

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.

Introducción

Interés en Sistemas Cuánticos Confinados (SCC) debido a su importancia en una gran variedad de problemas físicos. 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.

Oscilador Armónico Confinado (OAC) Puede considerarse como una aproximación para una gran cantidad de potenciales arbitrarios cuando el sistema se encuentra cercano al equilibrio. Juega un rol importante en muchas aplicaciones de la ciencia y la tecnología.

En los últimos años ha surgido un interés renovado en SCC perturbados por campos externos, 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 (CC) en la frontera de la región.

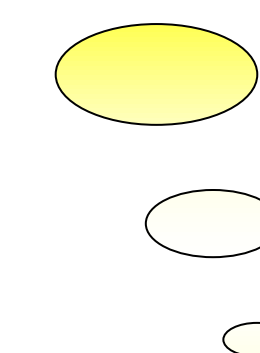
El estudio de modelos confinados exactamente solubles e integrables tanto en la mecánica clásica como en la mecánica cuántica ha sido un tema de interés por mucho tiempo.

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.

Recientemente ha sido desarrollado un procedimiento alternativo, que permite obtener de una manera simple, ansätze libres de parámetros de ajuste, para tratar con sistemas cuánticos confinados en potenciales convexos y simétricos.

¿No sería mejor usar un Método Numérico...?



Los modelos numéricos pueden aportar mayor precisión en el cálculo aunque en ocasiones puede ensombrecerse la física subyacente.

Por otra parte,

"... las sutilezas del cálculo numérico quedan oscurecidas por las imperfecciones de la Naturaleza."

J. I. Pankove



CAMPO ELÉCTRICO ACTUANDO SOBRE UNA PARTÍCULA CONFINADA

Consideremos un electrón confinado en un OAC sometido a un campo eléctrico estático $\vec{\delta}_0$.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m_e \omega^2 x^2 - \vec{\mu} \cdot \vec{\delta}_0$$

Si \vec{r} es el vector de posición del electrón y $\vec{\delta}_0 = \delta_0 \hat{e}_x \rightarrow \vec{\mu} \cdot \vec{\delta}_0 = e \vec{r} \cdot \vec{\delta}_0 = e x \delta_0$

Si el electrón está confinado en $[a, b]$, la SE en u.a. es dada por

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 - x \delta_0 \right] \psi_n(x) = E_n \psi_n(x), \quad a \leq x \leq b$$

cuyas autofunciones deben satisfacer CC de Dirichlet: $\psi_n(a) = \psi_n(b) = 0$

La SE puede ser transformada en la de un OA trasladado, cuyo potencial presenta un mínimo en $x = \xi$,

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

con:

$$\psi_n(\xi - \eta) = \psi_n(\xi + \eta) = 0$$

$$\xi = \frac{\delta_0}{\omega^2}, \quad E_n^* = E_n + \frac{\delta_0^2}{2\omega^2}$$

ANSÄTZE PARA EL OSCILADOR ARMÓNICO CONFINADO

Los ansätze χ_n para las autofunciones ψ_n son dados por

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

donde:

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

siendo α_n constantes de normalización,

$$\int_{\xi-\eta}^{\xi+\eta} \chi_i(x) \chi_j(x) dx = \delta_{ij}$$

y se satisfacen las CC:

