

Partícula confinada en una cavidad esferoidal prolata. Algunos efectos de la pérdida de simetría esférica.

A. Castellanos Moreno y A. Castellanos Jaramillo
Departamento de Física, Universidad de Sonora,
Apartado Postal 1626, Hermosillo Sonora, 83000, México.
e-mail: acastell@correo.fisica.uson.mx

Recibido el 30 de septiembre de 2011; aceptado el 13 de diciembre de 2011

Se estudia el problema de una partícula confinada en una caja esferoidal prolata. Usando software Mathematica se grafican las funciones esferoidales que aparecen en seis estados físicos. Se calculan los niveles de energías que se encuentran por debajo de 8.5 rydbergs cuando el inverso de la excentricidad es $\xi_0 = 3$ y $\xi_0 = 30$. Se compara con el espectro de energía de partícula confinada en una esfera del mismo volumen y se encuentra que cada nivel de este sistema se desdobra en $l + 1$ niveles cuando se pasa de simetría esférica a simetría prolata. Se estudian los elementos de matriz para interacción dipolar y se obtiene que la luz emitida o absorbida está circularmente polarizada. Se calcula el momento dipolar eléctrico del estado base y de tres estados excitados. Se calculan los coeficientes A_{ij} de Einstein para seis transiciones permitidas. La sencillez del trabajo de cómputo nos permite sugerir que este material es didácticamente útil para comprender qué sucede en un sistema cuántico cuando se modifica su simetría. Se sugieren actividades que podría realizar un estudiante de licenciatura.

Descriptores: Métodos de enseñanza; técnicas computacionales; puntos cuánticos; funciones esferoidales.

The problem being studied is that of a particle moving unimpeded that is confined within a spheroidal box. Using the software Mathematica the spheroidal functions are plotted for six physical states. The energy levels below 8.5 rydbergs are calculated when the inverse of the excentricity ξ_0 is taken to be $\xi_0 = 3$ and $\xi_0 = 30$. A comparison is drawn between the energy spectrum of a particle confined within a spherical box of the same volume, and it is found that every level of this system is split in $l + 1$ levels when its spherical symmetry is shifted to a prolate symmetry. The matrix elements for dipolar interaction are studied and it is shown that the light that is either emitted or absorbed is circularly polarized. The electric dipole moment is calculated for the ground state and for three further excited states. Einstein's A_{ij} coefficients are calculated for six allowed transitions. The simplicity of the computer work being done allows us to suggest that this material is didactically useful to understand key aspects of what happens within a quantum system in the event that its symmetry is modified. Activities are suggested that could be performed by undergraduate students.

Keywords: Teaching methods; computational techniques; quantum dots; spheroidal functions.

PACS: 01.40.gb; 02.70.-c; 73.22.Dj; 78.67.De

1. Introducción

En este trabajo se realiza un estudio didáctico de una partícula que se mueve sin ningún impedimento en el interior de una caja esferoidal prolata de paredes impenetrables. Usando comandos para el cálculo numérico contenidos en el software Mathematica, mostramos que la exploración de este sistema físico es de excelente contenido para la enseñanza de la mecánica cuántica porque permite discutir varios de los efectos físicos de la pérdida de simetría esférica. Es posible calcular los valores que se deseen del espectro de energía, graficar los estados estacionarios correspondientes y evaluar el momento dipolar eléctrico de cada uno de ellos. También es factible estudiar las reglas de selección y calcular el coeficiente A de Einstein en cada una de las transiciones permitidas. La sencillez del cálculo facilita la exploración de la conducta del espectro de energía cuando la cavidad de la caja esferoidal prolata tiende a la forma esférica, de modo que, visto a la inversa, se puede apreciar que cada nivel energético de partícula confinada en caja esférica se desdobra en varios niveles de energía al pasar a la forma esferoidal prolata. Esto sucede a razón de un nuevo nivel por cada valor distinto del valor absoluto del número cuántico magnético.

Los cálculos realizados están basados en algoritmos confeccionados para el estudio de las funciones esferoidales prolatas. A nivel de investigación, este problema fue previamente analizado en 1999 [1] y en el año 2004 [2]. Ambos grupos de trabajo realizaron distintos enfoques para obtener, formalmente, las eigenfunciones exactas, pero la dificultad de cómputo los llevó a seleccionar los niveles más bajos de energía para su estudio. En particular, Anjana Bagga y colaboradores escriben en forma explícita la expresión para la energía, que está dada en términos del cuadrado de las raíces de la función de onda, sin embargo, la dificultad para calcular éstas les impide ir más allá de los primeros tres eigenvalores de la energía. En ambas referencias se encuentran explícitamente las soluciones en términos de series infinitas de funciones de Bessel y de series infinitas de polinomios asociados de Legendre, pero ante la dificultad de calcular los coeficientes correspondientes, no grafican los orbitales. El mismo problema, pero para paredes penetrables, fue abordado por Anjana Bagga et. al. utilizando el método variacional en el año 2005 [3].

Tratamos de mostrar que el estudio de la partícula confinada en una cavidad esferoidal prolata puede ser abordado por parte de estudiantes de licenciatura en física a niveles que

pueden ir más allá de la escritura formal de las funciones de onda y del espectro de energía. Ayuda a superar el desconocimiento de la teoría de funciones esféricas en los cursos de licenciatura y de maestría en ciencias físicas. El estudio de éstas es posible si se aprovecha la excelente revisión publicada en 2002 por N. Aquino, E. Castaño y E. Ley-Koo [4], quienes presentan una amplia revisión de las funciones esféricas (prolata y oblatas), desarrollando un tratamiento matricial para la solución del problema. Además, en opinión de ellos, ese enfoque es más adecuado porque, en el proceso de diagonalización, se obtienen simultáneamente los eigenvalores y los eigenvectores.

Existe además el trabajo de Peter E. Falloon [5], quien presentó en 2001 una tesis de maestría en ciencias en la que compila muchas de las propiedades de las funciones esféricas y desarrolla un paquete para ser usado en el sistema de software Mathematica. Él las llama: armónicos esféricos y logra su evaluación para parámetros contenidos en el campo de los números complejos. Bautizó al paquete como “SpheroidalHarmonics”, pero nosotros hemos encontrado que, a partir de la versión 6.0 de Mathematica, existen comandos con los cuales el cálculo es directo y sin necesidad de pasos previos.

En síntesis, el uso generalizado de software amigable para el cálculo simbólico y el numérico, ha permitido el desarrollo de algoritmos que permiten calcular tanto las raíces de la función de onda como varios de los coeficientes de las series que aparecen en ella. En consecuencia, es didácticamente apropiado explorar sistemas físicos concretos en donde se utilice este desarrollo tecnológico para reforzar el aprendizaje de la física. Pensamos que la partícula en movimiento en el interior de una caja esférica prolata de paredes impenetrables es uno de los sistemas que cumplen con ese papel, especialmente porque tiene simetrías distintas a las de los movimientos en un campo central, que son los más utilizados en los cursos de mecánica cuántica.

Este trabajo se organiza como sigue:

En la segunda sección se presenta el sistema físico, las ecuaciones que lo describen, y por razones didácticas, se hace énfasis especial en el cambio a unidades atómicas sin usar la regla nemotécnica cotidiana ($e = 1$, $m_e = 1$ y $\hbar = 1$); en la tercera sección se discute la integral de movimiento asociada a la simetría esférica prolata y se hace ver que se reduce al momento angular al cuadrado en el límite apropiado; en la cuarta sección se presenta la separación de variables y las tres ecuaciones diferenciales ordinarias resultantes, se escriben las soluciones, que están dadas en términos de funciones esféricas, se explica cómo usar el software Mathematica para graficarlas y obtener expresiones en series de ellas, también una expresión para el eigenvalor asociado a la integral de movimiento, y en especial, se explica cómo calcular valores numéricos del espectro de energía. Se presenta, además, una tabla con las diferencias de energía de seis transiciones electrónicas. En la quinta sección se calculan los elementos de matriz y algunos momentos dipolares eléctricos, se demuestra que las ondas electromagnéticas emitidas

o absorbidas están circularmente polarizadas y se muestra con ejemplos cómo influyen las propiedades de las funciones de onda en las reglas de selección. En la sexta sección se calculan algunos coeficientes A de Einstein. La séptima sección está dedicada a comparar el espectro de energía de una partícula confinada en una cavidad esférica prolata con una del mismo volumen pero esférica. Por último, en la octava sección se presentan algunas sugerencias didácticas.

