como fue reportado en el Capítulo 2. El trabajo se realizó en dos partes.

En la primera parte, reportada en el Capítulo 2, se estudia un sistema de dos iones puntuales ligados por un potencial coulombiano más uno de oscilador armónico. Se añade una pared de confinamiento para estudiar el efecto sobre el espectro de energía y sobre la forma de la función de onda. Como se trata de una familia de potenciales centrales, el problema se reduce a resolver una ecuación diferencial radial, cuyas soluciones se encuentran numéricamente utilizando una variante del método de disparo. Este método es validado mediante la reproducción de los valores propios reportados en dos artículos publicados. La evaluación del espectro de energía se realiza para varios valores del potencial y del radio de la esfera dura confinante. Como era de esperar, la energía del estado base crece conforme disminuye el radio de confinamiento; esto se debe al trabajo realizado en el sistema para obtener el confinamiento. Se obtienen las funciones de onda para un sistema con un potencial coulombiano atractivo y para uno repulsivo con diferentes radio de la esfera de confinamiento. Se explora la influencia del potencial armónico y del momento angular sobre las funciones de onda del estado base. Primero se grafican las funciones de onda del estado base para distintos valores del potencial y radios de confinamiento. Se nota claramente el efecto compresor del potencial de oscilador armónico, sobre todo en un sistema no confinado. Luego se grafican las funciones de onda del estado base para distintos valores del momento angular y radios de

confinamiento. Se observa un efecto centrífugo sobre los picos de la función de onda. Por último, se presentan visualizaciones en 3D de las densidades de probabilidad para algunos sistemas seleccionados.

En la segunda parte, reportada en el Capítulo 3, se obtienen las primeras cinco funciones de onda para valores de momento angular entre 0 y 4 y varios radios de confinamiento, incluyendo el caso no confinado. Se obtienen los coeficientes  $A$  de Einstein para todas las transiciones posibles, prestando especial atención a las transiciones con longitudes de onda de emisión cercanas al visible. Se presentan tablas y diagramas espectrales que muestran el efecto compresor que produce el coeficiente de oscilador armónico sobre las longitudes de onda de las transiciones.

El sistema que hemos discutido sugiere la construcción de un material dieléctrico con cavidades incrustadas de dos o menos nanómetros de tamaño, que es capaz de atrapar dos iones en cada cavidad y en el que la interacción de cada pareja de iones puede ser modelado por un potencial coulombiana más un potencial de oscilador armónico y una pared de confinamiento duro. De esta manera, dos parámetros están disponibles para ajustar las propiedades de absorción y de emisión para una amplia gama del espectro electromagnético.

# Apéndice A

## Desarrollo analítico de la ecuación radial

Este apéndice describe el desarrollo analítico que se siguió para obtener la Ecuación 2.4 del Capítulo 2.

Se parte de la definición del hamiltoniano como el operador correspondiente a la energía total de un sistema cuántico. Para una partícula se tiene:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad (\text{A.1})$$

donde  $\hat{T}$  es el operador de energía cinética y  $\hat{V}$  es el operador de energía potencial.

El operador de energía potencial se expresa como:

$$\hat{V} = V(\mathbf{r}_1) \quad (\text{A.2})$$

donde  $\mathbf{r}_1$  es la posición de la partícula. Aquí se supone que la energía potencial es independiente del tiempo.

Por su parte, usando la definición clásica de la energía cinética,  $T = mv^2/2 = p^2/2m$ , el operador  $\hat{T}$  se expresa como:

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \frac{\hat{p}^2}{2m_1} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

donde  $m_1$  es la masa de la partícula y  $\hat{p} = -i\hbar\nabla_1$  es el operador del momento.

Substituyendo las Ecuaciones A.2 y A.3 en la Ecuación A.1, se obtiene una expresión para el hamiltoniano de una partícula:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 + V(\mathbf{r}_1) \quad (\text{A.4})$$

Para un sistema de dos partículas, el principio de superposición permite escribir el hamiltoniano como:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V_1(\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}) \quad (\text{A.5})$$

donde  $V(\mathbf{r})$  es el potencial de interacción entre las dos partículas y que aquí se supone que depende solo de su posición relativa, es decir  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ .

El sistema considerado en este trabajo consta de dos iones puntuales con una interacción de potencial central, el cual se define más adelante. Por lo tanto, el hamiltoniano de este sistema es:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}) \quad (\text{A.6})$$

donde  $m_1$  y  $m_2$  son las masas del ion 1 y del ion 2, respectivamente, y  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ .

Para un sistema de dos partículas, el problema se separa si se emplean las coordenadas del centro de masa del par de partículas [78, p. 263]. Para cambiar el hamiltoniano al nuevo sistema de coordenadas, se definen los cambios de variable dados en las Ecuaciones A.7 y A.8.

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 \quad (\text{A.7})$$

donde a  $\mathbf{r}$  se le llama el vector relativo.

$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{M} \quad (\text{A.8})$$

donde  $\mathbf{R}$  es el centro de masa de las dos partículas y  $M = m_1 + m_2$  es la masa total del sistema.

