

COMPORTAMIENTO DEL OSCILADOR ARMÓNICO CONFINADO EN PRESENCIA DE UN CAMPO ELÉCTRICO CONSTANTE

Silvana P. Flego

Dto. Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería.
Universidad Nacional de La Plata (UNLP).
(1900) La Plata. Buenos Aires. Argentina.
flego@fisica.unlp.edu.ar

Recientemente abordamos el estudio de los estados estacionarios en sistemas cuánticos confinados mediante un tratamiento derivado desde el teorema del virial. En esta comunicación mostramos los resultados obtenidos al aplicar la técnica para estudiar el comportamiento de las autoenergías en función de los parámetros propios de un oscilador armónico confinado en presencia de un campo eléctrico constante.

Palabras claves: sistemas confinados, oscilador armónico confinado, ansatz, virial, Schrödinger.

1. INTRODUCCIÓN

En los últimos años se está prestando mucha atención a los sistemas cuánticos confinados (SCC) debido a su importancia en una gran variedad de problemas físicos. Entre los numerosos modelos estudiados para describir un SCC, el oscilador armónico confinado (OAC) reviste de gran importancia debido al hecho que puede considerarse como una aproximación para una gran cantidad de potenciales arbitrarios cuando el sistema se encuentra cercano al equilibrio. El OAC juega un rol importante en muchas aplicaciones de la mecánica cuántica no relativistas. También desempeña un papel básico en química cuántica y física molecular donde se usa como un modelo simplificado para describir el movimiento vibratorio de dos átomos. Son innumerables las aplicaciones en astronomía [1-4], en la física del estado sólido [5-7], en el estudio de nanoestructuras cuánticas que tienen en cuenta aspectos tan importantes para el confinamiento como el tamaño de los puntos cuánticos [8,9], etc. En los últimos años ha surgido un interés renovado en sistemas confinados perturbados por campos externos [10-12], y en muchos de estos sistemas se aproxima el potencial de confinamiento mediante un modelo de OAC.

Un SCC es un ejemplo claro donde la teoría constituye una piedra angular para la explicación y predicción de nuevas propiedades de partículas espacialmente limitadas. El análisis de un problema en alguna subregión del espacio es importante principalmente cuando uno modela un sistema en un medio altamente no homogéneo o en campos externos intensos. Para una amplia gama de situaciones físicas, se puede considerar la ecuación de Schrödinger (SE) para algún subsistema con condiciones de contorno en la frontera de la región. El estudio de modelos confinados exactamente solubles e integrables tanto en la mecánica clásica como en la mecánica cuántica ha sido un tema de interés por mucho tiempo. Sin embargo, solo unos pocos admiten soluciones exactas. Aproximaciones de diversos tipos y varios métodos numéricos computacionales constituyen la herramienta disponible para abordar tales situaciones. En los últimos años, nuevas técnicas se han incorporado a la literatura [13-19], las cuales son herramientas matemáticas útiles, ya que se pueden calcular de forma precisa en sistemas informáticos. Recientemente un procedimiento alternativo, derivado del teorema del virial, ha sido desarrollado. El mismo permite obtener, de una manera simple, ansätze libres de parámetros de ajuste, para tratar con sistemas cuánticos libres y confinados en potenciales convexos y simétricos [20-22]. En esta comunicación, utilizamos los resultados presentados en [22] para abordar el estudio de una partícula confinada en un potencial armónico y sometida a un campo eléctrico estático.