2. Sistema físico y ecuaciones que lo describen

2.1. Sistema físico en unidades atómicas

Consideramos una partícula de masa m_e que se mueve en un potencial $V(\vec{r}) = 0$, en una cavidad esférica de forma prolata cuya superficie denotamos como S . La ecuación de Schrödinger que describe al sistema es

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \text{ tal que } \psi(\vec{s}) = 0, \quad (1)$$

donde $\vec{s}$ es elemento de la frontera S de la caja confinante y E es la energía.

Para pasar del sistema internacional a unidades atómicas cambiamos primero la escala para medir las coordenadas en que se representa el vector $\vec{r}$, sea: $z_i = \chi x_i$, con $i = 1, 2, 3$. De aquí resulta que el laplaciano cambia como sigue: $\nabla^2 = \chi^{-2}\nabla'^2$, con ∇' el gradiente con respecto a las coordenadas escaladas. Si denotamos el radio de Bohr como a_0 y hacemos $\chi = 1/(a_0)$, resulta que $\vec{r}'$ contiene variables espaciales adimensionales que contabilizan las distancias en términos del radio de Bohr. Enseguida un cálculo directo lleva a

$$\nabla'^2\psi(\vec{r}') + a_0^2\frac{2m_eE}{\hbar^2}\psi(\vec{r}') = 0, \quad (2)$$

tal que si se define

$$E_H = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2},$$

tenemos la energía adimensional $\epsilon = E/E_H$ medida en rydbergs, en cambio, si no se incluye el factor $1/2$ en la definición de E_H , quedará medida en hartrees. La ecuación ahora se escribe como

$$\nabla'^2\psi(\vec{r}') + \epsilon\psi(\vec{r}') = 0. \quad (3)$$

La simetría del sistema sugiere utilizar las coordenadas esféricas prolata, que están definidas como sigue en términos de las coordenadas cartesianas [6]:

$$\begin{aligned} x &= a \sinh(u) \sin(v) \cos(\phi), \\ y &= a \sinh(u) \sin(v) \sin(\phi), \\ z &= a \cosh(u) \cos(v), \end{aligned} \quad (4)$$

donde a es la distancia del centro del esferoide prolato a cualquiera de sus focos, $0 \leq u < \infty$, $0 \leq v \leq \pi$, y $0 \leq \phi \leq 2\pi$. Introduciendo los cambios de variables

$$\xi = \cosh(u), \quad \eta = \cos(v), \quad (5)$$

las expresiones de transformación se reescriben como

$$\begin{aligned}x &= a\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \cos(\phi), \\y &= a\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \sin(\phi), \\z &= a\xi\eta,\end{aligned}\quad (6)$$

donde $1 \leq \xi < \infty$ y $-1 \leq \eta \leq 1$. El elemento de volumen es

$$dV = a^3 (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta d\phi.$$

Una revisión didáctica de las coordenadas esferoidales prolatas y oblatas se encuentra en un apéndice de la siguiente Ref. 7.

Si z_0 es el semieje mayor del esferoide y R_0 es el semieje menor del mismo, podemos definir la fracción $n = z_0/R_0$ para obtener una imagen rápida del grado de deformación del esferoide con respecto a una esfera concéntrica de radio R_0 . Un cálculo directo permite encontrar que

$$R_0 = \sqrt{x^2 + y^2} = a\sqrt{\xi_0^2 - 1},$$

de modo que resulta $n = \xi_0/(\sqrt{\xi_0^2 - 1})$. Por ejemplo, los casos calculados para este trabajo ($\xi_0 = 3$ y $\xi_0 = 30$) corresponden a esferoides en los que el semieje mayor es más largo que el semieje menor en porcentajes dados por 6.07 % y 0.06 %, respectivamente. La deformación que se logra con el parámetro ξ_0 es más pequeña cuando su valor es $\xi_0 = 30$, por esa razón encontraremos que las partículas confinadas en un esferoide prolato con esa excentricidad ya presentan una conducta muy similar a las contenidas en cavidades esféricas.

En coordenadas esferoidales prolatas, el potencial se escribe como sigue

$$V(\xi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \xi < \xi_0 \\ \infty & \text{si } \xi \geq \xi_0 \end{cases}, \quad (7)$$

de modo que el operador hamiltoniano del sistema bajo estudio tiene la forma siguiente

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\nabla^2 \\ &= -\frac{1}{a^2(\xi^2 - \eta^2)} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \left[(\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[(1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] \right\} - \frac{1}{a^2(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (8)\end{aligned}$$

3. Una integral del movimiento

En esta sección no utilizaremos las unidades atómicas debido a que solamente hablaremos de una integral de movimiento que es útil para identificar una de las constantes de separación que encontraremos en la siguiente sección de este trabajo.

H.A. Erikson y E.L. Hill [8], discuten en 1949 la existencia de una integral del movimiento para realizar la clasificación de estados de un electrón en moléculas diatómicas, cuyos núcleos están situados en los focos del elipsoide, con

cargas eléctricas respectivas Z_1e y Z_2e , donde e es la carga elemental.

Claramente, el caso de partícula confinada en una caja esferoidal prolata comparte la misma simetría, pues basta hacer $Z_1 = Z_2 = 0$ para disponer de un conjunto similar de operadores que conmutan con el hamiltoniano.

Veintitres años después de este trabajo, K. Helfrich [9] aborda el problema más general de las constantes de movimiento con potenciales que en coordenadas esferoidales prolatas tienen la forma separable que sigue:

$$V(\xi, \eta) = \frac{V_1(\xi) + V_2(\eta)}{\xi^2 - \eta^2} \quad (9)$$

y demuestra que, para el caso de la mecánica clásica no relativista, la ecuación de Hamilton-Jacobi es separable, de modo que aparece una constante de separación dada como sigue

$$\beta = -L^2 + a^2(p_x^2 + p_y^2) + \beta_{\text{pot}} \quad (10)$$

donde L^2 es el cuadrado del momento angular medido desde el origen de coordenadas y

$$\beta_{\text{pot}} = \frac{2m_e a^2}{\xi^2 - \eta^2} [(1 - \eta^2) V_1(\xi) - (1 - \xi^2) V_2(\eta)] \quad (11)$$

es llamado por el autor la parte potencial de β .

Helfrich demuestra que para el caso de la mecánica cuántica la constante de separación anterior es el eigenvalor del siguiente operador

$$\hat{A}' = -\hat{L}^2 - \hbar^2 a^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \beta_{\text{pot}}, \quad (12)$$

tal que para el caso especial de dos centros con potencial coulombiano se reduce a la forma

$$\begin{aligned}\hat{A}' &= -\hat{L}^2 + a^2(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) \\ &\quad - 2m_e e^2 a (Z_1 \cos \theta_1 - Z_2 \cos \theta_2). \quad (13)\end{aligned}$$

Según Helfrich, la constante de movimiento mecanocuántica es una suma de un operador dependiente solamente del sistema de coordenadas, que posee un significado físico simple y de un segundo operador ligado unívocamente con la forma del potencial separable seleccionado. Salvo algunas constantes multiplicativas evidentes, este trabajo de Helfrich recupera así el operador que Erikson y Hill escriben como sigue:

$$\begin{aligned}\hat{\Omega} &= \frac{1}{\hbar^2} \hat{L}^2 + a^2 \left(\nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \\ &\quad + \gamma (Z_1 \cos \theta_1 - Z_2 \cos \theta_2). \quad (14)\end{aligned}$$

El cuadro descriptivo queda entonces como sigue: los operadores

$$\hat{H}, \quad \hat{\Omega}, \quad \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (15)$$

conmutan entre si, formando un conjunto de operadores cuyos números cuánticos definen los estados estacionarios del sistema.

