



17  
29

Universidad Nacional Autónoma de México

FACULTAD DE CIENCIAS

ATOMO DE HIDROGENO EN UN SEMIESPACIO  
INFINITO LIMITADO POR UNA PARED  
PARABOLOIDAL

T E S I S  
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:  
F I S I C O  
P R E S E N T A:

ROSA MARIA GUADALUPE GARCIA CASTELAN

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

MEXICO, D. F.

MAYO DE 1990



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

# INDICE

		Pág.
I.	<b>CAPITULO 1 : Introducción</b>	1
	1.1 Objetivo de la Tesis	1
	1.2 Antecedentes y Motivación	2
	1.3 Contenido	7
II.	<b>CAPITULO 2 : Formulación del Modelo y Solución para Energías y Eigenfunciones</b>	9
	2.1 Introducción	9
	2.2 Formulación del Modelo	9
	2.3 Separación y Separabilidad de la Ecuación de Schroedinger	13
	2.4 Solución al Problema de Eigenvalores	18
	2.5 Eigenfunciones Normalizadas y Densidad de Probabilidad Parabólica	29
III.	<b>CAPITULO 3 : Resultados Numéricos para Energías y Eigenfunciones</b>	33
	3.1 Introducción	33
	3.2 Energía y Componente z del Vector de Runge- Lenz	33
	3.3 Función de Densidad de Probabilidad Parabólica	40
IV.	<b>CAPITULO 4 : Propiedades del Atomo de Hidrógeno Confinado en un Espacio Semi-infinito Limitado por Paredes Paraboloidales</b>	47
	4.1 Introducción	47
	4.2 Constante de Estructura Hiperfina	47
	4.3 Momento Dipolar Electrico	57
	4.4 Presión	61
V.	<b>CAPITULO 5 : Conclusiones</b>	66
VI.	<b>APENDICE</b>	68
VII.	<b>REFERENCIAS</b>	81

## **CAPITULO UNO**

### **INTRODUCCION**

## INTRODUCCION

### II OBJETIVO DE LA TESIS

En esta tesis se estudia al átomo de hidrógeno confinado en un espacio semi-infinito limitado por una superficie paraboloidal, como un modelo de un átomo en la superficie de un sólido. La superficie paraboloidal representa la acción que los átomos vecinos ejercen sobre el átomo de interés. Este trabajo forma parte de una línea de investigación en la cual se pretende explicar la emisión de electrones por rocas comprimidas. Los experimentos que han dado lugar al estudio de este fenómeno han sido realizados principalmente por grupos de la U.R.S.S., de Estados Unidos y de China. A continuación se hace una breve descripción de estos experimentos y también se presenta un trabajo en el cual se formuló un mecanismo basado en modelos de átomos confinados en un volumen como una posible explicación de dicho fenómeno. Uno de los puntos que en ese trabajo se hace destacar es que para un estudio más completo de la expulsión de electrones de muestras de rocas al ser comprimidas, y en general para un mejor entendimiento de las propiedades que manifiestan los átomos en superficies sólidas, es necesario construir y estudiar modelos de átomos confinados en espacios semi-infinitos, área en la que cae el tema de esta tesis.

## 1.2 ANTECEDENTES Y MOTIVACION

La presencia de electrones libres en muestras de rocas sometidas a presiones del orden de cientos de MPa, ha sido reportada desde hace ya algunos años por varios grupos experimentales. El grupo de Shevtsov et. al.<sup>(1)</sup> estudió la electrificación de muestras de feldespato al deformarlas por medio de compresiones uniaxiales hasta el momento de la fractura, alcanzando presiones del orden de 80 MPa. Ellos encontraron cargas eléctricas positivas en toda la superficie de la muestra, lo que indica que en un momento dado hubo emisión de electrones. Además, midieron la corriente asociada con el movimiento de estas cargas, al conectar electrodos en la muestra con un circuito externo. Así hallaron que la corriente se incrementaba a medida que la presión sobre las rocas aumentaba, alcanzando su valor máximo en el instante en el que se producía la fractura.

Con el fin de discriminar de entre los posibles mecanismos que podrían originar la emisión de luz asociada a la fractura de rocas en minas y en temblores, Brady y Rowell<sup>(2)</sup>, realizaron varios experimentos con muestras de basalto y de granito en atmósferas controladas de argón, de helio y de agua. Ellos lograron identificar en cada caso, mediante técnicas de espectroscopia atómica, la luz característica de los gases nobles mencionados, así como del hidrógeno atómico y molecular, durante la fractura de las muestras que se tenían. Este grupo experimental no observó radiación continua, tampoco luz característica de los elementos presentes en las muestras, ni emisiones en el espectro

de las microondas. Por ello se descartó que las posibles fuentes responsables de la emisión de luz durante la fractura de las rocas fueran: el calentamiento producido por la fricción de la roca hasta la incandescencia, los plasmas producidos por el rápido e intenso calentamiento de la roca, o bien descargas electrostáticas debido a la deformación de materiales piezoeléctricos o causadas por la separación de las cargas en superficies fracturadas. Brady y Rowell concluyen que debe haber exoelectrones con energías del orden de una unidad atómica ( 27.2 eV ) en el momento de la fractura, que excitan las atmósferas en las que se encuentran las muestras rocosas.

Por otro lado Guo et. al.<sup>(3)</sup> detectaron electrones en el momento de la fractura de muestras del granito de Huaiyuan a 170 MPa usando detectores Geiger-Mueller y detectores de plástico de Centelleo. Los detectores Geiger se encontraban dentro de un estuche de aluminio delgado para protegerlos de los daños que les hubieran podido causar los fragmentos liberados de la fractura. Además de protegerlos, el estuche servía para eliminar cualquier efecto electromagnético espúreo. Es importante hacer notar que el grosor de la mica de la ventana de los detectores Geiger era tal, que sólo los electrones con energías mayores a los 0.05 MeV podían ser detectados. La cuenta de los electrones permaneció en el fondo durante el periodo de la compresión de la muestra de granito antes de la fractura, y el conteo aumentó considerablemente en el instante en el que ésta tuvo lugar.