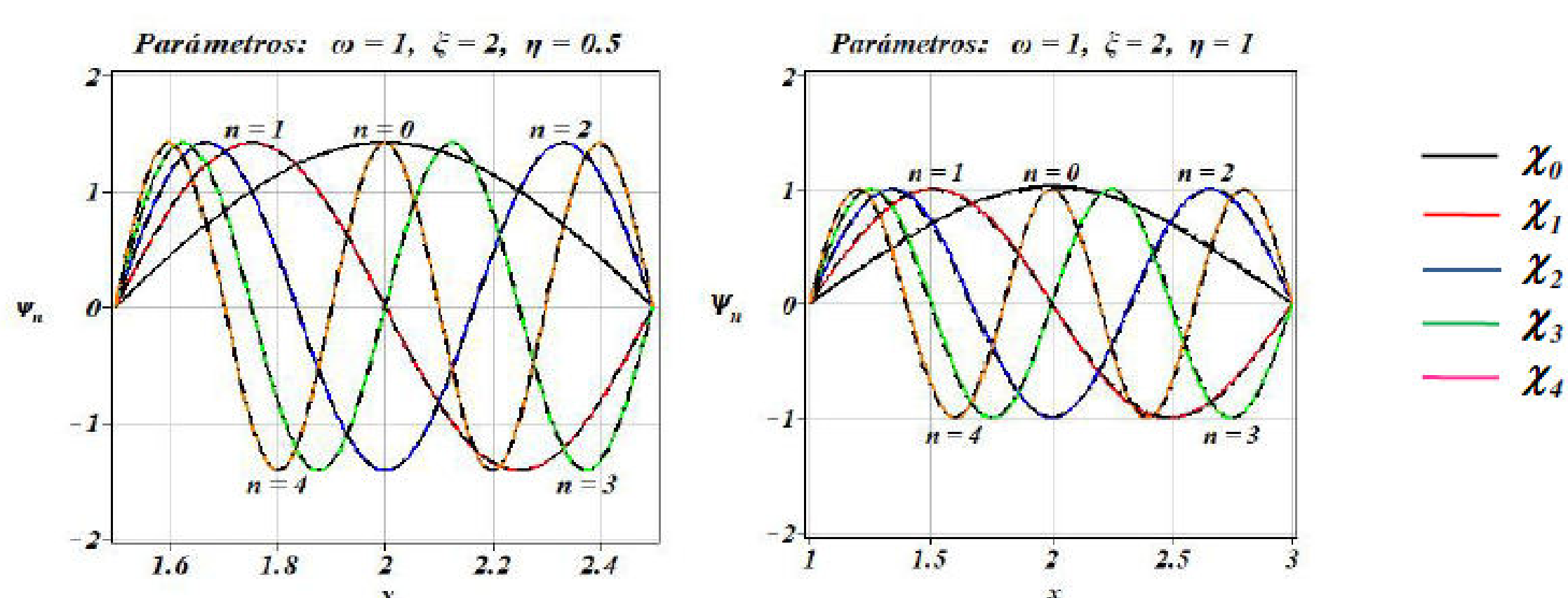
$$\chi_n(\xi - \eta) = \chi_n(\xi + \eta) = 0$$

Autoenergías Aproximadas

$$E_n^* = E_n^{\text{ansatz}} = \int_{\xi-\eta}^{\xi+\eta} \chi_n^*(x) \hat{H}^* \chi_n(x) dx$$

$$E_n = E_n^* - \frac{\delta_0^2}{2\omega^2} \rightarrow E_n^{\text{aprox}} = E_n^{\text{ansatz}} - \frac{\delta_0^2}{2\omega^2}$$

AUTOFUNCIONES DEL OAC CON CC DE DIRICHLET



Las curvas de línea a trazos corresponden a las autofunciones ψ_n de la SE y fueron obtenidas por cálculo numérico computacional, las curvas de línea sólida fueron obtenidas utilizando los ansätze χ_n . Como se puede observar las curvas están solapadas, lo cual nos dice que los ansätze χ_n pueden ser considerados una buena aproximación a las ψ_n .

Autoenergías aproximadas para el OAC

$$E_n = E_n^* - \frac{\delta_0^2}{2\omega^2} \left\{ \begin{array}{l} E_n = E_n^{\text{num}} - \frac{\delta_0^2}{2\omega^2}, \quad \text{con } E_n^{\text{num}} = \int_{\xi-\eta}^{\xi+\eta} \psi_n^*(x) \hat{H}^* \psi_n(x) dx \\ E_n^{\text{aprox}} = E_n^{\text{ansatz}} - \frac{\delta_0^2}{2\omega^2}, \quad \text{con } E_n^{\text{ansatz}} = \int_{\xi-\eta}^{\xi+\eta} \chi_n^*(x) \hat{H}^* \chi_n(x) dx \end{array} \right.$$