Para construir los operadores diferenciales en términos de estas coordenadas el primer paso es encontrar las derivadas parciales de las Ecuaciones A.7 y A.8.<sup>1</sup>

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_1} = \frac{m_1}{M} \quad (\text{A.9})$$

---

<sup>1</sup>Aquí se sigue la notación usada en [79, p. 44], en la cual la derivada con respecto a un vector  $\mathbf{p}$  se entiende como el vector cuyos componentes son las derivadas con respecto a  $p_x, p_y, p_z$ .

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_2} = \frac{m_2}{M} \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_1} = -1 \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_2} = +1 \quad (\text{A.12})$$

El segundo paso es calcular los operadores para las primeras derivadas.

$$\begin{aligned} \nabla_1 &= \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_1} \nabla_R + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_1} \nabla_r \\ &= \frac{m_1}{M} \nabla_R - \nabla_r \quad \text{Usando las Ecuaciones A.9 y A.11} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned} \nabla_2 &= \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_2} \nabla_R + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_2} \nabla_r \\ &= \frac{m_2}{M} \nabla_R + \nabla_r \quad \text{Usando las Ecuaciones A.10 y A.12} \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

En el tercer paso se obtienen los operadores para las segundas derivadas.

$$\begin{aligned} \nabla_1^2 &= \nabla_1 \nabla_1 \\ &= \nabla_1 \left( \frac{m_1}{M} \nabla_R - \nabla_r \right) \quad \text{Usando la Ecuación A.13} \\ &= \frac{m_1}{M} \nabla_1 \nabla_R - \nabla_1 \nabla_r \\ &= \frac{m_1}{M} \left( \frac{m_1}{M} \nabla_R - \nabla_r \right) \nabla_R - \left( \frac{m_1}{M} \nabla_R - \nabla_r \right) \nabla_r \quad \text{Usando de nuevo la Ecuación A.13} \\ &= \frac{m_1^2}{M^2} \nabla_R^2 - \frac{m_1}{M} \nabla_r \nabla_R - \frac{m_1}{M} \nabla_R \nabla_r + \nabla_r^2 \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

$$\begin{aligned} \nabla_2^2 &= \nabla_2 \nabla_2 \\ &= \nabla_2 \left( \frac{m_2}{M} \nabla_R + \nabla_r \right) \quad \text{Usando la Ecuación A.14} \\ &= \frac{m_2}{M} \nabla_2 \nabla_R + \nabla_2 \nabla_r \\ &= \frac{m_2}{M} \left( \frac{m_2}{M} \nabla_R + \nabla_r \right) \nabla_R + \left( \frac{m_2}{M} \nabla_R + \nabla_r \right) \nabla_r \quad \text{Usando de nuevo la Ecuación A.14} \\ &= \frac{m_2^2}{M^2} \nabla_R^2 + \frac{m_2}{M} \nabla_r \nabla_R + \frac{m_2}{M} \nabla_R \nabla_r + \nabla_r^2 \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Ahora, las Ecuaciones A.15 y A.16 se substituyen en el hamiltoniano dado por la Ecuación A.6 para obtener el hamiltoniano en coordenadas del centro de masa.

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left( \frac{m_1^2}{M^2} \nabla_R^2 - \frac{m_1}{M} \nabla_r \nabla_R - \frac{m_1}{M} \nabla_R \nabla_r + \nabla_r^2 \right) \\
&\quad - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left( \frac{m_2^2}{M^2} \nabla_R^2 + \frac{m_2}{M} \nabla_r \nabla_R + \frac{m_2}{M} \nabla_R \nabla_r + \nabla_r^2 \right) + V(\mathbf{r}) \\
&= -\frac{\hbar^2 m_1}{2M^2} \nabla_R^2 + \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_r \nabla_R + \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R \nabla_r - \frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_r^2 \\
&\quad - \frac{\hbar^2 m_2}{2M^2} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_r \nabla_R - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R \nabla_r - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_r^2 + V(\mathbf{r}) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{m_1 + m_2}{M^2} \right) \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \nabla_r^2 + V(\mathbf{r}) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(\mathbf{r})
\end{aligned} \tag{A.17}$$

donde  $\mu = (m_1 m_2)/(m_1 + m_2)$  es la masa reducida.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es:

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{A.18}$$

Substituyendo el hamiltoniano de la Ecuación A.17 en la Ecuación A.18:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \tag{A.19}$$

Se propone  $\psi$  como el producto de dos funciones, esto es  $\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = S(\mathbf{R})U(\mathbf{r})$  y con ello aplicar el método de separación de variables en la ecuación de Schrödinger.

$$-U(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 S(\mathbf{R}) - S(\mathbf{R}) \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 U(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})S(\mathbf{R})U(\mathbf{r}) = ES(\mathbf{R})U(\mathbf{r}) \tag{A.20}$$

Después de dividir entre  $S(\mathbf{R})U(\mathbf{r})$  y de arreglar algunos términos.

$$-\frac{1}{S(\mathbf{R})} \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 S(\mathbf{R}) = E + \frac{1}{U(\mathbf{r})} \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 U(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r}) \tag{A.21}$$

El lado izquierdo depende solo de  $\mathbf{R}$ , mientras que el derecho depende solo de  $\mathbf{r}$ . De esta forma, ambos lados deben ser iguales a una constante de separación,  $\eta$ , produciendo dos ecuaciones.

$$\begin{aligned} -\frac{1}{S(\mathbf{R})} \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 S(\mathbf{R}) &= \eta \\ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 S(\mathbf{R}) &= \eta S(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

y

$$\begin{aligned} E + \frac{1}{U(\mathbf{r})} \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 U(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r}) &= \eta \\ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 U(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})U(\mathbf{r}) &= (E - \eta) U(\mathbf{r}) \\ \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(\mathbf{r}) \right) U(\mathbf{r}) &= \varepsilon U(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

donde  $\varepsilon = E - \eta$ .