En el trabajo de Ley Koo et. al.<sup>(4)</sup>, se presenta el análisis cualitativo de los experimentos anteriores, así como la

proposición de un mecanismo como una posible explicación de estos. Estos autores hacen notar que del experimento citado en la referencia (1), se sigue que los electrones se producen antes de que suceda la fractura, pues desde el inicio se pudo medir la corriente de descarga de la muestra. Por otro lado, en el experimento citado en la referencia (1), los electrones son detectados en el momento mismo de la fractura, sin embargo es posible que algunos ya se hayan producido a presiones menores aunque no hayan sido detectados, debido a los instrumentos de medición que se emplearon. Esto último podría descartar cualquier inconsistencia entre los resultados obtenidos por estos 2 grupos experimentales. Sin embargo, en la referencia (1) también se hace notar que si se tomaban en cuenta los resultados de la referencia (2), surgían algunas preguntas que aún no han podido ser contestadas. Por ejemplo, si se considera la posibilidad de que hubiera electrones libres presentes antes de la fractura, debería de haber además iones positivos de los constituyentes de la roca en la muestra y se esperaría que estos produjeran sus propias radiaciones electromagnéticas. En los experimentos realizados hasta el momento, esta radiación no se ha detectado a pesar de habersele buscado. Sin embargo, se reconoce que en todos estos experimentos es común el hecho de que hay electrones que están saliendo de las muestras rocosas que se comprimen a presiones del orden de cientos de MPa. En un intento por comprender la emisión de electrones por rocas comprimidas, Ley Koo et. al. proponen como posible explicación, un mecanismo basado en los modelos de átomos encajonados en volúmenes. Concretamente utilizan un modelo de átomo confinado en una caja con paredes penetrables, situación que se simula con la presencia de un potencial escalón<sup>(5)</sup>. En el

mecanismo propuesto se reconoce que algunos de los electrones, de los átomos comprimidos, pueden cambiar sus energías de negativas a positivas y que los electrones que se producen a presiones menores que la presión de fractura, se liberan con energías cinéticas muy pequeñas, cuando sus energías igualan a la altura del potencial escalón que los mantiene confinados. Por su parte, los electrones que se producen en el momento de la fractura, con energías del orden de una unidad atómica, se liberan repentinamente cuando el efecto de compresión cesa súbitamente y el potencial escalón desaparece. Estos corresponden a los exoelectrones responsables de la ionización de la atmósfera que rodea a las muestras en el momento de la fractura. Así pues, este mecanismo es consistente con los órdenes de magnitud de las energías de los exoelectrones y las presiones de fractura que se han reportado en la referencia (2). Por otro lado, si se trata de explicar con este mismo mecanismo las energías del orden de MeVs de los electrones detectados en la referencia (3), se tiene que las muestras de las rocas deberían de estar sometidas a presiones que resultan irrealistas. Así pues, Ley Koo et. al. reconocen la necesidad de realizar en un futuro experimentos con el equipo apropiado, encaminados a medir las energías de los electrones en un intervalo que vaya desde los eVs hasta los MeVs, para obtener un panorama claro del origen de los electrones que se están detectando. Por su parte, la electrificación de las muestras de feldespato de las que se habla en la referencia (4), podría entenderse como el resultado de la liberación de electrones de los átomos comprimidos. Tal liberación puede llevarse a cabo a través del volumen de toda la muestra. Sin embargo, los electrones que están saliendo no pueden

ser mas que de los pertenecientes a los átomos superficiales, pues la probabilidad de detectar electrones de los átomos más internos es prácticamente nula. Por esta razón Ley Koo et. al. hacen resaltar el hecho de que, además de emplear los modelos de átomos confinados en volúmenes, hay que desarrollar y hacer uso de los modelos de átomos confinados en espacios semi-infinitos.

Los modelos de átomos confinados en espacios semi-infinitos se han desarrollado y han encontrado aplicaciones dentro de la Física del Estado Sólido. En particular, Levine<sup>(6)</sup> estudió el comportamiento de un átomo donante localizado en la superficie de un semiconductor, como por ejemplo un átomo de fósforo en una superficie de silicio, con el modelo de un átomo confinado en un espacio semi-infinito limitado por una pared plana, en la cual se encontraba estáticamente el núcleo del átomo. Las propiedades que este tipo de átomos manifiestan en la superficie son diferentes a las que se pueden presentar si estos estuvieran en el interior del semiconductor. El análisis de estas propiedades podría ser útil en la formación de películas delgadas, en la catálisis y en ciertos dispositivos electrónicos dominados por efectos de superficie. Por otro lado, para solucionar de manera exacta el problema de la obtención de eigenestados de un excitón de Wannier cerca de superficies semiconductoras, Satpathy<sup>(7)</sup> empleó el modelo de un átomo de hidrógeno confinado en un espacio semi-infinito limitado por una pared plana, en el cual el núcleo de un átomo se encontraba estático a una cierta distancia de la pared.

La diferencia existente entre los modelos referentes a espacios semi-infinitos citados en las referencias (6) y (7), y el

que se desarrolla en esta tesis, es que en aquéllos, el espacio semi-infinito está representando al interior del sólido, mientras que en el modelo que aquí se propone, el espacio semi-infinito hace las veces del exterior del sólido. Además, en el modelo propuesto, las fronteras ya no son planas sino que son paraboloidales.

### 1.3 CONTENIDO

Además de esta introducción, este trabajo consta de otros 4 capítulos y de un Apéndice. En el capítulo 2 se formula el modelo del átomo de hidrógeno confinado en un espacio semi-infinito limitado por una superficie paraboloidal, se explica la separación y separabilidad de la ecuación de Schroedinger en coordenadas parabólicas para el átomo de hidrógeno confinado, se construyen las soluciones para las eigenfunciones y los eigenvalores, y se calcula la función de densidad de probabilidad parabólica.

En el capítulo 3 se presentan los resultados numéricos de las energías, de la componente  $z$  del vector de Runge-Lenz para diferentes estados, así como los de la función de densidad de probabilidad parabólica para el estado base.

En el capítulo 4 se calculan la constante de estructura hiperfina en sus componentes isotrópica y anisotrópica, el momento dipolar eléctrico y el efecto de la presión que ejerce la pared sobre el electrón del átomo de hidrógeno. El desarrollo que en este capítulo se hace sobre la presión es diferente al que hicieron Michels et. al.<sup>(8)</sup>, pues los cálculos hechos se

restringieron a los estados  $s$  y además se tenía simetría esférica, dando lugar a una presión uniforme. En nuestro caso, la presión  $p_0$  es uniforme, sino que varía para cada punto de la superficie paraboloidal.