2. PRELIMINARES

2.1 Campo eléctrico actuando sobre una partícula confinada

Consideremos un electrón confinado sometido a un campo eléctrico estático $\vec{\mathcal{E}}_0$. Si aproximamos el potencial de confinamiento con un OAC de intensidad ω^2 , el hamiltoniano que describe el acoplamiento del electrón con el campo, puede ser escrito como [23]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m_e \omega^2 x^2 - \vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{E}}_0 \quad (1)$$

donde $\vec{\mu}$ denota el momento dipolar eléctrico del electrón. Si \vec{r} es el vector de posición del electrón con respecto al origen y $q = -e$ es su carga, tenemos $\vec{\mu} = e \vec{r}$. Si suponemos que el campo eléctrico está en la dirección x se tiene $\vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{E}}_0 = e x \mathcal{E}_0$. Luego, si el electrón está confinado al intervalo $[a, b]$, la SE en u.a. ($\hbar = m_e = e = 1$) es dada por

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 - x \mathcal{E}_0 \right] \psi_n(x) = E_n \psi_n(x), \quad a \leq x \leq b \quad (2)$$

cuyas autofunciones deben satisfacer condiciones de contorno (cc) de Dirichlet,

$$\psi_n(a) = \psi_n(b) = 0 \quad (3)$$

La SE (2) puede ser transformada en la SE de un oscilador armónico trasladado, cuyo potencial presenta un mínimo en $x = \xi$. Considerando a $[a, b]$ como un intervalo de longitud 2η centrado en $x = \xi$, tenemos

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \omega^2 (x - \xi)^2 \right] \psi_n(x) = E_n^{\hat{a}} \psi_n(x), \quad \xi - \eta \leq x \leq \xi + \eta \quad (4)$$

con las cc dadas por: $\psi_n(\xi - \eta) = \psi_n(\xi + \eta) = 0$ (5)

La transformación de (2) a (4) establece que

$$\xi = \frac{\mathcal{E}_0}{\omega^2}, \quad E_n^{\hat{a}} = E_n + \frac{\mathcal{E}_0^2}{2\omega^2} \quad (6)$$

2.2 Ansätze para el oscilador armónico confinado

El obstáculo para avanzar en el estudio del sistema es el desconocimiento de soluciones exactas de la SE (4) condicionada por (5). Aproximaciones de diversos tipos y varios métodos numéricos computacionales constituyen las herramientas disponibles para abordar esta situación. En este estudio utilizaremos los ansätze χ_n para las autofunciones ψ_n presentados en [22], dados por

$$\chi_n(x) = \alpha_n \left\{ v_n(x) \chi(x) - \sum_{k=0}^{n-1} \langle \chi | v_n(x) | \chi_k \rangle \chi_k(x) \right\}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

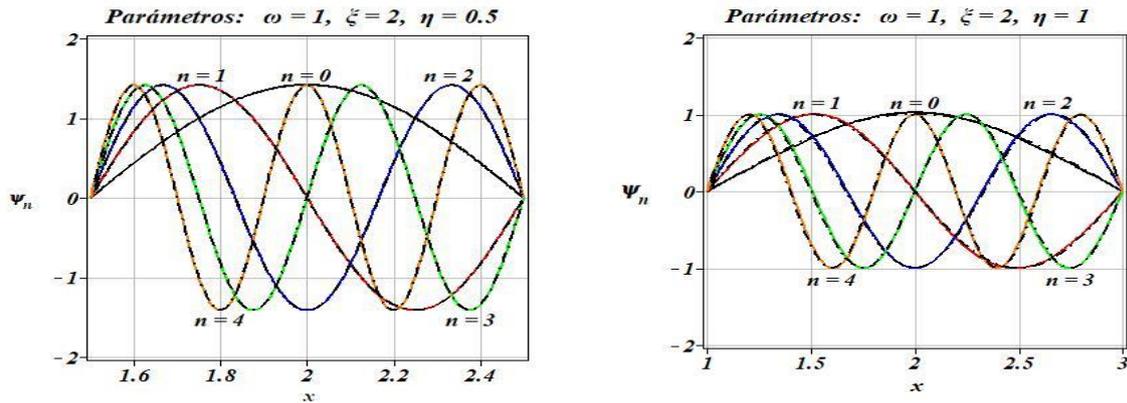
donde,

$$\chi(x) = \cosh \left\{ \frac{\omega}{2} \left[(x - \xi)^2 - \eta^2 \right] \right\}, \quad v_n(x) = \operatorname{sen} \left[\frac{(n+1)\pi}{2\eta} (x - \xi + \eta) \right] \quad (8)$$

siendo α_n constantes de normalización [22].