Error absoluto Δ_n y error relativo porcentual ϵ_n ,

$$\Delta_n = E_n^{\text{ansatz}} - E_n^{\text{num}}, \quad \epsilon_n = \frac{\Delta_n}{E_n^{\text{num}}} 100$$

AUTOVALORES DE ENERGÍA DEL OAC CON CC 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	ϵ_n	n	E_n^{num}	E_n^{ansatz}	Δ_n	ϵ_n
0	4.95112932	4.95119826	0.00006894	0.0014	0	1.29845983	1.30221766	0.00375781	0.2894
1	19.77453418	19.77467133	0.00013715	0.0007	1	5.07558200	5.08347860	0.00789661	0.1556
2	44.45207383	44.45221222	0.00013839	0.0003	2	11.25882580	11.26716708	0.00834128	0.0741
3	78.99692115	78.99706284	0.00014169	0.0002	3	19.89969651	19.90815866	0.00846215	0.0425
4	123.41071040	123.41085430	0.00014390	0.0001	4	31.00525450	31.01381607	0.00856157	0.0276

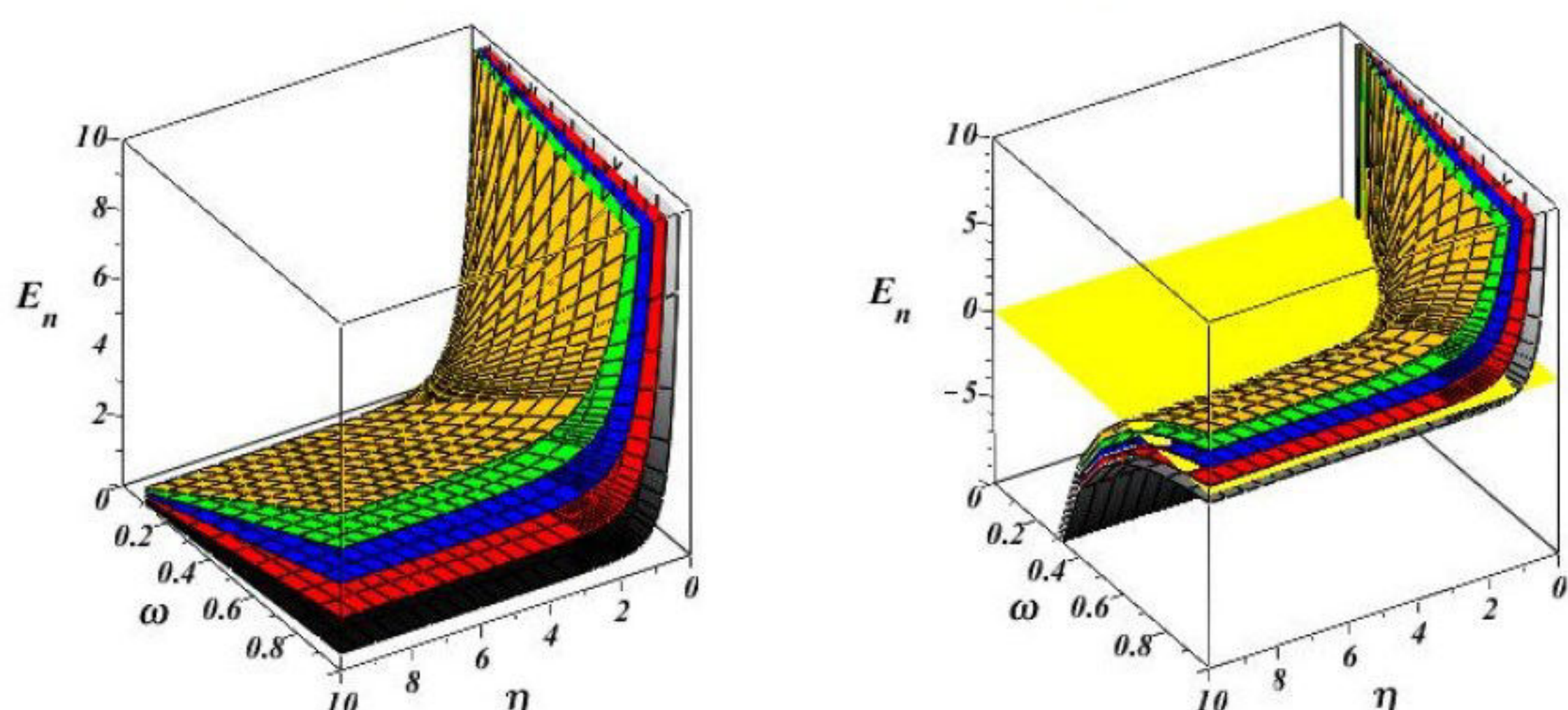
Para $\eta = 0.5 \rightarrow \epsilon_0 < 0.002\%$ y para $\eta = 1 \rightarrow \epsilon_0 < 0.3\%$