Además, es importante notar que la pérdida de simetría esférica puede ser controlada por medio del escalar a .

4. Separación de variables

Para separar variables se propone la siguiente forma de la ecuación de onda

$$\psi(\xi, \eta, \phi) = R(\xi) S(\eta) \Phi(\phi). \quad (16)$$

Aunque ξ no es precisamente una coordenada radial, tomaremos el lenguaje de Anjana Bagga para llamar a $R(\xi)$ la parte radial de la función de onda, particularmente porque los nodos de ésta juegan un papel similar al de las funciones de Bessel en la obtención del espectro de energía. Asimismo, llamaremos a $S(\eta)$ la parte angular de la solución aunque, claramente, se debe agregar el factor $\Phi(\phi)$ para incluir la conducta en la coordenada ϕ .

Las ecuaciones resultantes son

$$\frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} + m^2 \Phi(\phi) = 0, \quad (17)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left[(1-\eta^2) \frac{dS(\eta)}{d\eta} \right] + \left[A - c^2 \eta^2 - \frac{m^2}{1-\eta^2} \right] S(\eta) = 0, \quad (18)$$

y

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\xi} \left[(\xi^2 - 1) \frac{dR(\xi)}{d\xi} \right] \\ & - \left[A - c^2 \xi^2 + \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] R(\xi) = 0, \end{aligned} \quad (19)$$

con m y A constantes de separación, en tanto que

$$c^2 = a^2 \epsilon. \quad (20)$$

La solución a (17) es directa

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \quad (21)$$

Con la condición de que $\Phi(\phi)$ sea univaluada, resulta que m es elemento de los números enteros. Las Ecs. (18) y (19) coinciden en su forma matemática, pero los intervalos en que están contenidas las variables η y ξ lleva a que las soluciones sean muy diferentes. La constante m es el número cuántico magnético, idéntico al del movimiento en un campo central porque comparte con éste la simetría axial, de modo que la Ec. (17) se puede interpretar como la ecuación de eigenvalores

$$\hat{L}_z^2 \Phi(\phi) = m^2 \hbar^2 \Phi(\phi). \quad (22)$$

4.1. Parte angular

Haciendo $A = \lambda_{l,m}(c)$ en la ecuación para $S_{l,m}(c, \eta)$, la reescribimos como sigue:

$$\begin{aligned} & (1-\eta^2) \frac{d^2 S_{l,m}(c, \eta)}{d\eta^2} - 2 \frac{dS_{l,m}(c, \eta)}{d\eta} \\ & + \left[\lambda_{l,m}(c) - c^2 \eta^2 - \frac{m^2}{1-\eta^2} \right] S_{l,m}(c, \eta) = 0. \end{aligned} \quad (23)$$

Ésta se reduce a la ecuación asociada de Legendre cuando $c \rightarrow 0$, de modo que se cumple la relación:

$$S_{l,m}(c=0, \eta) = N_{l,m} P_l^m(\eta), \quad (24)$$

con $l = 0, 1, 2, \dots$

La ecuación asociada de Legendre es invariante ante transformaciones del tipo $x \rightarrow -x$, lo cual se traduce en que las funciones que satisfacen esa ecuación tienen paridad bien definida, como puede verse para el caso de los polinomios asociados de Legendre a partir de la fórmula de Rodríguez correspondiente:

$$P_l^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m P_l(x)}{dx^m}.$$

En efecto, es directo demostrar que

$$P_l^m(-x) = (-1)^{m+l} P_l^m(x).$$

La paridad de $P_l^m(x)$ está dada por la suma $m+l$, y cuando m está fija, queda determinada por l .

En el caso de las funciones esferoidales prolatas, la ecuación angular también es invariante al transformar $\eta \rightarrow -\eta$, de modo que $S_{l,m}(c, \eta)$ debe tener paridad bien definida. A partir de la Ec. (20) está claro que el alejamiento de la simetría esférica está controlada por el parámetro c , en consecuencia, una propuesta para representarlas como combinaciones lineales de polinomios asociados de Legendre puede ser

$$S_{l,m}(c, \eta) = \sum_{k=0}^{\infty} d_k(c) N_{k,m} P_k^m(\eta),$$

tal que la pérdida de simetría esférica queda contenida en los coeficientes $d_k(c)$. Esta expresión presenta el defecto de que la mezcla de paridades distintas de $P_k^m(\eta)$ no debe permitirse. En consecuencia, en la literatura sobre este tema [2] se ha propuesto una combinación lineal como la siguiente

$$S_{l,m}(c, \eta) = \sum_{r=0 \text{ ó } 1}^{\infty} d_r(c) N_{m+r,m} P_{m+r}^m(\eta). \quad (25)$$

Si fijamos m , cuando la suma inicia desde $r = 0$, se consideran únicamente valores pares del índice r . En cambio, para ese mismo valor de m , la suma que inicia desde $r = 1$ considera únicamente valores impares, evitando así la mezcla mencionada previamente.

Sustituyendo (25) en (23) se obtiene la relación de recurrencia para los coeficientes $d_r(c)$, pero debido a que contiene los eigenvalores $\lambda_{l,m}(c)$, primero es necesario calcular estos antes de utilizarla. Gran parte del esfuerzo de los investigadores se ha invertido en calcular $\lambda_{l,m}(c)$ para obtener los coeficientes $\{d_r(c)\}$ (Ver [5] y referencias contenidas allí). Este cálculo se facilita en la actualidad porque el enfoque de Falloon ya está incluido en el software Mathematica, de modo que, a partir de su versión 6.0, es posible calcular los eigenvalores, graficar la solución, obtener una aproximación en serie de Taylor, etcétera.

Por ejemplo, para obtener $\lambda_{l,m}(c)$ en potencias de c^2 , hasta tercer orden, se usa la expresión:

$$\text{Series}[\text{Spheroidal Ei genvalue}[l, m, c], \{c, 0, 3\}] \quad (26)$$

y produce

$$\lambda_{l,m}(c) = l(l+1) - \frac{2(l^2 + m^2 + l - 1)}{4l^2 + 4l - 3}c^2 + \dots \quad (27)$$

El cálculo de la constante c será explicado en la próxima sección.

El comando que llama la función esferoidal $S_{l,m}(c, \eta)$ es

$$\text{SpheroidalPS}[l, m, c, x], \quad (28)$$

pero para cualquier operación es necesario conocer la terna $\{l, m, c\}$. Un desarrollo en serie Taylor a orden p se puede obtener para m dado si se escribe

$$\text{Series}[\text{SpheroidalPS}[l, m, c, x], \{x, 0, p\}] \quad (29)$$

En el caso particular de $m = 0$, se puede obtener un desarrollo en serie de la función esferoidal $S_{l,0}(c, \eta)$. El comando a utilizar es:

$$\text{Series}[\text{SpheroidalPS}[l, 0, c, \eta], \{c, 0, 3\}] \quad (30)$$

y resulta

$$S_{l,0}(c, \eta) = P_l(\eta) + \left[-\frac{l(l-1)}{2(2l+1)(2l-1)^2} P_{l-2}(\eta) + \frac{(l+1)(l+2)}{2(2l+1)(2l+3)} P_{l+2}(\eta) \right] c^2 + O(c^4). \quad (31)$$

Para $m \neq 0$, se obtienen expresiones más complicadas, en términos de funciones asociadas de Legendre de primera clase y de tipo 2.

Cuando se especifican valores numéricos de la terna $\{l, m, c\}$, se puede obtener la gráfica de la función de onda, sin normalizar, utilizando la siguiente orden:

$$\text{Plot}[\text{SpheroidalPS}[l, m, c, x], \{x, -1, 1\}]. \quad (32)$$

Algunas funciones $S_{l,m}(c, \eta)$ se presentan más adelante porque contribuyen a determinar las reglas de selección para conocer las transiciones permitidas entre niveles de energía.