En la figura 1 están representadas las cinco primeras autofunciones y los correspondientes ansätze. Las gráficas fueron construidas fijando $\omega = 1$, $\xi = 2$ y considerando dos valores de η , $\eta = 0.5$ y $\eta = 1$. En cada gráfica son ploteadas con líneas a trazos (negras) las curvas obtenidas por cálculo numérico (se utilizó el programa Matslise) y aquellas obtenidas usando los ansätze (7) con líneas continuas (negro para χ_0 , rojo para χ_1 , azul para χ_2 , verde para χ_3 y coral para χ_4). Como se puede observar las curvas están solapadas, lo cual nos dice que pueden ser consideradas una buena aproximación.

FIGURA 1: AUTOFUNCIONES DEL OH CON CCH DE DIRICHLET



3. COMPORTAMIENTO DEL OAC EN PRESENCIA DEL CAMPO ELÉCTRICO

En esta sección mostramos algunas características del comportamiento de las autoenergías del OAC en función de los parámetros del sistema. Debido a que los ansätze incorporan la simetría del potencial, así como propiedades de transformación de la SE, utilizamos estas características para investigar el citado comportamiento.

3.1 Autoenergías aproximadas para el OAC

Los valores aproximados de las autoenergías, pueden ser obtenidos como [23]

$$E_n^* \approx E_n^{ansatz} = \int_{\xi-\eta}^{\xi+\eta} \chi_n(x) \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \omega^2 (x-\xi)^2 \right) \chi_n(x) dx \quad (9)$$

En las tablas 1 están tabulados los autovalores de energía correspondientes a las autofunciones graficadas en la figura 1. En la primera columna se encuentra el número cuántico principal n , en la segunda los autovalores de energía obtenidos por cálculo numérico computacional y en la tercera aquellos obtenidos utilizando (9). La cuarta columna muestra el error absoluto Δ_n y la quinta el error relativo porcentual \mathcal{E}_n ,

$$\Delta_n = E_n^{ansatz} - E_n^{num}, \quad \mathcal{E}_n = \frac{\Delta_n}{E_n^{num}} 100 \quad (10)$$

Como puede observarse, para $\eta = 0.5$ el error relativo porcentual para el estado fundamental es menor al 0.002% y decrece para los estados excitados. Para $\eta = 1$ los errores son mayores, pero se mantienen por debajo de un 0.3%.

TABLAS 1: AUTOVALORES DE ENERGÍA DEL AOC CON CCH DE DIRICHLET

Valores de los parámetros: $\omega = 1, \eta = 0.5$					Valores de los parámetros: $\omega = 1, \eta = 1$				
n	E_n^{num}	E_n^{ansatz}	Δ_n	\mathcal{E}_n	n	E_n^{num}	E_n^{ansatz}	Δ_n	\mathcal{E}_n
0	4.95112932	4.95119826	0.00006894	0.001392	0	1.29845983	1.30221766	0.00375781	0.289405
1	19.77453418	19.77467133	0.00013715	0.000694	1	5.07558200	5.08347860	0.00789661	0.155580
2	44.45207383	44.45221222	0.00013839	0.000311	2	11.25882580	11.26716708	0.00834128	0.074087
3	78.99692115	78.99706284	0.00014169	0.000179	3	19.89969651	19.90815866	0.00846215	0.042524
4	123.41071040	123.41085430	0.00014390	0.000117	4	31.00525450	31.01381607	0.00856157	0.027613

3.2 Dependencia de las autoenergías con los parámetros del sistema

❖ Si realizamos una traslación $u = x - \xi$ y definimos $\bar{\psi}_n(u) = \psi_n(u + \xi) = \psi_n(x)$, la SE (4) en el sistema trasladado \bar{S} es dada por