En el capítulo 3 , a manera de conclusiones , se hace resaltar que el átomo de hidrógeno en un espacio semi-infinito limitado por una superficie paraboloidal, es un problema que admite una solución exacta. Gracias a esto se pudieron calcular algunas propiedades atómicas como la energía del sistema, la constante de estructura hiperfina, el momento dipolar y la presión. En particular se hace notar que los resultados obtenidos para la ionización y la presión pueden relacionarse con las observaciones referentes a los electrones emitidos por rocas comprimidas, tema que motivó la realización del presente trabajo.

Todos los programas de computación requeridos se realizaron en Fortran y en Pascal y se corrieron en la computadora VAX 11/780 del Instituto de Física de la UNAM. Dichos programas se muestran en el Apéndice que está al final del trabajo.

## **CAPITULO DOS**

### **FORMULACION DEL MODELO**

**Y**

### **SOLUCION PARA LAS ENERGIAS Y EIGENFUNCIONES**

## CAPITULO 2

### FORMULACION DEL MODELO

Y

### SOLUCION PARA LAS ENERGIAS Y EIGENFUNCIONES

#### 2.1 INTRODUCCION

Como es de nuestro interés el estudio del comportamiento de átomos en la superficie de sólidos, en la sección 2.2 se define el modelo del átomo de hidrógeno confinado en un espacio semi-infinito limitado por una frontera paraboloïdal. Ya que, en términos prácticos, el estudio de este modelo se traduce en resolver la ecuación de Schroedinger para el átomo de hidrógeno confinado, en la sección 2.3 se analiza la separación y la separabilidad de ésta. En la sección 2.4 se da la solución al problema de eigenvalores y en la sección 2.5 se presentan las eigenfunciones normalizadas con las que posteriormente se construye la función de densidad de probabilidad parabólica.

#### 2.2 FORMULACION DEL MODELO

Los modelos de átomos en el interior de un sólido consideran al átomo confinado en un volumen finito, el cual queda definido por los átomos vecinos que se tienen en todas direcciones. En el caso de átomos en la superficie de los sólidos, este tipo de modelos ya no va a ser de utilidad porque ahora no se tendrán vecinos en todas direcciones. Por ello, esta situación se modela como un átomo en un espacio semi-infinito limitado por una

frontera curva, la cual queda definida únicamente por los vecinos que se tienen en el interior del sólido. En este trabajo, el átomo de interés es el átomo de hidrógeno y la frontera se idealiza como una superficie paraboloidal ya que de este modo, el modelo\* resulta ser sencillo, puesto que admite una solución exacta. El núcleo del átomo de hidrógeno se supone fijo en la posición del foco del paraboloides de revolución, como se muestra en la fig. 1, tomándose este punto como el origen del sistema de coordenadas.

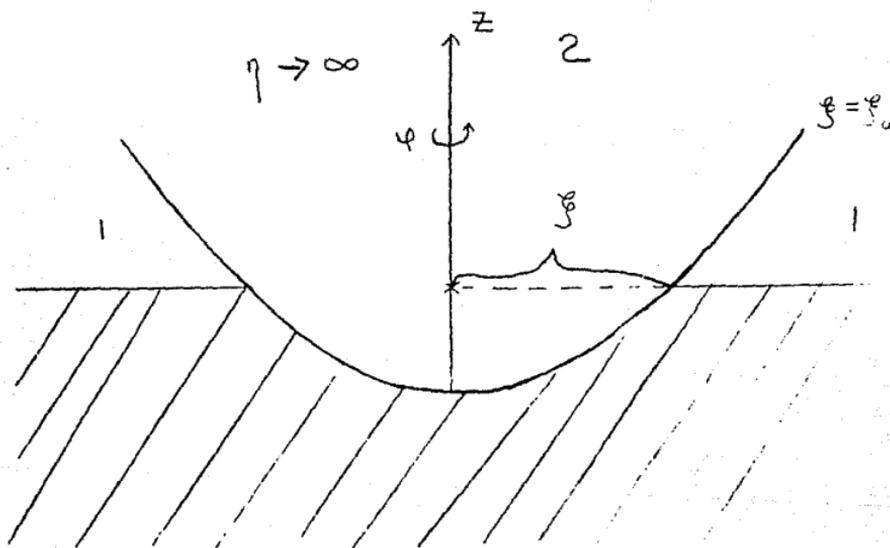


fig. 1 Atomo de hidrógeno confinado en un espacio semi-infinito limitado por paredes paraboloidales

\* El modelo que en esta tesis se desarrolla está muy relacionado con el trabajo referente al átomo de hidrógeno confinado en cajas paraboloidales (19), ya que si en este último se hace tender una de las superficies paraboloidales a infinito, se obtiene el modelo que aquí se presenta. Aunque cualitativamente estos 2 modelos son diferentes, las soluciones cuantitativas están basadas en las mismas ecuaciones y métodos de resolución.

La zona sombreada representa el hecho de que el electrón del átomo situado en la superficie, tenga una probabilidad casi nula de invadir la región ocupada por los vecinos y la zona 2 que es la permitida para el electrón, introduce la posibilidad de que el átomo pueda ionizarse al ser sometido, por ejemplo, a grandes presiones. La región 1, que queda de inmediato excluida al introducir una pared paraboloïdal, podría tomarse en cuenta en un modelo formado por una pared como la de la fig. 2. Sin embargo, en este caso la solución a la ecuación de Schroedinger no sería exacta y el análisis del problema se volvería complicado. De hecho en realidad no importa excluir a esta región en el modelo pues la probabilidad de encontrar al electrón en esta zona es muy baja.