La Ecuación A.22 es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la partícula libre de masa  $M$  cuyas funciones de onda y energías propias son conocidas [78, p. 266]. Por otro lado, la Ecuación A.23 se puede separar notando que tiene simetría esférica para problemas de campo central, por lo que  $U(\mathbf{r})$  se expresa como:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (\text{A.24})$$

donde  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  son los armónicos esféricos.

Así, recordando que en coordenadas esféricas el operador  $\nabla^2$  es:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (\text{A.25})$$

entonces

$$\begin{aligned}
\nabla_r^2 &= \frac{Y_{lm}(\theta, \phi)}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \frac{u(r)}{r} \right] + \frac{u(r)}{r^3} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \phi} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] Y_{lm}(\theta, \phi) \\
&= \frac{Y_{lm}(\theta, \phi)}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{u(r)}{r} \right] - \frac{u(r)}{r^3} \left[ \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} \right] Y_{lm}(\theta, \phi) \\
&= \frac{Y_{lm}(\theta, \phi)}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} r^2 \left( -\frac{u(r)}{r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u(r)}{\partial r} \right) \right] - \frac{u(r)}{r^3} \left[ \frac{\hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi)}{\hbar^2} \right] \\
&= \frac{Y_{lm}(\theta, \phi)}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( -u(r) + r \frac{\partial u(r)}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)u(r)}{r} \right] \\
&= \frac{Y_{lm}(\theta, \phi)}{r^2} \left[ -\frac{\partial u(r)}{\partial r} + \frac{\partial u(r)}{\partial r} + r \frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)u(r)}{r} \right] \\
&= \frac{Y_{lm}(\theta, \phi)}{r} \left[ \frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)u(r)}{r^2} \right]
\end{aligned} \tag{A.26}$$

Substituyendo la Ecuación A.26 en la Ecuación A.23 y quitando la derivada parcial ya que todas las funciones y derivadas dependen solo de  $\mathbf{r}$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{Y_{lm}(\theta, \phi)}{r} \left( \frac{d^2 u(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) \right) + V(r) \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) = \varepsilon \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Multiplicando lo anterior por  $-2\mu r^3/\hbar^2 u(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ :

$$\frac{r^2}{u(r)} \left( \frac{d^2 u(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) \right) - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} V(r) = -\frac{2\mu r^2}{\hbar^2} \varepsilon$$

Multiplicando ahora por  $-\hbar^2 u(r)/2\mu r^2$  se obtiene:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{d^2 u(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) \right) + V(r) u(r) = \varepsilon u(r)$$

Rearreglando los términos se obtiene la siguiente ecuación para la parte radial de la función de onda:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left( V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u(r) = \varepsilon u(r) \tag{A.27}$$

Falta por especificar la función de potencial  $V(r)$ . En este trabajo se considera el siguiente potencial central:

$$V(r) = \sigma \frac{N_1 N_2 e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon} \frac{1}{r} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2 \tag{A.28}$$

donde  $N_1$  y  $N_2$  son las cargas netas del ion 1 y 2, respectivamente;  $\sigma = +1$  si las cargas del ion 1 y del ion 2 tienen el mismo signo, o  $-1$  en otro caso;  $\mu$  es la masa reducida;  $r$  es la distancia entre los dos iones;  $\epsilon_0$  es la permitividad eléctrica del espacio libre;  $\epsilon$  es la permitividad relativa del material en el cual los iones están inmersos;  $\omega$  es la frecuencia angular del término de oscilador armónico.

Substituyendo la Ecuación A.28 en la Ecuación A.27 se obtiene la siguiente ecuación de Schrödinger para la parte radial de la función de onda.

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2 + \sigma \gamma \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u(r) = \varepsilon u(r) \quad (\text{A.29})$$

donde  $\gamma = N_1 N_2 e^2 / 4\pi \epsilon_0 \epsilon$ .

Como último paso la Ecuación A.29 es adimensionalizada.

Multiplicando la Ecuación A.29 por  $-2\mu/\hbar^2$  y moviendo algunos términos:

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( \varepsilon - \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2 - \sigma \gamma \frac{1}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right) u(r) = 0 \quad (\text{A.30})$$

Sea  $r = \alpha x$ , con  $\alpha$  desconocida por ahora, entonces:

$$\frac{du(r)}{dr} = \frac{1}{\alpha} \frac{du(x)}{dx}, \quad \frac{d^2 u(r)}{dr^2} = \frac{1}{\alpha^2} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} \quad (\text{A.31})$$

Substituyendo la Ecuación A.31 en la Ecuación A.30:

$$\frac{1}{\alpha^2} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + 2 \left( \frac{\mu \varepsilon}{\hbar^2} - \frac{\mu^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} \omega^2 \alpha^2 x^2 - \sigma \frac{\mu}{\hbar^2} \gamma \frac{1}{\alpha x} - \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu x^2} \right) u(x) = 0 \quad (\text{A.32})$$

Multiplicando por  $\alpha^2$ :

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + 2 \left( \frac{\mu \varepsilon \alpha^2}{\hbar^2} - \frac{\mu^2 \omega^2 \alpha^4}{2\hbar^2} x^2 - \sigma \frac{\mu}{\hbar^2} \gamma \frac{\alpha}{x} - \frac{l(l+1)}{2x^2} \right) u(x) = 0 \quad (\text{A.33})$$

Sea  $\alpha = a_0$ , donde  $a_0 = \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{m e^2}$  es el radio de Bohr. Sea, también, la masa reducida,  $\mu$ , definida en términos de la masa del electrón,  $m$ ,  $\mu = \alpha' m$ , con  $\alpha' \in \mathbb{R}$ .