$$\forall n > 0, \quad \epsilon_n < \epsilon_0$$

SUPERFICIES DE AUTOENERGÍA DEL OAC

a. $E_n = E_n(\omega, \eta, \delta_0 = 0)$

b. $E_n = E_n(\omega, \eta, \delta_0 = 1)$



Dependencia de las autoenergías con los parámetros del sistema

Transformación de traslación: $S \xrightarrow{u=x-\xi} \bar{S}$

Definimos: $\bar{\psi}_n(u) \equiv \psi_n(u+\xi) = \psi_n(x)$

En \bar{S} : $\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2} \omega^2 u^2 \right] \bar{\psi}_n(u) = E_n^* \bar{\psi}_n(u), \quad \text{con: } \bar{\psi}_n(-\eta) = \bar{\psi}_n(\eta) = 0, \quad -\eta \leq u \leq \eta$

y se cumple que, E_n^* no depende de $\xi \rightarrow E_n^*$ no depende de $\delta_0 \rightarrow E_n^* = E_n^*(\omega, \eta)$

Los ansätze preservan las propiedades de la SE bajo transformaciones de traslación, $E_n^{\text{ansatz}} = E_n^{\text{ansatz}}(\omega, \eta)$

Transformación de escala: $S \xrightarrow{x=\omega^{-1/2}v} S^{\text{sc}}$

Definimos: $\psi_n^{\text{sc}}(v) \equiv \psi_n(\omega^{-1/2}v) = \psi_n(x)$

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

donde $\xi^{\text{sc}} = \omega^{1/2} \xi = \frac{\delta_0}{\omega^{3/2}}, \quad \eta^{\text{sc}} = \omega^{1/2} \eta, \quad E_n^{\text{sc}} = \frac{1}{\omega} E_n^* = \frac{E_n}{\omega} + \frac{\delta_0^2}{2\omega^3}$

La SE corresponde a un OAC con $\omega = 1$ cuyo mínimo ocurre en $v = \xi^{\text{sc}}$. Luego,

$$E_n^* = E_n^*(\omega, \eta) \rightarrow E_n^{\text{sc}} = E_n^*(1, \eta^{\text{sc}})$$

Realizando la transformación inversa $v = \omega^{1/2}x$, se tiene: $E_n^*(\omega, \eta) = \omega E_n^*(1, \omega^{1/2}\eta)$

Los ansätze preservan las propiedades de la SE bajo transformaciones de escala, $E_n^{\text{ansatz}}(\omega, \eta) = \omega E_n^{\text{ansatz}}(1, \omega^{1/2}\eta)$

Confinamiento en la región clásica

Los puntos de retorno clásicos x_r son aquellos donde $E_{\text{cl}}(x_r) = 0$.

Región clásicamente permitida para la existencia de la partícula: $[-x_r, x_r]$

Para el oscilador armónico se tiene $x_r = \omega^{-1/2}$.