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2} \omega^2 u^2 \right] \bar{\psi}_n(u) = E_n^{\hat{a}} \bar{\psi}_n(u), \quad -\eta \leq u \leq \eta \quad (11)$$

y las autofunciones deben satisfacer las condiciones de contorno

$$\bar{\psi}_n(-\eta) = \bar{\psi}_n(\eta) = 0 \quad (12)$$

Las autoenergías $E_n^{\hat{a}}$ evaluadas en \bar{S} son dadas por

$$E_n^{\hat{a}} = \int_{-\eta}^{\eta} \bar{\psi}_n^*(u) \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2} \omega^2 u^2 \right) \bar{\psi}_n(u) du \quad (13)$$

de donde resulta evidente que $E_n^{\hat{a}}$ no depende del campo eléctrico aplicado

$$E_n^{\hat{a}} = E_n^{\hat{a}}(\omega, \eta) \quad (14)$$

❖ Si realizamos una transformación de escala $x = \omega^{-1/2} v$ sobre la SE (4), obtenemos

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dv^2} + \frac{1}{2} (v - \xi^{sc})^2 \right] \psi_n^{sc}(v) = E_n^{sc} \psi_n^{sc}(v), \quad \xi^{sc} - \eta^{sc} \leq v \leq \xi^{sc} + \eta^{sc} \quad (15)$$

donde, $\xi^{sc} = \omega^{1/2} \xi = \frac{\mathcal{E}_o}{\omega^{3/2}}, \quad \eta^{sc} = \omega^{1/2} \eta, \quad E_n^{sc} = \frac{1}{\omega} E_n^{\hat{a}} = \frac{E_n}{\omega} + \frac{\mathcal{E}_o^2}{2\omega^3}$ (16)

La SE (15) corresponde a un OAC con $\omega = 1$ cuyo mínimo ocurre en $v = \xi^{sc}$. Luego, teniendo en cuenta (14) tenemos

$$E_n^{sc} = E_n^{\hat{a}}(1, \eta^{sc}) \quad (17)$$

Las autofunciones y los autovalores del problema original pueden ser obtenidos realizando la transformación inversa $v = \omega^{1/2} x$. Luego se tiene

$$E_n^{\hat{a}}(\omega, \eta) = \omega E_n^{\hat{a}}(1, \omega^{1/2} \eta) \quad (18)$$

Teniendo en cuenta (6) y (18), las autoenergías de la SE (4) pueden expresarse como,

$$E_n(\omega, \eta, \mathcal{E}_o) = \omega E_n^{\hat{a}}(1, \omega^{1/2} \eta) - \frac{\mathcal{E}_o^2}{2\omega^2} \quad (19)$$

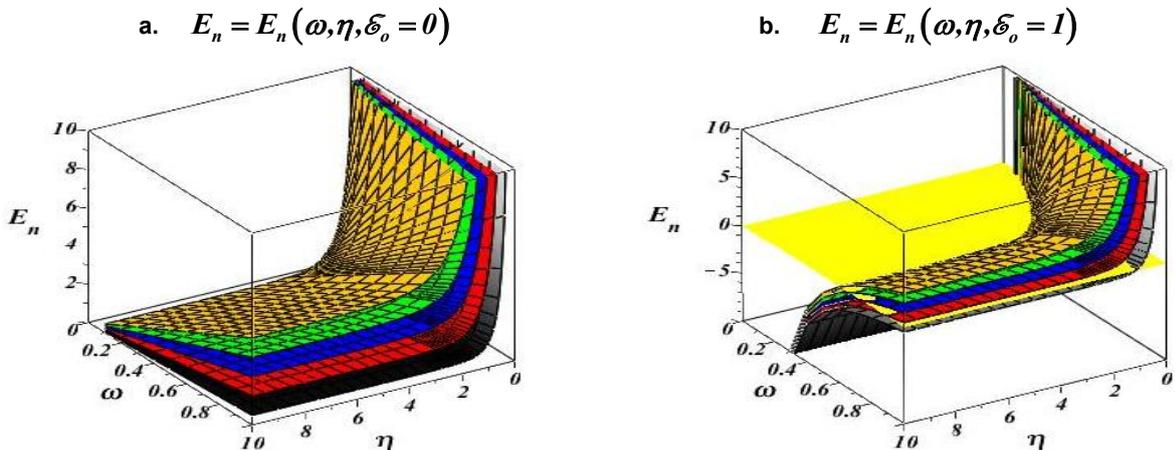
Dado que los ansätze (7) preservan las propiedades de la SE bajo transformaciones de traslación y escala, las autoenergías aproximadas obtenidas usando los ansätze (9) tienen la misma dependencia con los parámetros que los autovalores exactos,