Se calcula la siguiente expresión:

$$\frac{\hbar^2}{\mu\alpha^2} = \frac{1}{\alpha'} \frac{\hbar^2}{ma_0^2} = \frac{1}{\alpha'} \frac{\hbar^2}{m \left(\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}\right)^2} = \frac{1}{\alpha'} \frac{me^4}{16\hbar^2\pi^2\epsilon_0^2} = \frac{2E_1}{\alpha'} \quad (\text{A.34})$$

donde  $E_1$  es la energía del estado base del átomo de hidrógeno.

Usando la Ecuación A.34 en la Ecuación A.33 se obtiene la siguiente expresión para la energía:

$$\frac{\mu\varepsilon\alpha^2}{\hbar^2} = \frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2}\varepsilon = \frac{\alpha'}{2E_1}\varepsilon = \alpha' \frac{\varepsilon}{E_1} = \alpha'E' \quad (\text{A.35})$$

Para el término del potencial coulombiano:

$$\sigma \frac{\mu}{\hbar^2} \gamma \frac{\alpha}{x} = \sigma \frac{\alpha'm}{\hbar^2} \frac{N_1 N_2 e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \frac{1}{x} = \sigma \frac{\alpha' N_1 N_2}{\epsilon x} = \sigma \frac{a}{x} \quad (\text{A.36})$$

donde  $a = \frac{\alpha' N_1 N_2}{\epsilon}$ .

Y, finalmente, para el término de oscilador armónico:

$$\begin{aligned} \frac{\mu^2\omega^2\alpha^4}{2\hbar^2}x^2 &= \frac{\alpha'^2 m^2 \omega^2}{2\hbar^2} \left(\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}\right)^4 x^2 = \frac{\alpha'^2 m^2 \omega^2}{2\hbar^2} \frac{4^4 \pi^4 \epsilon_0^4 \hbar^8}{m^4 e^8} x^2 \\ &= \frac{4^4 \alpha'^2 \pi^4 \epsilon_0^4 \hbar^6}{2m^2 e^8} \omega^2 x^2 = bx^2 \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

donde  $b = \frac{4^4 \alpha'^2 \pi^4 \epsilon_0^4 \hbar^6}{2m^2 e^8} \omega^2$ .

Substituyendo las Ecuaciones A.35, A.36, y A.37 en la Ecuación A.33 se obtiene una ecuación adimensional para la coordenada radial:

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \left( \alpha' 2E' - 2bx^2 - \sigma \frac{2a}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) u(x) = 0 \quad (\text{A.38})$$

donde  $\alpha' = \mu/m$  ( $\mu$  es la masa reducida,  $m$  es la masa del electrón),  $a = \frac{\alpha' N_1 N_2}{\epsilon}$ ,  $b = \frac{4^4 \alpha'^2 \pi^4 \epsilon_0^4 \hbar^6}{2m^2 e^8} \omega^2$ , y  $\sigma = +1$  si la carga neta de los dos iones tienen el mismo signo o  $-1$  en otro caso.

En la Ecuación A.38 las unidades de distancia son radios de Bohr y las unidades de energía son hartrees.

# Apéndice B

## Método de disparo

### B.1. Algoritmo básico

Los principales métodos para resolver numéricamente ecuaciones diferenciales ordinarias, por ejemplo el método de Euler y los métodos de Runge-Kutta, suponen que la ecuación diferencial tiene valores iniciales. El método de disparo se puede utilizar para el caso cuando la ecuación diferencial tiene valores en la frontera.

Como primer paso, el método de disparo transforma la ecuación diferencial con valores en la frontera en una ecuación con valores iniciales proponiendo un valor para la derivada en el punto inicial. Por ejemplo, la siguiente ecuación diferencial de segundo orden con valores en la frontera:

$$\begin{aligned}y''(x) &= f(y'(x), y(x), x) \\ y(x_0) &= y_0, y(x_1) = y_1\end{aligned}\tag{B.1}$$

Se transforma en una ecuación diferencial con valores iniciales al proponer  $\alpha$  como el valor de la derivada en el punto inicial:

$$\begin{aligned}y''(x) &= f(y'(x), y(x), x) \\ y(x_0) &= y_0, y'(x_0) = \alpha\end{aligned}\tag{B.2}$$

Enseguida se utiliza algún método, como Runge-Kutta de cuarto orden, para integrar la ecuación diferencial obteniendo una solución  $y^*(x)$ .