Si $\eta = x_r$ (el sistema oscila entre los puntos de retorno),

$$E_n^{\text{num}}(\omega, \eta) = \omega E_n^{\text{num}}(1, \omega^{1/2}\eta) = \omega E_n^{\text{num}}(1, 1)$$

$$E_n^{\text{ansatz}}(\omega, \eta) = \omega E_n^{\text{ansatz}}(1, \omega^{1/2}\eta) = \omega E_n^{\text{ansatz}}(1, 1)$$

y se tiene,

$$\epsilon_n(\omega, \eta) = \frac{E_n^{\text{ansatz}}(\omega, \eta) - E_n^{\text{num}}(\omega, \eta)}{E_n^{\text{num}}(\omega, \eta)} 100 = \epsilon_n(1, 1)$$

AUTOENERGÍAS		
n	$E_n^{\text{ansatz}}(1, 1)$	$\epsilon_n(1, 1)$
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

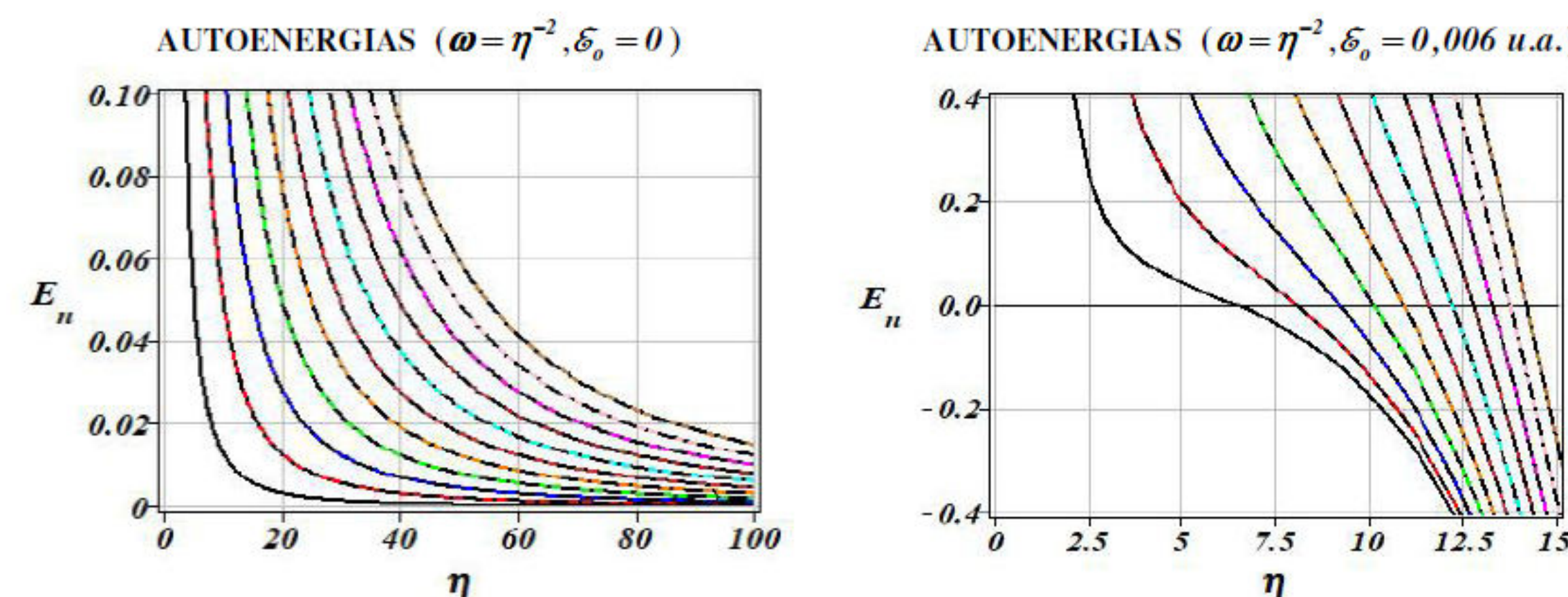
Las autoenergías aproximadas cuando $\eta = x_r$ son dadas por

$$E_n^{\text{aprox}}(\omega, \eta, \delta_0) = \omega E_n^{\text{ansatz}}(1, 1) - \frac{\delta_0^2}{2\omega^2}$$