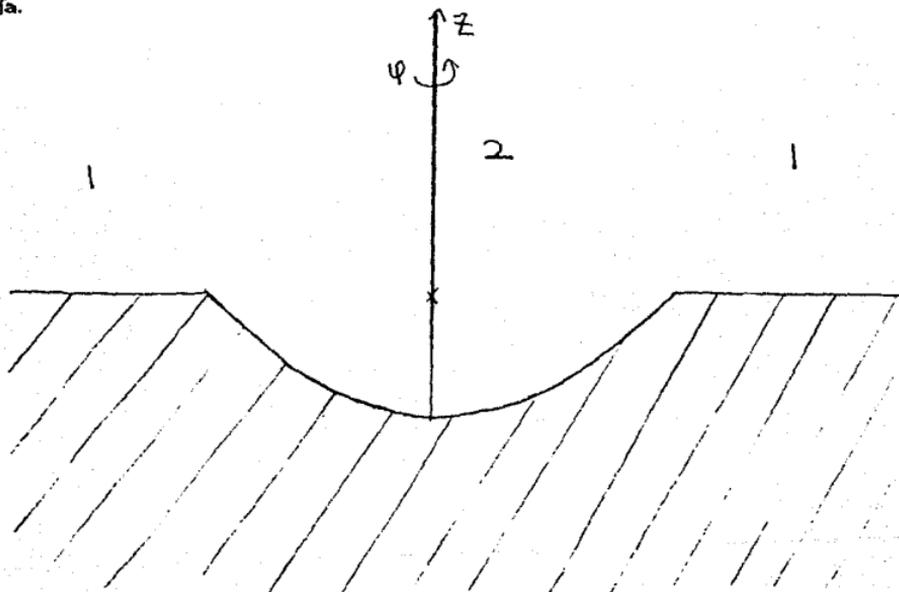


fig. 2 Atomo de hidrógeno confinado en un espacio semi-infinito limitado por paredes paraboloïdales y por paredes planas.

Las coordenadas parabólicas están definidas como:

$$\begin{aligned}\zeta &= r - z = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} - z \\ \eta &= r + z = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} + z \\ \varphi &= \tan^{-1} y/x\end{aligned}$$

con:

$$0 \leq \zeta < \infty \quad ; \quad 0 \leq \eta < \infty \quad ; \quad 0 \leq \varphi < 2\pi$$

en donde la coordenada  $\zeta$  representa la mitad del lado recto del parabolóide de revolución.

En estas coordenadas los factores de escala pueden escribirse de la siguiente manera<sup>(10)</sup>:

$$h_{\zeta} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\zeta + \eta}{\zeta}} \quad ; \quad h_{\eta} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\zeta + \eta}{\eta}} \quad ; \quad h_{\varphi} = \sqrt{\zeta \eta}$$

Así pues, la ecuación de Schrodinger para el movimiento relativo del electrón alrededor del núcleo adquiere la forma:

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{4}{\zeta + \eta} \left( \frac{\partial}{\partial \zeta} \zeta \frac{\partial}{\partial \zeta} + \frac{\partial}{\partial \eta} \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \frac{1}{\zeta \eta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{2Ze^2}{\zeta + \eta} \right\} \Psi(\zeta, \eta, \varphi) = E \Psi(\zeta, \eta, \varphi) \quad (2.1)$$

El espacio semi-infinito de nuestro interés queda definido

por la posición  $\xi = \xi_0$  de su frontera paraboloidal. Así pues, el confinamiento del átomo en ese espacio se traduce en imponer las siguientes condiciones de frontera:

$$\Psi(\xi = \xi_0, \eta, \rho) = 0 \quad (2.2)$$

$$\Psi(\xi, \eta \rightarrow \infty, \rho) = 0 \quad (2.3)$$

### 2.3 SEPARACION Y SEPARABILIDAD DE LA ECUACION DE SCHROEDINGER

Es de nuestro interés la resolución de la ecuación de Schroödinger para los estados ligados del átomo de hidrógeno dada por la expresión (2.1), sujeta a las condiciones de frontera (2.2) y (2.3).

Sabemos que la ecuación de Schroödinger para un potencial central siempre se puede separar en coordenadas esféricas. Esto es debido a que los operadores asociados a las cantidades físicas que se conservan, a saber la energía, el cuadrado de la magnitud del vector de momento angular y la componente z del vector de momento angular, conmutan entre sí. En el problema de nuestro interés, trabajar con este tipo de coordenadas no es muy conveniente porque bajo este contexto las condiciones de frontera que ahora se tienen no se satisfacen tan fácilmente. En el caso especial del potencial coulombiano, la degeneración accidental que se tiene es un indicativo de que hay otra constante de movimiento, dando lugar así a que la ecuación de Schroödinger pueda separarse también en

otros sistemas de coordenadas, en particular en coordenadas parabólicas y en coordenadas esferoidales prolatas.

En el problema de Kepler, además de la energía y de la componente  $z$  del vector de momento angular, se tiene al vector de Runge-Lenz como constante de movimiento. Clásicamente este vector está definido como:<sup>(11)</sup>

$$\bar{A} = \frac{1}{\mu} \bar{p} \times \bar{L} - \frac{Ze^2}{r} \bar{r}$$

Cuánticamente, es necesario construir el operador asociado a este vector, para lo cual se toma su forma simetrizada, a saber:

$$\hat{\bar{A}} = \frac{1}{2\mu} [\hat{p} \times \hat{L} - \hat{L} \times \hat{p}] - \frac{Ze^2}{r} \hat{r}$$

Escribiendo a  $\hat{p}$ ,  $\hat{L}$  y  $\hat{r}$  explícitamente como operadores y aplicando el operador  $\hat{\bar{A}}$  a una función  $\Psi$ , después de desarrollar los productos cruz, se llega a que:

$$\hat{\bar{A}}\Psi = \frac{\hbar^2}{\mu} \left[ \frac{1}{2} (\text{grad grad}^2\Psi) \hat{r} - \hat{r} \nabla^2\Psi + \text{grad}\Psi + \frac{1}{2} \hat{r} (\text{grad grad}\Psi) \right] - Ze^2 \hat{r} \Psi$$

En términos de coordenadas parabólicas y tomando sólo la componente  $z$ , se obtiene después de hacer toda el álgebra que:

$$\hat{A}_z \Psi = \frac{\hbar^2}{\mu} \left[ \frac{-4\eta}{\zeta + \eta} \left( \frac{\partial}{\partial \zeta} \zeta \frac{\partial \Psi}{\partial \zeta} \right) + \frac{4\zeta}{\zeta + \eta} \left( \frac{\partial}{\partial \eta} \eta \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \right) - \left( \frac{1}{\eta} - \frac{1}{\zeta} \right) \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right] - \left[ \frac{\eta - \zeta}{\eta + \zeta} \right] \rho^2 \Psi \quad (2.4)$$

Ahora bien, en coordenadas parabólicas el operador hamiltoniano que aparece en la ecuación de Schroedinger, expresión (2.1), conmuta no sólo con el cuadrado de la componente z del vector de momento angular, sino también con la componente z del vector de Runge-Lenz, por lo que estos 3 operadores poseen de manera simultánea, las mismas eigenfunciones para los estados estacionarios:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (2.5)$$

$$\hat{L}_z^2 \Psi = \hbar^2 m^2 \Psi \quad (2.6)$$

$$\hat{A}_z \Psi = A\Psi \quad (2.7)$$

Observamos que ahora, en vez del operador asociado con el cuadrado de la magnitud del vector de momento angular, se tiene al operador asociado con la componente z del vector de Runge-Lenz.