Por último, se compara  $y^*(x_1)$  con el segundo valor en la frontera  $y(x_1)$ . Si el valor absoluto de la diferencia es menor que un margen de error preestablecido,  $\varepsilon$ , entonces  $y^*(x)$  se acepta como solución. En otro caso, hay dos posibilidades: a) si  $y^*(x_1)$  es menor que  $y(x_1)$  entonces  $\alpha$  se incrementa en un

valor preestablecido  $\Delta_\alpha$ ; b) si  $y^*(x_1)$  es mayor que  $y(x_1)$  entonces  $\alpha$  se decrementa en  $\Delta_\alpha$ . En cualquiera de estos dos últimos dos casos, se vuelve al paso anterior a calcular una nueva solución  $y^*(x)$ .

Lo anterior se resume de la siguiente forma:

1. Utilizar algún método para integrar la ecuación diferencial obteniendo una solución  $y^*(x)$ .
2. Compara  $y^*(x_1)$  con  $y(x_1)$ .
3. Si  $|y^*(x_1) - y(x_1)| < \varepsilon$  entonces se acepta  $y^*(x)$  como solución.
4. Si  $y^*(x_1) < y(x_1)$  entonces  $\alpha = \alpha + \Delta_\alpha$  y ve al paso 1.
5. Si  $y^*(x_1) > y(x_1)$  entonces  $\alpha = \alpha - \Delta_\alpha$  y ve al paso 1.

Como nota adicional, este algoritmo básico de disparo se puede acelerar empleando un algoritmo de búsqueda de raíces como bisección.

## B.2. Aplicación del método de disparo a la ecuación de Schrödinger

La principal limitación del método de disparo es que solo se puede aplicar a ecuaciones diferenciales ordinarias unidimensionales. Sin embargo, esta limitante es irrelevante si la ecuación en cuestión se puede separar y resolverse por separado para cada dimensión.

En el caso particular de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, especificada en una dimensión como

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{B.3})$$

la ecuación presenta dos características que no permiten la aplicación del algoritmo básico que se presentó en la sección anterior:

1. La ecuación tiene dos incógnitas: el valor de la energía,  $E$ , y la función de onda,  $\psi(x)$ .
2. Hay casos particulares, como el problema de un sistema no confinado, en los que la ecuación no tiene valores en la frontera derecha definidos.

El problema planteado en el inciso 2 se resuelve notando que como  $\psi(x) \rightarrow 0$  cuando  $x \rightarrow \infty$ , entonces se puede fijar un límite de integración,  $x_{max}$ , para el cual  $|\psi(x_{max})| < \varepsilon$  para cualquier  $\varepsilon$  arbitrario, y considerar el valor en la frontera derecha como  $\psi(x_{max}) \approx 0$ .

Por otra parte, el problema del inciso 1 se resuelve haciendo el disparo sobre el valor de la energía,  $E$ , de la siguiente forma [63]. Dados un valor mínimo para la energía,  $eMin$ , y un límite de integración,  $r_0$ , se calculan valores para la energía tales que  $E_0 = eMin < E_1 < E_2 < \dots$  junto con las correspondientes funciones de onda  $\psi_0(x), \psi_1(x), \psi_2(x), \dots$  notando que cuando ocurre que  $\psi_i(r_0)$  y  $\psi_{i+1}(r_0)$  cambian de signo es porque entre  $E_i$  y  $E_{i+1}$  existe un valor propio que puede ser refinado usando bisección.

Esta discusión nos conduce al algoritmo mostrado en la Sección 2.2 y que se presenta de nuevo a continuación.

DISPAROSCHRODINGER( $a, b, l, N, r_0$ )

```

1 // a y b son los coeficientes del potencial
2 // l es el valor del momento angular.
3 // N es la cantidad de funciones de onda que se desean encontrar.
4 // r_0 es el limite de integracion.
5 n = 0
6 e = eMin
7 u1[] = NUMEROV(e, a, b, l, N)
8 e = e + stepE
9 while n < N
10     u2[] = NUMEROV(e, a, b, l, N)
11     if u1[r_0] * u2[r_0] < 0
12         usol[], esol = BISECCION(e - stepE, e, u1[], u2[])
13         GUARDA(usol[], esol)
14         n = n + 1
15     u1[] = u2[]
16     e = e + stepE
17 return
```

# Apéndice C

## Artículos y ponencias

### C.1. Artículos en revistas de impacto

1. Villa-Martinez, H. A.; Castellanos-Moreno A.; Corella-Madueño A.; Rosas-Burgos, R. A. "Two ions harmonically bound by a central field confined by an impenetrable spherical box". Aceptado para su publicación en Journal of Computational and Theoretical Nanoscience.
2. Villa-Martinez, H. A.; Castellanos-Moreno A.; Corella-Madueño A.; Rosas-Burgos, R. A. "Determination of Einstein A and B Coefficients for a Confined Two Ions System Under the Action of a Harmonic Oscillator Potential". Aceptado para su publicación en Journal of Computational and Theoretical Nanoscience.

### C.2. Ponencias

1. Villa-Martinez, H. A.; Castellanos-Moreno A.; Corella-Madueño A.; Rosas-Burgos, R. A. "Dos iones armónicamente ligados por un campo central confinado por una caja esférica impenetrable". XIX Reunión Universitaria de Investigación en Materiales RUIM 2014. Universidad de Sonora. 19 al 21 de noviembre de 2014.
2. Villa-Martinez, H. A.; Castellanos-Moreno A.; Corella-Madueño A.; Rosas-Burgos, R. A. "Dos iones armónicamente ligados por un campo central confinado por una caja esférica impenetrable". Semana de Nanotecnología 2015. Universidad de Sonora. 25 al 29 de mayo de 2015.