4.2. Parte radial y espectro de energía

El cálculo de la función radial se basa en la expresión que sigue (ver [10]):

$$R_{l,m}(c, \xi) = \int_{-1}^1 e^{ic\eta\xi} \times (\xi^2 - 1)^{\frac{m}{2}} (1 - \eta^2)^{\frac{m}{2}} S_{l,m}(c, \eta) d\eta. \quad (33)$$

A partir de ésta se demuestra que $R_{l,m}(c, \xi)$ se puede representar mediante un desarrollo en serie de las funciones esféricas de Bessel $j_l(c\xi)$:

$$R_{l,m}(c, \xi) = 2(\xi^2 - 1) \times \sum_{r=0 \text{ ó } 1}^{\infty} d_r(c) i^{l+|m|} \frac{(l+|m|)!}{l+|m|!} \frac{j_l(c\xi)}{(c\xi)^{|m|}}, \quad (34)$$

con $l = m + r$.

La forma anterior de $R_{l,m}(c, \xi)$ es consecuencia, además, de la siguiente propiedad demostrada por Fallow [5]:

$$R_{l,m}(c, \xi) = R_{l,-m}(c, \xi),$$

que está relacionada con la simetría del sistema físico respecto al plano $\eta = 0$.

La condición de frontera $\psi(\vec{s}) = 0$ planteada en (1) se escribe en coordenadas esféricas prolatas en la forma que sigue

$$R_{l,m}(c, \xi_0) = 0. \quad (35)$$

La imposición de esta condición de frontera implica que la partícula queda confinada en una región del espacio, de modo que proporciona también la condición de cuantización de la energía. Si $c_{l,m}$ es un cero de la función esferoidal $R_{l,m}(c, \xi)$, la ecuación (35) lleva a la siguiente expresión para la energía medida en rydbergs:

$$\epsilon = \frac{c_{l,m}^2}{a^2}. \quad (36)$$

Así, el cálculo del espectro de energías resulta muy similar al de la partícula confinada en una caja esférica. En esencia el problema es simple, el único problema al que se han enfrentado los investigadores es de manejo y disponibilidad del software adecuado [1,2].

El número cuántico principal, asociado a la energía, está implícito en el valor de c , que resulta de la raíz que se selecciona de la función $R_{l,m}(c, \xi)$. El número cuántico l coincide con el utilizado en el problema de campo central, pero ya no está ligado a una integral del movimiento, porque ante la pérdida de simetría esférica, ocupa ese lugar el eigenvalor $\lambda_{l,m}(c)$ dado en (27).

El procedimiento para obtener la raíz se presenta a continuación:

1. El siguiente comando llama la subrutina que calcula la función $R_{l,m}(c, \eta)$:

$$\text{SpheroidalS1}[l, m, c, \xi_0] \quad (37)$$

2. Para conocer los nodos de esta función se utiliza un comando donde la variable es el parámetro c . Así es posible identificar el intervalo dónde se encuentran:

$$\text{Plot}[\text{SpheroidalS1}[l, m, c, \xi_0], \{c, 0, 3\}, \quad (38)$$

$$\text{MaxRecursion} - > 1, \text{PlotPoints} - > 20].$$

Se obtiene una curva como la de la Fig. 1. El primer nodo ayuda a determinar el estado $(l, m, n = 1)$, el segundo nodo determina el estado $(l, m, n = 2)$ y así sucesivamente.

- La Fig. 1 permite seleccionar el intervalo (x_1, x_2) , que contiene la raíz de nuestro interés. Ésta se encuentra por medio del comando que sigue:

$$\text{FindRoot}[SpheroidalS1[l, m, c, x], \{c, x_1, x_2\}, \\ \text{WorkingPrecision} \rightarrow 5] \quad (39)$$

- Con (l, m, c) determinados, es posible graficar la parte radial mediante el comando siguiente:

$$\text{Plot}[SpheroidalS1[l, m, c, x], \{x, 1, x_0\}] \quad (40)$$

Nosotros hemos utilizado el procedimiento anterior de manera intensiva para una cavidad esferoidal cuyo inverso de la excentricidad es $\xi_0 = 3$ y hemos calculado el espectro de energía hasta un valor de ϵ ligeramente superior a 8.437 rydbergs. En el Apéndice 1 se presenta el espectro de energía hasta la primera raíz del estado $(l = 7, |m| = 7)$. Algunos de los resultados más bajos se presentan a continuación, prestando atención a las diferencias entre varias de las transiciones permitidas (con $\epsilon_i > \epsilon_f$) y su conversión a electronvolts.

En la tabla siguiente las letras primadas se refieren al estado inicial y las que no tienen prima al estado final.

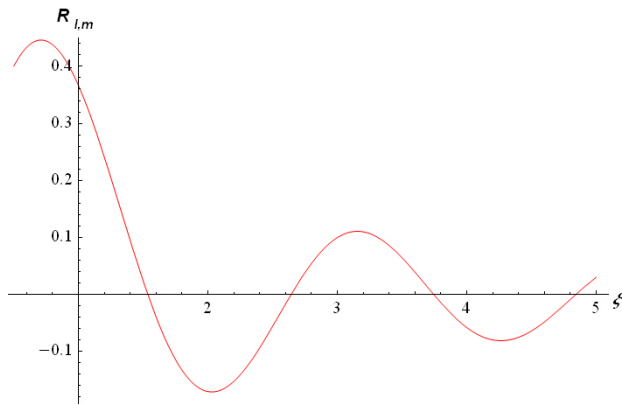


FIGURA 1. Gráfica respecto a c . Permite conocer el intervalo de búsqueda de la raíz c , que cumple con la condición de frontera.

TABLA I. Energía de fotones emitidos en las transiciones más bajas para $\xi_0 = 3$

Estados físicos (l', m', c') (l, m, c)	$\Delta = \epsilon_i - \epsilon_f$	$E_i - E_f$ (eV)
(1,1,1.57080) (0,0,1.08984)	8.69992	17.4089
(2,1,1.98850) (1,0,1.53464)	10.9099	21.8312
(2,2,2.02143) (1,1,1.57080)	11.0051	22.0217
(3,1,2.40224) (2,0,1.97114)	12.8139	25.6411
(3,2,2.42406) (2,1,1.98850)	13.071	26.1555
(3,3,2.45515) (2,2,2.02143)	13.2042	26.4222

Todas las frecuencias de emisión se ubican en la radiación ultravioleta.

Cabe adelantar que entre 0 y 8.437 rydbergs, el sistema físico de partícula confinada en una caja esferoidal prolata tiene más niveles de energía que el de una partícula confinada en una caja esférica. Este tema se discute más adelante.

5. Momento dipolar eléctrico y reglas de selección

5.1. Reglas de selección

En esta sección estudiamos los elementos de matriz de la forma $\langle \psi | \vec{r} | \chi \rangle$ y también calculamos el momento dipolar eléctrico de un estado físico $|\chi\rangle$, prestando atención a los niveles de energía más bajos del sistema bajo consideración. A diferencia del estado base de la partícula confinada en una caja esférica, el estado base de la partícula confinada en un esferoide prolato sí presenta un momento dipolar diferente de cero. Esto es de esperarse debido a la ruptura de la simetría esférica que resulta de la forma de la caja confinante. La única novedad es que el uso de software moderno permite a un estudiante de licenciatura en física comprobar rápidamente lo anterior. Todas las integrales pueden ser evaluadas numéricamente mediante el comando "NIntegrate" del software Mathematica; o bien, cuando este procedimiento es demasiado lento, conviene evaluar los integrandos en puntos específicos para formar una lista de datos y enseguida combinar las órdenes siguientes:

$$f = \text{Interpolation}[\text{datos}] \text{NIntegrate}[f[t], \{t, 1, 3\}]$$

Denotamos como $|\psi\rangle$ y $|\chi\rangle$ a los estados inicial y final respectivamente, el objetivo es calcular la expresión para el momento de transición dipolar

$$\mu_{if} = e^2 |\langle \psi | \vec{r} | \chi \rangle|^2 \quad (41)$$

y enseguida particularizar para el caso del dipolo eléctrico de un estado: $\langle \psi | \vec{r} | \psi \rangle$.