Comúnmente la separación de la ecuación de Schroedinger se lleva a cabo a través del método de separación de variables, proponiendo a  $\Psi$  como:

$$\Psi(\zeta, \eta, \varphi) = C Z(\zeta) H(\eta) \Phi(\varphi) \quad (2.8)$$

en donde C es la constante de normalización. Sustituyendo en la ecuación (2.1), después de algunos cálculos se obtienen las

siguientes ecuaciones diferenciales:

$$\frac{d^2 \mathfrak{F}(\rho)}{d\rho^2} = -m^2 \mathfrak{F}(\rho) \quad (2.9)$$

$$\left\{ \frac{-\Lambda^2}{2\mu} \left[ \frac{4}{\xi} \frac{d}{d\xi} \xi \frac{d}{d\xi} - \frac{m^2}{\xi^2} \right] - \frac{4K_1}{\xi} \right\} \Xi(\xi) = E\Xi(\xi) \quad (2.10)$$

$$\left\{ \frac{-\Lambda^2}{2\mu} \left[ \frac{4}{\eta} \frac{d}{d\eta} \eta \frac{d}{d\eta} - \frac{m^2}{\eta^2} \right] - \frac{4K_2}{\eta} \right\} H(\eta) = EH(\eta) \quad (2.11)$$

La ecuación (2.9) se identifica con la ecuación de eigenvalores para  $\hat{I}_z^2$  dada por la expresión (2.6), cuya solución normalizada es:

$$\mathfrak{F}(\rho) = \frac{e^{im\rho}}{\sqrt{2\pi}} \quad (2.12)$$

La condición de unicidad de la función  $\mathfrak{F}$  con respecto a la variable independiente periódica  $\rho$ , conduce a que  $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , lo que define respectivamente los estados  $\sigma, \pi, \delta, \dots$  y corresponde a la cuantización de la componente  $z$  del vector de momento angular. Por otro lado, las constantes de separación de las ecuaciones (2.10) y (2.11), no son independientes entre sí, sino que deben satisfacer la relación:

$$K_1 + K_2 = \frac{Ze^2}{2} \quad (2.13)$$

Para saber qué es lo que  $K_1$  y  $K_2$  representan, analicemos la ecuación (2.4) de eigenvalores para la componente  $z$  del vector de Runge-Lenz, introduciendo en ésta la forma propuesta para  $\Psi$  dada por la expresión (2.8). Así, aparte de la ecuación (2.9), se obtienen las mismas ecuaciones diferenciales para  $E(\zeta)$  y para  $H(\eta)$ :

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{4}{\zeta} \frac{d}{d\zeta} \zeta \frac{d}{d\zeta} - \frac{m^2}{\zeta^2} \right] - \frac{Ze^2}{\zeta} - \frac{A}{\zeta} \right\} E(\zeta) = BE(\zeta) \quad (2.14)$$

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{4}{\eta} \frac{d}{d\eta} \eta \frac{d}{d\eta} - \frac{m^2}{\eta^2} \right] + \frac{Ze^2}{\eta} - \frac{A}{\eta} \right\} H(\eta) = BH(\eta) \quad (2.15)$$

Comparando las correspondientes ecuaciones diferenciales (2.10) y (2.11) que se obtienen al separar la ecuación de Schroedinger, con las ecuaciones (2.14) y (2.15) que resultan de la separación de la ecuación de eigenvalores para  $\hat{A}_z$ , se observa que ahora la constante de separación  $B$  resulta ser la energía. Además se hallan las conexiones entre las constantes  $K_1$  y  $K_2$  con el eigenvalor  $A$  para la componente  $z$  del vector de Runge-Lenz y con la intensidad del potencial coulombiano:

$$A + Ze^2 = 4K_1 \quad (2.16)$$

$$A - Ze^2 = -4K_2 \quad (2.17)$$

Sumando estas 2 expresiones tenemos que :

$$A = 2(K_1 - K_2) \quad (2.18)$$

Así pues, el eigenvalor  $\lambda$  para la componente  $z$  del vector de Runge-Lenz está relacionado con las constantes de separación  $K_1$  y  $K_2$  que se obtienen al separar la ecuación de Schroedinger. Si ahora se restan (2.16) y (2.17) se obtiene nuevamente la condición (2.13) a la que están sujetas las constantes  $K_1$  y  $K_2$ .

Por otro lado, de la forma propuesta para  $\Psi$  dada por la ecuación (2.8), las condiciones de frontera (2.2) y (2.3) se traducen en que:

$$E(\xi = \xi_0) = 0 \quad (2.19)$$

$$H(\eta \rightarrow \infty) = 0 \quad (2.20)$$

Las formas explícitas de estas soluciones se presentan en la siguiente sección.

## 2.4 SOLUCION AL PROBLEMA DE EIGENVALORES

El propósito de esta sección es el de resolver las ecuaciones diferenciales (2.10) para  $E(\xi)$  y (2.11) para  $H(\eta)$ , en las que se separó la ecuación de Schroedinger. Como estas ecuaciones poseen la misma forma matemática, se puede trabajar con ellas de manera simultánea, como lo hicieron los autores de la referencia (8), introduciendo una variable independiente  $q_i$  y la función  $Q_i$  con  $i = 1, 2$ , en donde  $q_1 = \xi$ ,  $q_2 = \eta$ ,  $Q_1 = E$  y  $Q_2 = H$ . Además, ya que ambas ecuaciones poseen una singularidad removible en  $q_i = 0$ , se puede tomar a  $Q_i(q_i)$  como:

$$Q(q_l) = q_l^{|m|/2} f(q_l) \quad (2.21)$$

Introduciendo esto último en (2.10) o en (2.11) se llega a que, después de algunas reducciones,  $f(q_l)$  cumple con la ecuación:

$$\left[ \frac{d^2}{dq_l^2} + \frac{|m| + 1}{q_l} \frac{d}{dq_l} + \frac{2\mu K_l}{\hbar^2 q_l} + \frac{\mu E}{2\hbar^2} \right] f(q_l) = 0 \quad (2.22)$$