# Bibliografía

- [1] Norberto Aquino Aquino. *Uso del método de series para el estudio de sistemas cuánticos confinados*. PhD thesis, Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa, México, D.F., Octubre 1997.
- [2] Sahil Dhawan. *Quantum confinement and residual stress effects on optical properties of  $M_2O_5$  ( $M = V, Nb, Ta$ ) films*. PhD thesis, University of Delhi, Delhi, India, Octubre 2014.
- [3] V. Arivazhagan. *Investigation of Quantum Confinement Effect in Pb-Se/ZnSe Multiple Quantum Well Structures Prepared by Thermal Evaporation Technique*. PhD thesis, Karunya University, Coimbatore, India, Julio 2014.
- [4] Federico V. Prudente and Marcilio N. Guimarães. Confined quantum systems using the finite element and discrete variable representation methods. In K. D. Sen, editor, *Electronic Structure of Quantum Confined Atoms and Molecules*, page 101. Springer, Cham, Switzerland, 2014.
- [5] P. K. Bose, N. Paitya, S. Bhattacharya, D. De, S. Saha, K. M. Chatterjee, S. Pahari, and K. P. Ghatak. Influence of light waves on the effective electron mass in quantum wells, wires, inversion layers and superlattices. *Quantum Matter*, 1(2):89–126, 2012.
- [6] K. P. Ghatak, S. Bhattacharya, A. Mondal, S. Debbarma, P. Ghorai, and A. Bhattacharjee. On the Fowler-Nordheim field emission from quantum-confined optoelectronic materials in the presence of light waves. *Quantum Matter*, 2(1):25–41, 2013.
- [7] T. Chakraborty. *Quantum Dots: A Survey of the Properties of Artificial Atoms*. Elsevier Science, Amsterdam, Holland, 1999.
- [8] Stephanie M. Reimann and Matti Manninen. Electronic structure of quantum dots. *Rev. Mod. Phys.*, 74:1283–1342, Nov 2002.

- [9] E. M. Kazaryan, A. V. Meliksetyan, and H. A. Sarkisyan. Interband absorption in a narrowband insb cylindrical quantum dots in presence of the magnetic field. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 7(2):486–491, 2010.
- [10] M. Narayanan and A. John Peter. Pressure and temperature induced non-linear optical properties in a narrow band gap quantum dot. *Quantum Matter*, 1(1):53–58, 2012.
- [11] B. Vaseghi, G. Rezaei, S. H. Hendi, and M. Tabatabaei. Comparison between the nonlinear born-infeld and coulomb theories in quantum dots. *Quantum Matter*, 2(3):194–198, 2013.
- [12] Jagjit Singh, Manoj Malik, P. K. Jha, and Man Mohan. Computation of energy spectra of quantum dot using configuration interaction technique by including correlation and relativistic effects. *Quantum Matter*, 2(6):444–448, 2013.
- [13] Nicolina Pop, Dušan Popov, Vjekoslav Sajfert, Ljiljana Mašković, and Branimir Sajfert. Thermodynamic and kinetic properties of mechanical oscillations in nanostructures such as cylindrical quantum dots and thin films. *Quantum Matter*, 3(4):315–327, 2014.
- [14] F. Geerinckx, F. M. Peeters, and J. T. Devreese. Effect of the confining potential on the magneto-optical spectrum of a quantum dot. *Journal of Applied Physics*, 68(7):3435–3438, 1990.
- [15] C. Y. Ngo, S. F. Yoon, W. J. Fan, and S. J. Chua. Effects of size and shape on electronic states of quantum dots. *Phys. Rev. B*, 74:245331, Dec 2006.
- [16] Garnett W. Bryant. Electronic structure of ultrasmall quantum-well boxes. *Phys. Rev. Lett.*, 59:1140–1143, Sep 1987.
- [17] Wenfang Xie. Two interacting electrons in a Gaussian confining potential quantum dot. *Solid State Communications*, 127(5):401–405, 2003.
- [18] D. C. Thompson and A. Alavi. Three, four and five interacting electrons in a spherical box: an exact diagonalization study extended. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 16(45):7979–7994, 2004.
- [19] L. Infeld and T. E. Hull. The factorization method. *Rev. Mod. Phys.*, 23:21–68, Jan 1951.