Si trabajamos en el espacio de configuración, el operador del vector de posición es:

$$\vec{r} = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k} \\ \vec{r} = a \left\{ \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \cos(\phi) \hat{i} \right. \\ \left. + \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \sin(\phi) \hat{j} + a\xi\eta\hat{k} \right\}. \quad (42)$$

Introduciendo la notación de los números complejos y desarrollando un cálculo análogo al de los libros de texto resulta:

$$\vec{r} = a \left\{ \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \right. \\ \left. \times [e^{i\phi}\epsilon_- + e^{-i\phi}\epsilon_+] + a\xi\eta\hat{k} \right\}, \quad (43)$$

donde $\varepsilon_{\pm} = (1/2) (\hat{i} \pm \hat{j})$ son los vectores de polarización circular derecha (ε_+) e izquierda (ε_-).

Denotamos las funciones de onda como

$$\begin{aligned} \chi_{l,m,n}(\xi, \eta, \phi) &= N_{l,m}(c) R_{l,m}(c, \xi) S_{l,m}(c, \eta) \Phi_m(\phi) \\ \psi_{l',m',n'}(\xi, \eta, \phi) &= N_{l',m'}(c') \\ &\times R_{l',m'}(\xi) S_{l',m'}(c', \eta) \Phi_{m'}(\phi). \end{aligned} \quad (44)$$

El cálculo del elemento de transición produce la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \vec{r} | \chi \rangle &= a N_{l,m}(c) N_{l',m'}(c') \\ &\times (I_- \varepsilon_- + I_+ \varepsilon_+ + I_z \hat{k}), \end{aligned} \quad (45)$$

donde

$$\begin{aligned} I_{\pm} &= \langle R_{l',m'}(c', \xi) S_{l',m'}(c', \eta) \Phi_{m'}(\phi) \\ &\times \left| \left\{ \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} e^{\mp i\phi} \right\} \right| \\ &R_{l,m}(c, \xi) S_{l,m}(c, \eta) \Phi_m(\phi) \rangle \end{aligned} \quad (46)$$

$$\begin{aligned} I_z &= \langle R_{l',m'}(c', \xi) S_{l',m'}(c', \eta) \Phi_{m'}(\phi) | \xi \eta | \\ &\times R_{l,m}(c, \xi) S_{l,m}(c, \eta) \Phi_m(\phi) \rangle \end{aligned} \quad (47)$$

Desarrollando los cálculos resulta

$$I_- = I_+ = a^3 \delta_{m',m+1} (J_1 J_3 - J_2 J_4), \quad (48)$$

donde

$$\begin{aligned} J_1 &= \int_1^{\xi_0} R_{l',m'}^*(c', \xi) \sqrt{(\xi^2 - 1)} R_{l,m}(c, \xi) \xi^2 d\xi \\ J_2 &= \int_1^{\xi_0} R_{l',m'}^*(c', \xi) \sqrt{(\xi^2 - 1)} R_{l,m}(c, \xi) d\xi \\ J_3 &= \int_{-1}^1 S_{l',m'}^*(c', \eta) \sqrt{(1 - \eta^2)} S_{l,m}(c, \eta) d\eta \\ J_4 &= \int_{-1}^1 S_{l',m'}^*(c', \eta) \sqrt{(1 - \eta^2)} S_{l,m}(c, \eta) \eta^2 d\eta \end{aligned} \quad (49)$$

La componente I_z es

$$I_z = a^3 \delta_{m',m} (J_5 J_7 - J_6 J_8), \quad (50)$$

$$\begin{aligned} J_5 &= \int_1^{\xi_0} R_{l',m'}^*(c', \xi) \xi^3 R_{l,m}(c, \xi) d\xi \\ J_6 &= \int_1^{\xi_0} R_{l',m'}^*(c', \xi) \xi R_{l,m}(c, \xi) d\xi \\ J_7 &= \int_{-1}^1 S_{l',m'}^*(c', \eta) S_{l,m}(c, \eta) \eta d\eta = 0 \\ J_8 &= \int_{-1}^1 S_{l',m'}^*(c', \eta) S_{l,m}(c, \eta) \eta^3 d\eta = 0. \end{aligned} \quad (51)$$

Las integrales angulares J_7 y J_8 se anulan cuando el producto de funciones $S_{l',m'}(c, \eta) S_{l,m}(c, \eta)$ es una función par, si esto sucede resulta $I_z = 0$ y el caso $\Delta m = 0$ no se presenta. Considerando las funciones angulares listadas en la Tabla II, $I_z \neq 0$ ocurre solamente en el caso de las transiciones verticales entre dos renglones contiguos.

En cambio las integrales angulares J_3 y J_4 son diferentes de cero cuando el producto $S_{l',m'}(c, \eta) S_{l,m}(c, \eta)$ es una función par, de modo que $I_{\pm} \neq 0$ cuando en la tabla 2 tenemos transiciones oblicuas entre dos renglones contiguos.

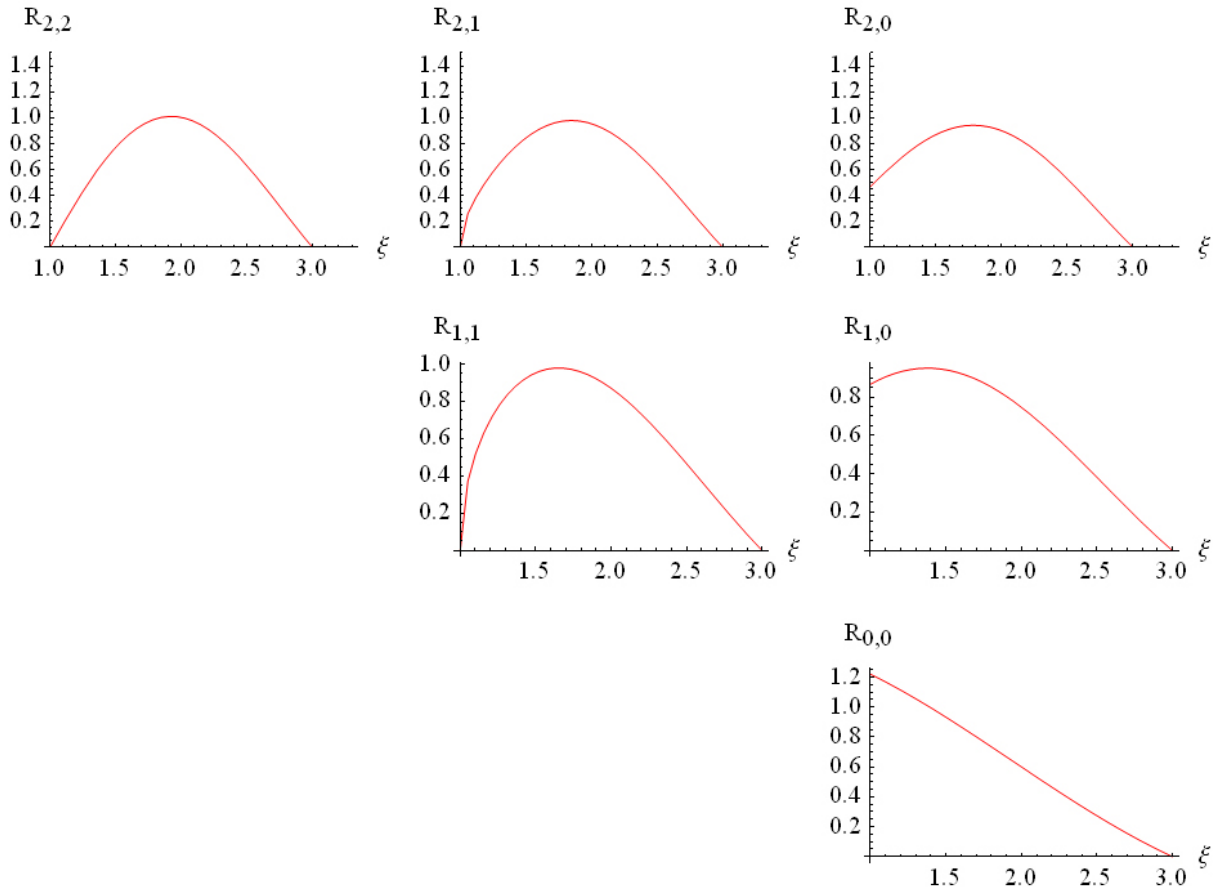
La polarización circular, $\varepsilon_{\pm}$, aparece si $m' = m \mp 1$. En ambos casos se requiere calcular el factor numérico ($J_1 J_3 - J_2 J_4$) con