Expresando la energía en términos del radio de Bohr  $\left[ a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \right]$  y de un parámetro real  $\nu$ :

$$E = - \frac{Z^2 e^2}{2a_0 \nu^2} \quad (2.23)$$

Sustituyendo esta forma de la energía en (2.22) y haciendo el cambio de variable:

$$\rho_l = \frac{Z q_l}{2a_0 \nu} \quad (2.24)$$

en donde  $\rho_l$  es una variable adimensional,\* pues  $q_l$  tiene unidades de  $a_0$ , se obtiene la ecuación:

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho_l^2} + \frac{|m| + 1}{\rho_l} \frac{d}{d\rho_l} + \frac{2a_0 \nu}{Z \rho_l} \left( \frac{2\mu K_l}{\hbar^2} \right) - 1 \right] f(\rho_l) = 0 \quad (2.25)$$

\* La ventaja de introducir variables adimensionales es que además de que se simplifican notablemente los cálculos, de manera natural se factorizan las dimensiones de las cantidades físicas con las que se está trabajando.

De esta expresión se sugiere que las  $K_i$  se parametricen como:

$$K_i = \frac{Z\hbar^2}{2a_0\mu} \frac{\nu_i + \frac{1}{2} (|m| + 1)}{\nu} \quad (2.26)$$

entonces, sustituyendo los valores dados para  $K_1$  y  $K_2$  de (2.26) en (2.13), tenemos que se debe cumplir que :

$$\nu = \nu_1 + \nu_2 + |m| + 1 \quad (2.27)$$

Ahora también se puede escribir el eigenvalor de la componente  $z$  del vector de Runge-Lenz, expresión (2.18) como:

$$A = Ze^2 \left( \frac{\nu_1 - \nu_2}{\nu} \right) \quad (2.28)$$

La resolución de la ecuación (2.25) puede llevarse a cabo separando el comportamiento asintótico de la función  $f(\rho_i)$ , o bien se puede tomar a ésta como una serie de potencias. En el primer caso se propone a  $f(\rho_i)$  como:

$$f(\rho_i) = e^{-\rho_i} g(\rho_i) \quad (2.29)$$

Sustituyendo en la expresión (2.25), ésta se transforma en :

$$\frac{\rho_1}{2} \epsilon'' + \epsilon' \left[ |m| + 1 - \rho_1 \right] + \epsilon \left[ - \left( \frac{|m| + 1}{2} \right) + \nu_1 + \frac{1}{2} (|m| + 1) \right] = 0 \quad (2.30)$$

cuya solución regular en el origen es la función hipergeométrica confluyente:

$$\epsilon(\rho_1) = {}_1F_1(-\nu_1, |m| + 1, 2\rho_1) \quad (2.31)$$

Por lo tanto sustituyendo (2.31) en (2.29) y ésta a su vez en (2.21), haciendo el cambio de  $\rho_1$  a  $q_1$ ,\* se obtiene la solución general:

$$Q_1(q_1) = \left( \frac{Zq_1}{2a_0\nu} \right)^{|m|/2} e^{-\frac{Zq_1}{2a_0\nu}} {}_1F_1 \left[ -\nu_1, |m| + 1; \frac{Zq_1}{a_0\nu} \right] \quad (2.32)$$

Tomando ahora a la función  $f(\rho_1)$  como una serie de potencias:

$$f(\rho_1) = \sum_{s=0}^{\infty} C_s^{(m,l)} \rho_1^s \quad (2.33)$$

y sustituyendo en la ecuación (2.25), se hallan las siguientes fórmulas de recurrencia para los coeficientes:

\*De aquí en adelante, el cambio de variable de  $q_1$  que representa a  $t$  o  $\eta$ , a la correspondiente  $\rho_1$  o viceversa, se hará indistintamente a lo largo de todos los desarrollos. Implícitamente en estos casos siempre se estará recurriendo a la ecuación (2.24).

$$G_0 = 1 \quad (2.34a)$$

$$C_1^{(m,i)} = - \frac{2\nu_i + |m| + 1}{|m| + 1} \quad (2.34b)$$

$$C_{N+1}^{(m,i)} = - \frac{(2\nu_i + |m| + 1) C_N^{(m,i)} \pm C_{N-1}^{(m,i)}}{(N+1)(N + |m| + 1)} \quad (2.34c)$$

con  $N = 1, 2, 3, \dots$

En las expresiones anteriores los superíndices  $(m, i)$  indican que los coeficientes  $C_N$  son funciones de  $m$  y dependiendo de qué  $i$  se tome, serán los coeficientes de un polinomio solución para  $\xi$  o bien para  $\eta$ .

Con  $f$  dada de acuerdo a la expresión (2.33), la solución (2.21) adquiere la forma:

$$Q_i(q_i) = q_i^{|m|/2} \sum_{\sigma=0}^{\infty} C_{\sigma}^{(m,i)} \left[ \frac{Zq_i}{2a_0\nu} \right]^{\sigma} \quad (2.35)$$

De la ecuación (2.19) se sabe que una vez que se imponen las condiciones de frontera se debe cumplir que  $E(\xi = \xi_0) = 0$ , por lo tanto la solución para  $E(\xi)$  es la que está dada en series de potencias, así que la expresión (2.19) se traduce en encontrar los ceros de la ecuación (2.35) :

$$f(\rho_{10}) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(m,l)} \rho_{10}^n = 0$$

en donde las  $C_n^{(m,l)}$  quedan determinadas por las fórmulas de recurrencia (2.34a), (2.34b) y (2.34c).

Para  $\eta$  se toma la solución en la cual el comportamiento asintótico ha sido factorizado, ya que al imponer las condiciones de frontera, de la ecuación (2.20) tenemos que  $H(\eta \rightarrow \infty) = 0$ . Haciendo  $i=2$  en la ecuación (2.32) y expresando a la función hipergeométrica confluyente en términos de los símbolos de Pochhammer tenemos:

$$H(\rho_2) = \left( \frac{2a_0 \nu_2}{Z} \right)^{|m|/2} e^{-\rho_2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\nu_2)_n (2\rho_2)^n}{(m+1)_n n!} \quad (2.36)$$

La razón de convergencia de la función hipergeométrica confluyente es la misma que en el caso en que se desarrolla en serie a la función  $e^x$ , así que  $H(\rho_2)$  va a tener un comportamiento exponencialmente creciente conforme  $\rho_2 \rightarrow \infty$ . Para hacer que se cumpla la condición de frontera (2.20) y como se espera tener funciones bien comportadas en infinito, hay que cortar la serie que aparece en la ecuación (2.36). Esto último se logra si  $-\nu_2$  es un entero negativo, es decir si  $\nu_2 = 0, 1, 2, 3, \dots$ , obteniéndose de este modo polinomios de grado  $\nu_2$ . Así pues, la condición (2.20) restringe a  $\nu_2$  a ser cero o un número natural, y debido a la presencia de la exponencial decreciente se garantiza que si  $\rho_2 \rightarrow \infty$  entonces  $H(\rho_2) \rightarrow 0$ .