- [20] A. Michels, J. De Boer, and A. Bijl. Remarks concerning molecular interaction and their influence on the polarisability. *Physica*, 4(10):981–994, 1937.
- [21] A. Sommerfeld and H. Welker. Künstliche grenzbedingungen beim keplerproblem. *Annalen der Physik*, 424(1-2):56–65, 1938.
- [22] S. R. De Groot and C. A. Ten Seldam. On the energy levels of a model of the compressed hydrogen atom. *Physica*, 12(9-10):669–682, 1946.
- [23] C. A. Ten Seldam and S. R. De Groot. On the ground state of a model for compressed helium. *Physica*, 18(11):891–904, 1952.
- [24] Eduardo V. Ludeña. SCF Hartree–Fock calculations of ground state wavefunctions of compressed atoms. *The Journal of Chemical Physics*, 69(4):1770–1775, 1978.
- [25] Eduardo V. Ludeña and Marianne Gregori. Configuration interaction calculations for two-electron atoms in a spherical box. *The Journal of Chemical Physics*, 71(5):2235–2240, 1979.
- [26] R. LeSar and D. R. Herschbach. Electronic and vibrational properties of molecules at high pressures. hydrogen molecule in a rigid spheroidal box. *The Journal of Physical Chemistry*, 85(19):2798–2804, 1981.
- [27] E. Ley-Koo and Sergio Rubinstein. The hydrogen atom within spherical boxes with penetrable walls. *The Journal of Chemical Physics*, 71(1):351–357, 1979.
- [28] E. Ley-Koo and Sergio Rubinstein. The hydrogen atom inside boxes with paraboloidal surfaces. *The Journal of Chemical Physics*, 73(2):887–893, 1980.
- [29] P. W. Fowler. Energy, polarizability and size of confined one-electron systems. *Molecular Physics*, 53(4):865–889, 1984.
- [30] W. Jaskólski. Confined many-electron systems. *Physics Reports*, 271(1):1–66, 1996.
- [31] V. K. Dolmatov, A. S. Baltentkov, J-P. Connerade, and S.T. Manson. Structure and photoionization of confined atoms. *Radiation Physics and Chemistry*, 70(1):417–433, 2004.

- [32] V. Fock. Bemerkung zur quantelung des harmonischen oszillators im magnetfeld. *Zeitschrift für Physik*, 47(5-6):446–448, 1928.
- [33] C. G. Darwin. The diamagnetism of the free electron. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 27:86–90, 1 1931.
- [34] K. Grudzinski and B.G. Wybourne. Symplectic models of n-particle systems. *Reports on Mathematical Physics*, 38(2):251–266, 1996.
- [35] D. J. Rowe and C. Bahri. Rotation-vibrational spectra of diatomic molecules and nuclei with Davidson interactions. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 31(21):4947, 1998.
- [36] Swapan K. Ghosh and Alok Samanta. Study of correlation effects in an exactly solvable model two-electron system. *The Journal of Chemical Physics*, 94(1):517–522, 1991.
- [37] Miloslav Znojil. Harmonic oscillator well with a screened Coulombic core is quasi-exactly solvable. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 32(24):4563–4570, 1999.
- [38] A. G. Ushveridze. *Quasi-Exactly Solvable Models in Quantum Mechanics*. Institute of Physics Publishing, Bristol, UK, 1994.
- [39] D. Bielinska-Waz, J. Karwowski, and G. H. F. Diercksen. Spectra of confined two-electron atoms. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 34(10):1987, 2001.
- [40] P. A. Maksym and Tapash Chakraborty. Quantum dots in a magnetic field: Role of electron-electron interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 65:108–111, Jul 1990.
- [41] U. Merkt, J. Huser, and M. Wagner. Energy spectra of two electrons in a harmonic quantum dot. *Phys. Rev. B*, 43:7320–7323, Mar 1991.
- [42] A. Merwyn, Jasper D. Reuben, Dinesh Varshney, and K. Jayakumar. Effect of confining potential on the diamagnetic susceptibility of a donor in a spherical quantum dot. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 8(2):189–193, 2011.
- [43] J. C. Stewart and K. D. Pyatt, Jr. Lowering of ionization potentials in plasmas. *The Astrophysical Journal*, 144(3):1203–1211, Jun 1966.

- [44] Stanley Skupsky. X-ray line shift as a high-density diagnostic for laser-imploded plasmas. *Phys. Rev. A*, 21:1316–1326, Apr 1980.
- [45] R. Cauble, M. Blaha, and J. Davis. Comparison of atomic potentials and eigenvalues in strongly coupled neon plasmas. *Phys. Rev. A*, 29:3280–3287, Jun 1984.
- [46] John Sabin and Erkki Brandas, editors. *Advances in Quantum Chemistry*, volume 57. Academic Press, 2009.
- [47] John Sabin and Erkki Brandas, editors. *Advances in Quantum Chemistry*, volume 58. Academic Press, 2009.
- [48] A. V. Scherbinin, V. I. Pupyshev, and A. Yu. Ermilov. One electron atom in a spherical cavity as a model for the electronic structure of the internal atom of clusters. In V. D. Lakhno and G. N. Chuev, editors, *Physics of Clusters*, pages 273–292. World Scientific Publishing Co., Singapore, Aug 1998.
- [49] H. E. Montgomery, N. A. Aquino, and K. D. Sen. Degeneracy of confined D-dimensional harmonic oscillator. *International Journal of Quantum Chemistry*, 107(4):798–806, 2007.
- [50] M. Taut. Two electrons in an external oscillator potential: Particular analytic solutions of a Coulomb correlation problem. *Physical Review A*, 48(5):3561–3566, November 1993.
- [51] Francisco M. Fernández, Alejandro M. Mesón, and Eduardo A. Castro. Energy eigenvalues from a modified operator method. *Physics Letters A*, 111(3):104–106, 1985.
- [52] Enrique Castro and Pablo Martín. Eigenvalues of the Schrödinger equation with Coulomb potentials plus linear and harmonic radial terms. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 33(30):5321, 2000.
- [53] Mary Alberg and L. Wilets. Exact solutions to the Schrödinger equation for potentials with Coulomb and harmonic oscillator terms. *Physics Letters A*, 286(1):7–14, 2001.
- [54] S. H. Patil and Y. P. Varshni. Hydrogenic system in an off-centre confining oscillator potential. *Canadian Journal of Physics*, 82(11):917–930, 2004.