$$E_n^{ans}(\omega, \eta) = \omega E_n^{ans}(1, \omega^{1/2} \eta) \quad (20)$$

$$E_n^{aprox}(\omega, \eta, \mathcal{E}_o) = \omega E_n^{ansatz}(1, \omega^{1/2} \eta) - \frac{\mathcal{E}_o^2}{2\omega^2} \quad (21)$$

En la figura 2 están graficadas las superficies de autoenergía correspondientes a los cinco primeros autoestados. La gráfica de la izquierda corresponde al OAC en ausencia de campo ($\mathcal{E}_o = 0$), y la de la derecha muestra el comportamiento del sistema sometido a un campo eléctrico ($\mathcal{E}_o = 1$). Como puede observarse el número de estados ligados que emergen por acción del campo depende de ω y de η .

FIGURA 2: SUPERFICIES DE AUTOENERGIA DEL OAC



3.3 Confinamiento en la región clásica

Los puntos de retorno clásicos x_r son aquellos donde la energía cinética de la partícula se anula. En la región entre los puntos de retorno, la energía cinética es positiva y esta es una región clásicamente permitida para la existencia de la partícula.

Para el oscilador armónico se tiene $x_r = \omega^{-1/2}$. Luego, si el sistema oscila entre los puntos de retorno, (18) y (20) conducen a

$$E_n^{num}(\omega, \eta) = \omega E_n^{num}(1, 1), \quad E_n^{ansatz}(\omega, \eta) = \omega E_n^{ansatz}(1, 1) \quad (22)$$

y el error relativo resulta constante para cada autoestado,

$$\mathcal{E}_n(\omega, \eta) = \frac{E_n^{ansatz}(\omega, \eta) - E_n^{num}(\omega, \eta)}{E_n^{num}(\omega, \eta)} 100 = \mathcal{E}_n(1, 1) \quad (23)$$

En la tabla 2 están tabulados los ansätze de autoenergía correspondientes a los primeros once estados cuánticos, para $\omega = \eta = 1$. En la primera columna se encuentra el número cuántico principal n , en la segunda los ansätze (9) y en la tercera los correspondientes errores relativos porcentual \mathcal{E}_n (23).

TABLA 2: AUTOENERGÍAS		
n	$E_n^{ansatz}(1, 1)$	$\mathcal{E}_n(1, 1)$
0	1,30221765	0,289405
1	5,08347860	0,155580
2	11,26716708	0,074087
3	19,90815866	0,042524
4	31,01381607	0,027613
5	44,58580370	0,019365
6	60,62468404	0,014320
7	79,13069365	0,011012
8	100,10394620	0,008727
9	123,54450170	0,007084
10	149,45239430	0,005864

Las autoenergías aproximadas (21) cuando el sistema oscila en la región clásica ($\eta \leq x_r$) son dadas por

$$E_n^{aprox}(\omega, \eta, \mathcal{E}_0) = \omega E_n^{ansatz}(1, \beta) - \frac{\mathcal{E}_0^2}{2\omega^2}, \quad \text{con } \beta = \omega^{1/2} \eta \leq 1 \quad (24)$$

y se encuentra que $\mathcal{E}_n(\omega, \eta) \leq \mathcal{E}_n(1, 1)$.