Por lo tanto, la solución para  $H(\xi)$  resulta ser la dada por la ecuación (2.35) con  $i=1$ , para  $H(\eta)$  la (2.32) con  $i=2$  y para  $\Phi(\rho)$  la (2.12). De este modo la función de onda  $\Psi$ , expresión (2.8), adquiere la forma:

$$\Psi(\xi, \eta, \rho) = C \xi^{|m|/2} \left( \sum_{s=0}^{\infty} C^{(m,s)} \left( \frac{Z\xi}{2a_0\nu} \right)^s \right) \eta^{|m|/2} e^{-\frac{Z\eta}{2a_0\nu}} {}_1F_1(-\nu_2, |m|+1; \frac{Z\eta}{a_0\nu}) e^{im\rho} \quad (2.37)$$

En el estado base se tiene  $m = 0$  y  $\nu_2 = 0$ , y en este caso la ecuación (2.37) se reduce simplemente a:

$$\Psi(\xi, \eta, \rho) = \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \left( \sum_{s=0}^{\infty} C^{(m,s)} \left( \frac{Z\xi}{2a_0\nu} \right)^s \right) e^{-\frac{Z\eta}{2a_0\nu}} \quad (2.38)$$

Para llevar a cabo todos los cálculos numéricos requeridos, por cuestiones meramente prácticas, primero se fijaron los valores de  $m$  y de  $\nu_2$  y una vez hecha esta elección se fueron tomando diferentes valores arbitrarios reales para  $\nu_1$ . De este modo se pudieron obtener los valores de  $\nu$  a través de la relación (2.27) y por consiguiente se obtuvieron los correspondientes valores para la energía con la expresión (2.23). Asimismo, se pudieron construir los coeficientes dados por las ecuaciones (2.34a), (2.34b) y (2.34c) para posteriormente hallar las raíces de la ecuación (2.35) con la precisión requerida, tomando un número finito de términos. De entre todas las raíces posibles, solamente son de interés las raíces reales positivas ya que  $0 \leq \xi \leq \infty$ . En particular, por ejemplo al tomar la primer raíz positiva, lo que se está diciendo es que la pared va a estar colocada precisamente en la posición en la que se encuentra el primer nodo de la función

$\Xi(\xi)$ , en donde además se tiene un determinado valor de la energía. Si se toma la segunda raíz positiva, la pared va a estar ahora localizada en el segundo nodo de la función  $\Xi(\xi)$ , en donde también se tiene el mismo valor de la energía y así para los diferentes nodos que se tomen. Ahora bien, para distintos valores de  $\nu_1$ , manteniendo fija a la  $\nu_2$  y a la  $m$ , en cada caso se pueden construir diferentes funciones  $\Xi(\xi)$  para las cuales siempre se puede estar tomando el primer nodo, o el segundo, o el que se desee, y así acercar o alejar a la pared paraboloidal del núcleo del átomo, a la vez que se construyen distintos estados. Por ejemplo, si se varía a la  $\nu_1$  y se toma siempre el primero nodo para  $m=0$  y para un cierto valor fijo de  $\nu_2$ , se estarán construyendo estados  $\sigma$  que son diferentes de los que se obtendrían para  $m=0$  tomando el segundo nodo, aunque se considerara el mismo valor para  $\nu_2$  y se variara a  $\nu_1$  de la misma manera que en el caso anterior. De manera esquemática en la fig. 3 se ha representado el caso en el cual se toma el primer nodo para diferentes valores de  $\nu$  y  $\nu_1$  manteniendo a  $\nu_2$  fija.

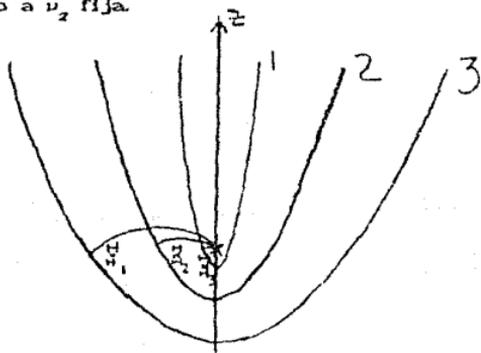


Fig.3 Representación esquemática del primer nodo de la función  $\Xi(\xi)$  en cada una de las paredes 1, 2, y 3 para diferentes valores de  $\nu_1$  manteniendo a  $\nu_2$  y a  $m$  fija

Es importante hacer notar que para una cierta posición  $\xi_0$  de la pared y de unos valores dados de  $\nu_2$  y  $m$ , la ecuación (2.25) se satisface solamente para determinados valores de  $\nu_1$ , puesto que tanto el parámetro  $\nu$  así como los coeficientes dependen explícitamente de  $\nu_1$ . Esto da como consecuencia la obtención de valores discretos para la energía resolviéndose de este modo el problema de eigenvalores.

Por otro lado, si se comparan la expresión (2.23) para la energía, y la ecuación (2.27) para el parámetro  $\nu$  de energía para el átomo de hidrógeno confinado, con las expresiones correspondientes para el átomo de hidrógeno libre en coordenadas parabólicas, a saber <sup>(12)</sup>:

$$E = - \frac{Z^2 e^2}{2a_0 n^2} \quad \text{y} \quad n = n_1 + n_2 + |m| + 1$$

donde el número cuántico principal  $n$  toma los valores 1,2,3,..., se ve claramente que  $\nu$  está haciendo las veces de  $n$ , sin embargo debido a las condiciones de frontera impuestas,  $\nu$  no necesariamente siempre tiene que tomar valores enteros positivos.  $\nu_1$  tampoco tiene por qué ser un entero positivo. De hecho, tanto  $\nu$  como  $\nu_1$  son números reales positivos. La única variable restringida a ser cero o un número natural es  $\nu_2$  y en analogía con  $n_2$  que es el grado del polinomio de Laguerre asociado con la solución en la coordenada  $\eta$ ,  $\nu_2$  es el grado del polinomio resultante al cortar la serie correspondiente a la función hipergeométrica confluyente que aparece en la solución para  $\eta$ , como se ve de la ecuación (2.36). Por su parte, la  $m$  que aparece tanto en la expresión para  $\nu$  como para  $n$ , es el número cuántico

magnético orbital y el uno que también se encuentra en ambas expresiones es el nodo que la función tiene en infinito.