- [55] Richard L. Hall, Nasser Saad, and K. D. Sen. Spectral characteristics for a spherically confined  $-a/r + br^2$  potential. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 44(185307), 2011.
- [56] A. Soylu. The influence of external fields on the energy of two interacting electrons in a quantum dot. *Annals of Physics*, 327:3048–3062, Dec 2012.
- [57] A. Mathew and M. K. Nandy. Two electrons in a cylindrical quantum dot under constant magnetic field. *Physica B*, 421:127–131, 2013.
- [58] V. Lozovski and V. Piatnytsia. The potential of the interaction between two nonpoint nanoparticles. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 10(9):2288–2298, 2013.
- [59] K. Arockia Jayalatha and John Bosco Balaguru Rayappan. Lennard-Jones on silver nanoparticles – an empirical approach. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 11(3):568–572, 2014.
- [60] Richard L. Burden and J. Douglas Faires. *Análisis Numérico*. Grupo Editorial Iberoamérica, México, DF, 1999.
- [61] Neill Lambert. Numerical solutions of Schrödinger’s equation. [http://wwwitp.physik.tu-berlin.de/brandes/public\\_html/qm/qv3.pdf](http://wwwitp.physik.tu-berlin.de/brandes/public_html/qm/qv3.pdf), 4 2001. Accessed 30/01/2014.
- [62] Sphen F.-P. Paul and Henning Fouckhardt. An improved shooting approach for solving the time-independent Schrödinger equation for III/V QW structures. *Physics Letters A*, 286:199–204, 7 2001.
- [63] Mohamed Tawhid. Numerical methods for solving the Schrödinger’s equation. Master’s thesis, Concordia University, Montréal, Canada, 11 1995.
- [64] Klaus Engel, Markus Hadwiger, Joe M. Kniss, Christof Rezk-Salama, and Daniel Weiskopf. *Real-Time Volume Graphics*. A. K. Peters, Ltd, Wellesley, MA, 2006.
- [65] Charles D. Hansen and Chris R. Johnson, editors. *The Visualization Handbook*. Elsevier Butterworth-Heinemann, Oxford, UK, 2005.
- [66] Luis de la Peña. *Introducción a la mecánica cuántica [Introduction to Quantum Mechanics]*. UNAM-FCE, México, D.F., 3rd edition, 2006.

- [67] W. L. Wiese, M. W. Smith, and B. M. Glennon. Atomic transition probabilities, volume I Hydrogen to Neon. Technical Report NSRDS-NBS 4-, National Bureau of Standards, Washington, D.C., May 1966.
- [68] Ashim Kalyan, Rupam Sen, Surja Kumar Singh, Nirmal Kumar Sarkar, and Ramendu Bhattacharjee. A spectroscopic analysis of stretching vibrational IR spectra of polyatomic molecules: A review. *Quantum Matter*, 2:321–323, August 2013.
- [69] Philippe Colomban. How Raman spectra of nanomaterials are related to disorder and particle/domain size? An overview. *Quantum Matter*, 3:361–380, August 2014.
- [70] Jianing Colin Xie and Rui-Hua Xie. Determination of the spectroscopic constants of newly identified diatomic molecules. *Quantum Matter*, 4:129–131, April 2015.
- [71] Zarrag Al-Fifi, May Eid, and Medhat Ibrahim. On the spectroscopic analyses of protein. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 10:2375–2379, October 2013.
- [72] Shang Gao, Jie Lian, Zhaozong Sun, Ping Li, Xiao Wang, and Huiying Zhong. Study of optical properties of  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  and  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  ultrathin films by spectroscopic ellipsometry. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 11:1069–1073, April 2014.
- [73] Debasish Guha Thakurata, Ashim Kalyan, Rupam Sen, and Ramendu Bhattacharjee. Vibrational spectra of copper oxides-synthesis, characterization and theoretical reconsideration by Lie algebra. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 11:1806–1811, August 2014.
- [74] Hanan Elhaes, Noha A. Saleh, Amina Omar, and Medhat Ibrahim. Molecular spectroscopic study of fulleropyrrolidine carbodithioic acid. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 11:2136–2140, October 2014.
- [75] Iffat H. Nayyar and Artëm E. Masunov. Two-photon absorption spectra predicted by semiempirical methods. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 11:2208–2220, October 2014.
- [76] J. R. Fuhr, B. J. Miller, and G. A. Martin. *Bibliography on Atomic Transition Probabilities (1914 through 1977)*. National Bureau of Standards, Washington, DC, 1978.

- [77] A. Kramida and J. R. Fuhr. NIST atomic transition probability bibliographic database (version 9.0). <http://physics.nist.gov/Fvalbib>, 2010. Accessed: 2015-2-14.
- [78] David A. B. Miller. *Quantum Mechanics for Scientists and Engineers*. Cambridge University Press, New York, NY, 2008.
- [79] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. Quantum mechanics. In *Course of Theoretical Physics*, volume 3. Pergamon Press, Oxford, UK, 2 edition, 1965.