$$\begin{aligned} J_1 &= \int_1^{\xi_0} R_{l',m'}^*(c', \xi) \sqrt{(\xi^2 - 1)} R_{l,m}(c, \xi) \xi^2 d\xi, \\ J_2 &= \int_1^{\xi_0} R_{l',m'}^*(c', \xi) \sqrt{(\xi^2 - 1)} R_{l,m}(c, \xi) d\xi \\ J_3 &= \int_{-1}^1 S_{l',m'}^*(c', \eta) \sqrt{(1 - \eta^2)} S_{l,m}(c, \eta) d\eta, \\ J_4 &= \int_{-1}^1 S_{l',m'}^*(c', \eta) \sqrt{(1 - \eta^2)} S_{l,m}(c, \eta) \eta^2 d\eta \end{aligned} \quad (52)$$

El cálculo de las integrales anteriores produce los siguientes elementos de matriz permitidos entre los niveles de energía más bajos:

TABLA II. Paridad intercalada de las funciones angulares

$S_{3,3}$ es par	$S_{3,2}$ es impar	$S_{3,1}$ es par	$S_{3,0}$ es impar
	$S_{2,2}$ es par	$S_{2,1}$ es impar	$S_{2,0}$ es par
		$S_{1,1}$ es par	$S_{1,0}$ es impar
			$S_{0,0}$ es par

FIGURA 2. Funciones radiales del estado base $\{l = 0, m = 0\}$, y los estados $\{l = 1; m = 0, 1\}$, $\{l = 2; m = 0, 1, 2\}$ TABLA III. Elementos de la matriz de transición dipolar para $\xi_0 = 3$

Estados físicos $(l', m', c') (l, m, c)$	$\frac{\langle \psi \vec{r} \chi \rangle}{a}$
(1,1,1.57080) (0,0,1.08984)	1.2286
(2,1,1.98850) (1,0,1.53464)	1.1008
(2,2,2.02143) (1,1,1.57080)	1.5482
(3,1,2.40224) (2,0,1.97114)	1.0766
(3,2,2.42406) (2,1,1.98850)	1.4224
(3,3,2.45515) (2,2,2.02143)	1.7343
(1,1,1.57080) (2,0,1.97114)	0.50896
(2,1,1.98850) (3,0,2.39336)	0.70415
(2,2,2.02143) (3,1,2.40224)	0.38275

5.2. Momento dipolar eléctrico

Para obtener el momento dipolar eléctrico calculamos:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \vec{r} | \psi \rangle &= a^4 N_{l,m}^2(c) (J_1 J_3 - J_2 J_4) \\ &\times [\delta_{m',m+1} \varepsilon_- + \delta_{m',m-1} \varepsilon_+] \end{aligned} \quad (53)$$

TABLA IV. Momento dipolar del estado base y los tres primeros estados excitados para $\xi_0 = 3$

Estado físico (l, m, c)	$p_- = p_+$	p_z
$l = 0, m = 0, c = 1.08984$	6.54301	9.17301
$l = 1, m = 0, c = 1.53466$	0.15445	0.18607
$l = 2, m = 0, c = 1.97114$	0.01993	0.01507
$l = 3, m = 0, c = 2.39320$	0.00470	0.00181

donde

$$N_{l,m}^2(c) = \frac{1}{2\pi a^3} \frac{1}{i_1 j_1 - i_2 j_2}, \quad (54)$$

es la constante de normalización y

$$\begin{aligned} i_1 &= \int_1^{\xi_0} R_{l,m}^*(c, \xi) \xi^2 R_{l,m}(c, \xi) d\xi, \\ j_1 &= \int_{-1}^1 S_{l,m}^*(c, \eta) S_{l,m}(c, \eta) d\eta \\ i_2 &= \int_1^{\xi_0} R_{l,m}^*(c, \xi) R_{l,m}(c, \xi) d\xi, \end{aligned} \quad (55)$$

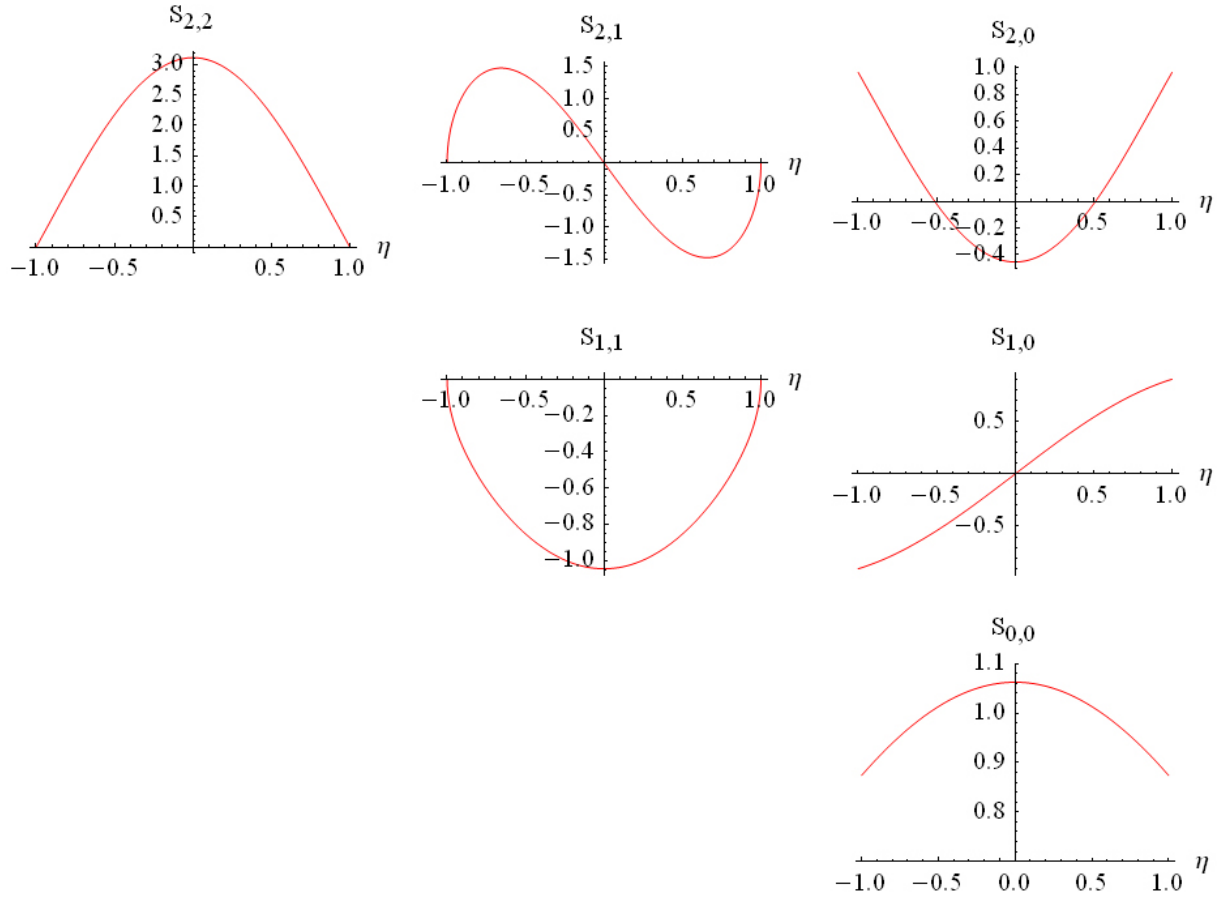


FIGURA 3. Funciones angulares del estado base $\{l = 0, m = 0\}$, y los estados $\{l = 1; m = 0, 1\}$, $\{l = 2; m = 0, 1, 2\}$. La paridad se va intercalando conforme crece m .