El número de estados ligados con energía negativa, puede ser determinado a partir de (24). En general podemos decir que los primeros k estados ligados tendrán energía negativa si

$$E_k^{ansatz}(1, \beta) \leq \frac{\mathcal{E}_0^2}{2\omega^3} \quad \text{y} \quad E_{k+1}^{ansatz}(1, \beta) > \frac{\mathcal{E}_0^2}{2\omega^3} \quad (25)$$

En las gráficas siguientes se representan las autoenergías para diferentes valores de los parámetros. En cada gráfica son ploteadas con líneas negras, a trazos, las curvas obtenidas por cálculo numérico computacional y con líneas continuas las obtenidas usando los ansätze (negro para $n=0$, rojo para $n=1$, azul para $n=2$, verde para $n=3$, coral para $n=4$, naranja para $n=5$, cian para $n=6$, marrón para $n=7$, magenta para $n=8$, rosa para $n=9$, oro para $n=10$). En la figura 3 están representadas las autoenergías como función del parámetro de confinamiento η (con $\eta \leq x_r$) para $\omega=1$ y en ausencia de campo eléctrico. En la figura 4 se representan los correspondientes errores relativos porcentual \mathcal{E}_n . Como puede observarse, en la región clásica, el error relativo es menor al 0.3% y corresponde al estado fundamental cuando $\eta=1$. Los errores en los estados excitados son siempre inferiores al del estado fundamental.

FIGURA 3: AUTOENERGÍAS ($\omega=1, \mathcal{E}_0=0$)

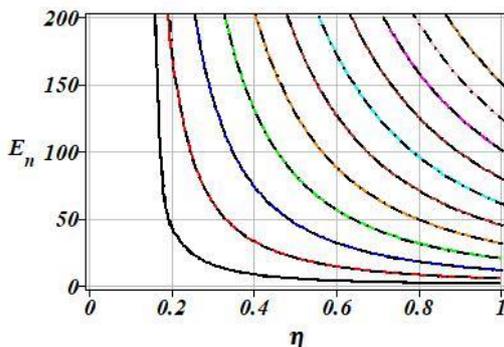
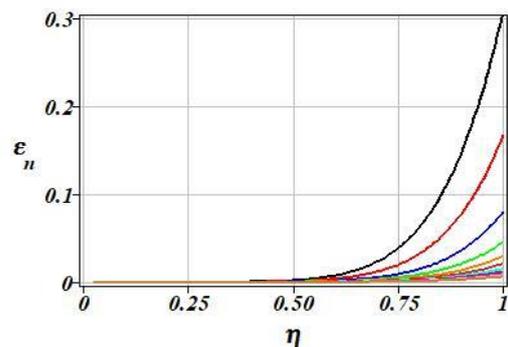


FIGURA 4: ERROR RELATIVO PORCENTUAL



En las figuras 6 y 7 están graficadas las autoenergías para los primeros 11 estados, como función del parámetro de confinamiento η para $\omega = \eta^{-2}$. En la figura 6 se representan las autoenergías en ausencia de campo eléctrico ($\mathcal{E}_o = 0$) y en la figura 7 las correspondientes cuando es aplicado un campo eléctrico de 0.006 u.a. Para este valor de \mathcal{E}_o y $\eta \approx 10$, podemos observar que los primeros tres autoestados tienen autoenergías negativas (25).

FIGURA 5: AUTOENERGIAS ($\omega = \eta^{-2}, \mathcal{E}_o = 0$)

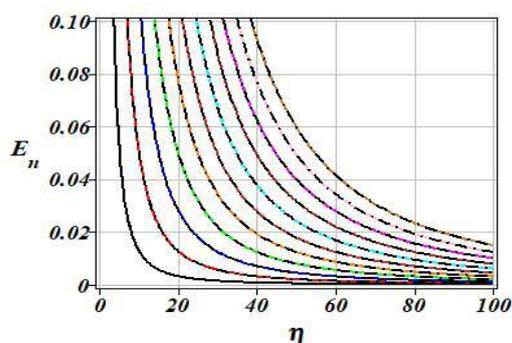
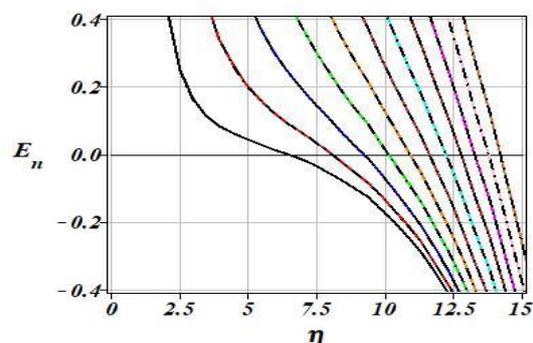