Si $\eta = x_r$ y $\omega = \eta^{-2}$

$$E_n^{\text{ansatz}}(\omega, \eta) = \omega E_n^{\text{ansatz}}(1, 1)$$

$$\epsilon_n(\omega, \eta) = \epsilon_n(1, 1)$$

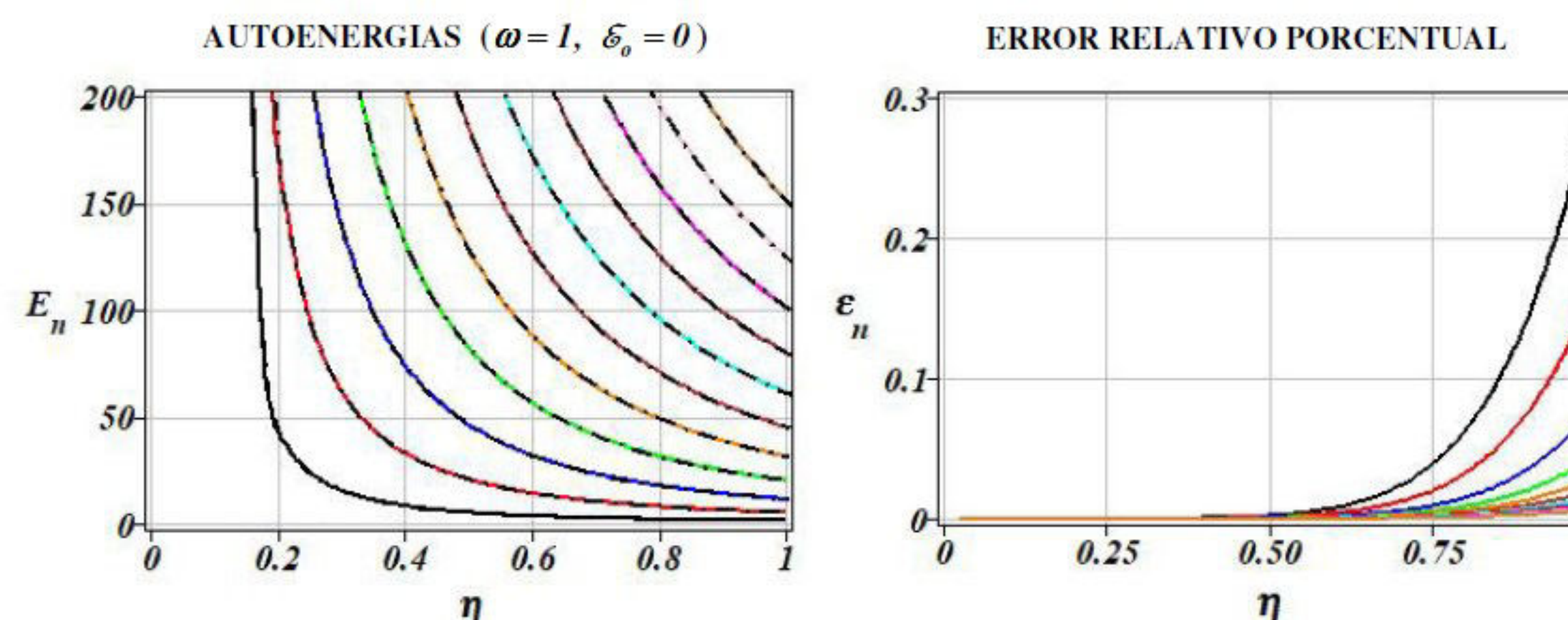


Las autoenergías aproximadas cuando $\eta \leq x_r$ son dadas por

$$E_n^{\text{aprox}}(\omega, \eta, \delta_0) = \omega E_n^{\text{ansatz}}(1, \beta) - \frac{\delta_0^2}{2\omega^2}, \quad \text{con: } \beta = \omega^{1/2}\eta \leq 1$$

y se encuentra que,

$$\epsilon_n(\omega, \eta) \leq \epsilon_n(1, 1)$$



CONCLUSIÓN

En esta comunicación utilizamos los avances alcanzados en el estudio de SCC en potenciales simétricos convexos.

El hecho que el citado procedimiento, libre de parámetros de ajuste, incorpora la simetría del potencial interviniente y preserva propiedades de transformaciones 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.