$$j_2 = \int_{-1}^1 S_{l,m}^*(c, \eta) \eta^2 S_{l,m}(c, \eta) d\eta \quad (56)$$

El cálculo del momento dipolar del estado base y de los primeros tres estados excitados se presentan en la tabla siguiente:

6. Emisión espontánea. Coeficiente A de Einstein

En esta sección calcularemos el coeficiente A_{if} de Einstein que está presente en la tasa de emisión espontánea: W_{if}^s . Otras propiedades importantes pueden ser obtenidas una vez que se conoce el elemento de matriz, ver por ejemplo la Ref. 11. Dicha tasa de emisión tiene la forma siguiente en unidades internacionales

$$W_{if}^s = A_{if} N_i, \quad (57)$$

donde N_i es el número de ocupación del nivel energético E_i y A_{if} está dado como

$$A_{if} = \frac{2e^2 \omega_{if}^3}{3\epsilon_0 \hbar c^3} |\langle i | \vec{r} | f \rangle|^2 \quad (58)$$

En el caso de la partícula confinada en un esferoide prolato, salvo el estado base, cada nivel de energía está doblemente degenerado, por lo tanto, si los subíndices i, f indican el estado inicial y final respectivamente, el coeficiente de Einstein A_{if} , se escribe como sigue:

$$\begin{aligned} A_{if} &= \frac{2e^2 \omega_{if}^3}{3\epsilon_0 \hbar c^3} \left[|\langle i_1 | \vec{r} | f_1 \rangle|^2 + |\langle i_2 | \vec{r} | f_2 \rangle|^2 \right] \\ &= \frac{4e^2 \omega_{if}^3}{3\epsilon_0 \hbar c^3} |\langle i | \vec{r} | f \rangle|^2, \end{aligned} \quad (59)$$

donde

$$\begin{aligned} |f_1\rangle &= N_{l,m}(c) R_{l,m}(c, \xi) S_{l,m}(c, \eta) \Phi_m(\phi) \\ |f_2\rangle &= N_{l,-m}(c) R_{l,-m}(c, \xi) S_{l,-m}(c, \eta) \Phi_{-m}(\phi), \end{aligned} \quad (60)$$

y $\omega_{if} = (2\pi/\hbar)(E_i - E_f)$ es la frecuencia de emisión ($E_i > E_f$). Reescribimos

$$\begin{aligned} A_{if} &= \frac{32 \pi^3 e^2 a^2}{3 c^3 \hbar^4 \epsilon_0} \\ &\times (E_i - E_f)^3 |N_{l,m}(c) N_{l',m'}(c') I|^2. \end{aligned} \quad (61)$$

TABLA V. Cociente (A_{if}/F) para las transiciones permitidas entre niveles de energía más bajos para $\xi_0 = 3$

Estados físicos (l', m', c') (l, m, c)	$\Delta = \epsilon_i - \epsilon_f$	(A_{if}/F)
(1,1,1.57080) (0,0,1.08984)	0.639 7	0.395171
(2,1,1.98850) (1,0,1.53464)	0.802 2	0.625499
(2,2,2.02143) (1,1,1.57080)	0.809 2	1.27003
(3,1,2.40224) (2,0,1.97114)	0.942 2	0.969434
(3,2,2.42406) (2,1,1.98850)	0.961 1	1.79611
(3,3,2.45515) (2,2,2.02143)	0.970 9	2.75267

TABLA VI. Valores numéricos de los coeficientes A_{ij} y de las vidas medias correspondientes para $\xi_0 = 3$

Estados físicos			
$ i\rangle = (l', m', c')$	$ f\rangle = (l, m, c)$	$A_{if} (s^{-1})$	vidamedia = $1/A_{if} (s)$
(1,1,1.57080)	(0,0,1.08984)	4.6646×10^{10}	2.1438×10^{-11}
(2,1,1.98850)	(1,0,1.53464)	7.3834×10^{10}	1.3544×10^{-11}
(2,2,2.02143)	(1,1,1.57080)	1.4991×10^{11}	6.6705×10^{-12}
(3,1,2.40224)	(2,0,1.97114)	1.1443×10^{11}	8.7388×10^{-12}
(3,2,2.42406)	(2,1,1.98850)	2.1201×10^{11}	4.7167×10^{-12}
(3,3,2.45515)	(2,2,2.02143)	3.2492×10^{11}	3.0776×10^{-12}

Para utilizar unidades atómicas aprovechamos que

$$E_i - E_f = \frac{(\hbar)^2}{m_e a_0^2} \Delta$$

y resulta

$$\frac{A_{if}}{F} = |N_{l,m}(c) N_{l',m'}(c')|^2 \Delta^3, \quad (62)$$

donde

$$F = \frac{(hea)^2}{6\epsilon_0 (\pi m_e c a_0^2)^3} \quad (63)$$

nos ayuda a simplificar la escritura.

Después del cálculo numérico de las integrales involucradas en los elementos de matriz, se obtienen los siguientes resultados:

Para $\xi_0=3$ y $a=1$, los valores numéricos de los coeficientes A_{ij} , y de las vidas medias, $\tau=A_{if}^{-1}$, se pueden calcular rápidamente introduciendo el valor: $F=1.1804 \times 10^{11} s^{-1}$.

La vida media de un estado excitado se define como $\tau = A_{if}^{-1}$, de modo que un cálculo directo permite obtener los resultados de la Tabla VI.

7. Comparación con el espectro de energía de la esfera

En el sistema de partícula confinada en una caja esférica de volumen V , el espectro de energía presenta 8 niveles de energía por debajo de $\epsilon_s = 8.437$ rydbergs; en cambio, el

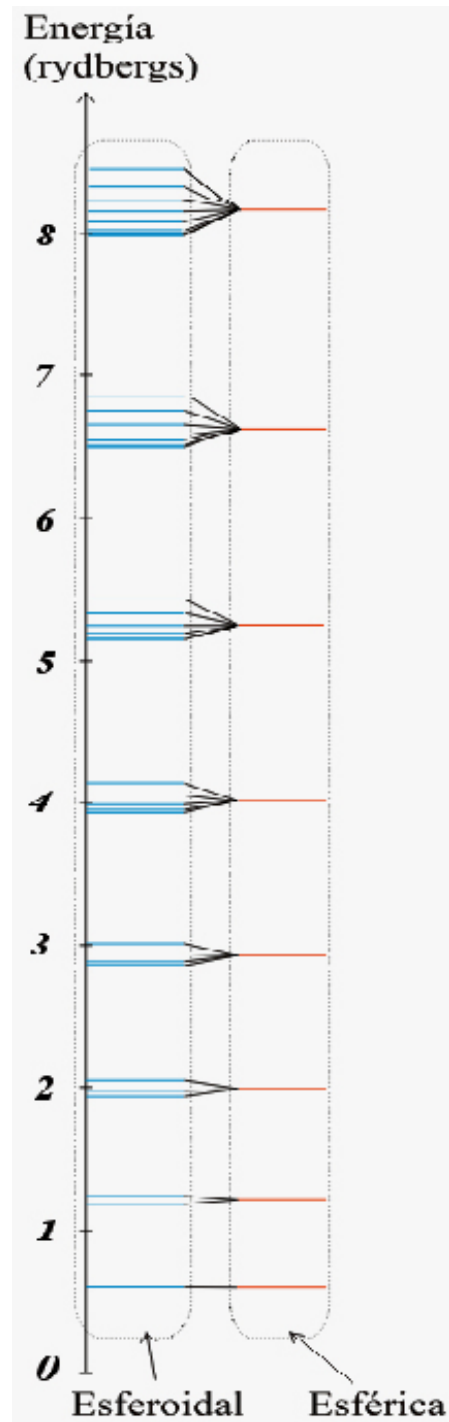


FIGURA 4. Funciones angulares del estado base $\{l = 0, m = 0\}$, y los estados $\{l = 1; m = 0, 1\}$, $\{l = 2; m = 0, 1, 2\}$. La paridad se va intercalando conforme crece m .

sistema de partícula confinada en una caja esferooidal prolata, también de volumen V , posee un espectro de energía con 36 niveles de energía por debajo de 8.437 rydbergs. Hemos investigado este fenómeno calculando todos los niveles de energía por debajo de ϵ_s cuando la caja esferooidal prolata tiene inverso de excentricidad $\xi_0 = 3$ y distancia del centro a uno de los focos $a = 1$. El resultado son los 36 valores numéricos mencionados. Enseguida repetimos el mismo

cálculo cuando la caja esferoidal prolata tiene como parámetros $\xi_0 = 30$ y $a = 0.0961856$, de modo que resulta el mismo volumen V . Como era de esperarse, el resultado es que los niveles de energía tienden a condensarse en torno a los valores de la caja esférica (ver Tablas VII y VIII en el Apéndice).