FIGURA 6: AUTOENERGIAS ($\omega = \eta^{-2}, \mathcal{E}_o = 0.006$)



4. CONCLUSIÓN

En esta comunicación utilizamos los avances alcanzados en el estudio de sistemas cuánticos confinados en potenciales simétricos convexos presentados en [22]. El hecho que el procedimiento, libre de parámetros de ajuste, incorpora la simetría del potencial y preserva las propiedades de transformaciones por traslación y escala de la ecuación de Schrödinger, nos permitió estudiar la dependencia de las autoenergías con los parámetros del sistema. Los resultados obtenidos constituyen una herramienta más para estudiar, predecir y controlar un oscilador armónico confinado sometido a un campo eléctrico estático.

Referencias

1. D. S. Kothari and F.C. Auluck, *Sci. Cult.* **6** (1940) 370.
2. F. C. Auluck, *Proc. Nat. Inst. Sci. India* **7** (1941) 133.
3. F. C. Auluck, *Proc. Nat. Inst. Sci. India* **8** (1942) 147.
4. S. Chandrasekhar, *Astrophys. J.* **97** (1943) 263.
5. B. Suryan, *Phys. Rev* **71** (1947) 741.
6. E. M. Corson and I Kaplan, *Phys. Rev.* **71** (1947) 130.
7. R. B. Dingle, *Proc. R. Soc. London Ser. A* **212** (1952) 47.
8. A Gonzalez Taboada. *Control de la forma, tamaño y composición de nanoestructuras de semiconductores III-V: anillos y puntos cuánticos* (Tesis doctoral, Fac. Cs., UAM, España, 2010).
9. A. Ramos. *Control de estados cuánticos en puntos cuánticos mediante campos magnéticos*. (Tesis doctoral, Fac. de Matemática, Astronomía, Física y Computación. UNC, Argentina, 2016).
10. S. Moroz, *Phys. Rev. A* **86** (2012) 011601.
11. R. Riera, J. L. Marín and R. A. Rosas: *Optical Properties and Impurity States in Nanostructured Materials. (Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices, 6, Acad. Press, San Diego, 2001).*
12. L. Lu, W. Xie and H. Hassanabadi, *J Appl Phys.* **109** (2011) 063108.
13. S.H. Dong and Z.Q. Ma, *Int. J. Mod. Phys. E*, **11** (2002) 155-160.
14. I. Bhatti, K. D. Coleman and W. F. Perger, *Phys. Rev. A*, **68** (2003) 044503.
15. B. Zhao and P. C. Stancil, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40** (2007) 4347- 4354.
16. J. Xi, L. Wu, X. He and B. Li, *Phys. Rev. A*, **46** (1992) 5806-5811.
17. I. Bhatti and W. F. Perger, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39** (2006) 553-558.
18. D. D. Bhatta and M. I. Bhatti, *Appl Math Comput.* **174** (2006)1255-1268.
19. S. Lumb, S. Lumb and V. Prasad, *Quantum Matter* **2** (2013) 314-320.
20. S. P. Flego: Virial-ansätze for the Schrödinger Equation with a symmetric strictly convex potential, (2020). ArXiv:2008.08179 [math-ph]. Submitted.
21. S. P. Flego: Virial-ansätze for the Schrödinger Equation with x^{2k} -type potential. Submitted.
22. S. P. Flego: Virial-ansätze for confined quantum systems into a symmetric convex potential. To be submitted
23. W. Greiner and B. Müller, *Quantum mechanics. An Introduction*, Springer, Berlin, 1988.