Este resultado puede ser muy interesante para un estudiante de licenciatura porque es un ejemplo tangible de lo que sucede cuando se pierde simetría en un sistema físico. Analizando el problema a la inversa, encontramos que el estado base de la partícula confinada en la esfera corresponde al estado base de la partícula confinada en la caja esferoidal prolata del mismo volumen V , con un ligero aumento de energía que resulta del trabajo que se hace para deformar a la esfera. En cambio, el primer nivel energético excitado, con $L = 1$, $m = 0, \pm 1$, $n = 1$ (primera raíz de la función de Bessel correspondiente), se desdobra en dos niveles energéticos, que son los correspondientes a $l = 1$, $m = 0$ y $l = 1$, $|m| = 1$ (ambos en la primera raíz de la función esferoidal radial).

Cuando se hace trabajo sobre una caja esférica confinante, para obtener una caja esferoidal prolata, se pierde la simetría esférica, haciendo que las $2L + 1$ proyecciones del momento angular se desdoblen en $L + 1$ niveles de energía diferentes. La degeneración es $g = 2$ y no desaparece del todo porque se conserva la simetría respecto al plano definido por $\eta = 0$, que corta el elipsoide por la mitad. Como hemos mencionado antes en este trabajo, esta simetría lleva a que las funciones $S_{l,m}(c, \eta)$ tengan paridad bien definida. La misma simetría se manifiesta en la propiedad $R_{l,m}(c, \xi) = R_{l,-m}(c, \xi)$, lo cual influye en que los niveles de energía desdoblados para cada valor de L no son $2L + 1$. Así la pérdida parcial de simetrías mantiene degeneración en los niveles de energía, que en este caso es únicamente $g = 2$, sin considerar el espín.

8. Sugerencias didácticas

Nuestra experiencia indica que el problema de una partícula confinada en un esferoide prolato puede ser comprendido a nivel de un curso de licenciatura en física. Su tratamiento puede ser abordado, mediante un sistema de proyectos, inmediatamente después de analizar con mecánica cuántica el movimiento en un campo central y de discutir el caso de partícula confinada en una esfera. En su desarrollo, el estudiante

1. Puede llevar a cabo la separación de variables para obtener las Ecs. (17-19),
2. practicar con los comandos del software Mathematica presentados en el texto para calcular otros niveles de energía adicionales a los presentados en este trabajo y dibujar las funciones de onda correspondientes,
3. comprobar que, si se mantiene constante el volumen V de la cavidad confinante, la energía de una partícula en un esferoide prolato cuya excentricidad disminuye,

tiende a la energía de una partícula contenida en una esfera,

4. también es posible comparar las gráficas de la parte radial (o angular) para conocer cómo se acerca a la forma de la función de onda de una partícula en una esfera. En particular, este ejercicio brinda una imagen visual del proceso de recuperación de la degeneración $g = 2l + 1$ del movimiento en un campo central.
5. Los estudiantes de postgrado pueden profundizar en el estudio de funciones esferoidales de las referencias [4] y [5], que presentan métodos distintos de análisis de las mismas.

Apéndice

TABLE VII. Espectro de energía para $\xi_0 = 3$, $a = 1$

l	m	n=1	n=2	n=3	n=4
0	0	0.5939	2.3878	5.404	9.654
1	0	1.1755	3.4942	7.002	
1	1	1.2337	3.6540	7.297	
2	0	1.9427	4.8255	8.858	
2	1	1.9767	4.9347	9.083	
2	2	2.0429	5.093	9.360	
3	0	2.8635	6.347		
3	1	2.8849	6.414		
3	2	2.9380	6.540		
3	3	3.0139	6.702		
4	0	3.9321	8.028		
4	1	3.9476	8.071		
4	2	3.9906	8.172		
4	3	4.0567	8.311		
4	4	4.1419	8.479		
5	0	5.143			
5	1	5.156			
5	2	5.193			
5	3	5.251			
5	4	5.327			
5	5	5.422			
6	0	6.497			
6	1	6.508			
6	2	6.540			
6	3	6.593			
6	4	6.664			
6	5	6.748			
6	6	6.858			
7	0	7.989			
7	1	7.999			
7	2	8.029			
7	3	8.077			
7	4	8.144			
7	5	8.227			
7	6	8.325			
7	7	8.437			

TABLE VIII. Espectro de energía para $\xi_0 = 3$, $a = 0.0961856$

l	m	n=1	n=2	n=3	n=4
0	0	0.593091	2.37238	5.33792	9.48964
1	0	1.21182	3.58529	7.14147	
1	1	1.21331	3.58689	7.14485	
2	0	1.99561	4.97932	9.12343	
2	1	1.99583	4.97988	9.12442	
2	2	1.99646	4.98154	9.12732	
3	0	2.93377	6.51986		
3	1	2.93435	6.52115		
3	2	2.93435	6.52115		
3	3	2.93508	6.52276		
4	0	4.02267	8.2314		
4	1	4.02279	8.23164		
4	2	4.02313	8.23235		
4	3	4.02372	8.23354		
4	4	4.02453	8.23521		
5	0	5.25898			
5	1	5.25908			
5	2	5.25947			
5	3	5.25997			
5	4	5.26067			
5	5	5.26157			
6	0	6.64018			
6	1	6.64027			
6	2	6.64054			
6	3	6.64098			
6	4	6.64161			
6	5	6.64242			
6	6	6.6434			
7	0	8.16438			
7	1	8.16446			
7	2	8.16471			
7	3	8.16512			
7	4	8.1657			
7	5	8.16644			
7	6	8.16734			
7	7	8.16841			

1. A. Echevarría-Montano y J. Tutor-Sánchez, *Rev. Mex. Fis.* **45** (1999) 47-52.
2. A. Bagga, P.K. Chattopadhyay y Subhasis Ghosh, Energy levels in spheroidal quantum dot, <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0406517>.
3. A. Bagga, Subhasis Ghosh y P.K. Chattopadhyay, *Nanotechnology* **16** (2005) 2726. doi: 10.1088/0957-4484/16/11/044.
4. Aquino, E. Castaño y E. Ley-Koo, *Rev. Mex. Fis.* **48** (2002) 277-282.
5. P.E. Falloon, *Theory and computation of spheroidal harmonics with general arguments* (Master of Science thesis, Department of Physics, The University of Western Australia, september 2001).
6. G.B. Arfken, *Mathematical methods for physicists* (Sixth edition, Elsevier 2005).
7. L. Medina y E. Ley-Koo, *Rev. Mex. Fis. E* **57** (2011) 87-95.
8. H.A. Erikson y E.L. Hill, *Phys. Rev.* **75** (1949) 29-31.
9. K. Helfrich, *Theoret. Chim. Acta* **24** (1972) 271-282.
10. C. Flammer, *Spheroidal wave functions* (Stanford University Press 1957).
11. C. Robert, *Am. J. Phys.* **50** (1982) 982-986.