Ahora bien, en el caso límite en el cual el átomo se ioniza se tiene  $E = 0$ , lo que corresponde a tener  $\nu \rightarrow \infty$  en la ecuación (2.23), lo que implica que  $\nu_1 \rightarrow \infty$  en la expresión (2.27). Para encontrar la posición de la pared para este valor de la energía se prosiguió de la siguiente manera. Si  $\nu_1 \rightarrow \infty$  y por consiguiente  $\nu \rightarrow \infty$  entonces de las ecuaciones (2.13) y (2.26) tenemos que

$K_1 = \frac{Ze^2}{2}$  y que  $K_2 = 0$ . Si se hace el cambio de variable

$x = 2\sqrt{\frac{Z\xi}{a_0}}$  en la ecuación (2.10), ésta se transforma en la ecuación ordinaria de Bessel:

$$\left[ x^2 \frac{d^2}{dx^2} + x \frac{d}{dx} + (x^2 - m^2) \right] \Xi(\xi) = 0 \quad (2.39)$$

cuyas soluciones son precisamente las funciones de Bessel de orden  $m$ , a saber:

$$J_m(x) = \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n'}}{\Gamma(n'+1)\Gamma(m+n'+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{m+2n'} \quad (2.40)$$

Imponiendo sobre este resultado la condición de frontera (2.19), se obtiene que:

$$\xi_0 = \frac{a_0 J_{m,n'}^2}{4Z} \quad (2.41)$$

o sea que las raíces quedan en términos de los ceros de las funciones de Bessel de orden  $m$ .

Para las diferentes combinaciones  $mn'$  posibles, una vez fijada  $m$  queda bien definido un estado y luego como  $n'=1,2,3,\dots$  se estarán buscando en cada caso las correspondientes posiciones de la pared para cuando se hayan tomado respectivamente el primero, el segundo, el tercero, ... nodo de la función (2.39).

Por otro lado, para designar los estados del sistema, se ha empleado la notación  $(n_1 n_2 m)$  en términos del orden de excitación de los respectivos grados de libertad.  $n_1$  está asociado con el grado de libertad para  $\zeta$  y adicionalmente da el número de nodo de la función que se tomó, excluyendo el que se tiene en la pared, o sea  $n_1 = \text{número de nodo} - 1$ .  $n_2$  está asociado con el grado de libertad para  $\eta$  a través de  $\nu_2$ . Finalmente cuando se ha fijado un valor para  $m$ , se tiene un estado  $\sigma, \pi, \delta, \dots$  bien definido. Por ejemplo el estado base es el  $(0 0 \sigma)$ , esta notación nos indica que la posición de la pared está donde se encuentra el primer nodo de la función  $E(\zeta)$ , por ello  $n_1 = 1 - 1 = 0$ , también nos está indicando que  $\nu_2 = 0$  y que  $m = 0$ , puesto que estamos en un estado  $\sigma$ . Además se observa que los ceros sucesivos de las funciones de Bessel para  $n' = 1, 2, 3, \dots$  corresponden a los sucesivos órdenes de excitación del grado de libertad asociado con la coordenada  $\zeta$ , así se ve que  $n'$  está haciendo las veces de  $n_1$ . Por otro lado, la situación límite descrita por la expresión (2.41) es independiente del orden de excitación del grado de libertad asociado con la coordenada  $\eta$ . Lo anterior se traduce en que todos los eigenestados

$\Psi_{n\nu_2 m}$  con valores fijos de  $n$  y  $m$  pero distintos valores de  $\nu_2$ ,  
 tienden a ionizarse a una misma posición de la pared.

## 2.5 EIGENFUNCIONES NORMALIZADAS Y DENSIDAD DE PROBABILIDAD PARABOLICA

Ahora bien, las ecuaciones (2.37) y (2.38) quedan totalmente determinadas una vez que se conoce la constante  $C$  de normalización. Para calcularla pedimos que:

$$1 = \int_{\text{Espacio disponible}} |\Psi|^2 dV$$

Usando la ecuación (2.38), la condición anterior queda como:

$$1 = \int \left| \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \left( \sum_{\nu=0}^{\infty} c^{(m,\nu)} \left( \frac{Z\xi}{2a_0\nu} \right)^{\nu} \right) e^{-\frac{Z\xi}{2a_0\nu}} \right|^2 dV \quad (2.42)$$

Para poder calcular la integral que aparece en esta expresión es necesario introducir el elemento de volumen, a saber<sup>(13)</sup>

$\frac{\xi + \eta}{4} d\rho d\xi d\eta$ , que fácilmente se puede calcular con los factores de

escala introducidos en la sección 2.2. Con esto y escribiendo todos los términos de la ecuación (2.42) obtenemos:

$$1 = \int_0^a \int_0^z \int_0^{2\pi} \frac{C^2}{2\pi} \sum_{s=0}^{\infty} C_s^{(0,1)} \left( \frac{Z\xi}{2a_0\nu} \right)^s \sum_{t=0}^{\infty} C_t^{(0,1)} \left( \frac{Z\xi}{2a_0\nu} \right)^t e^{\frac{-2\eta}{a_0\nu}} \frac{\langle \xi+\eta \rangle}{4} dp d\xi d\eta$$

Intercambiando el orden de las sumatorias y las integrales se obtiene:

$$1 = \frac{C^2}{8\pi} \sum_{s=0}^{\infty} C_s^{(0,1)} \sum_{t=0}^{\infty} C_t^{(0,1)} \left( \frac{Z}{2a_0\nu} \right)^{s+t} \int_0^a \int_0^z \int_0^{2\pi} e^{\frac{-2\eta}{a_0\nu}} \langle \xi+\eta \rangle \xi^{s+t} dp d\xi d\eta$$

Al evaluar las integrales que aparecen en esta expresión y haciendo  $p = t + s$  se llega a que:

$$C^2 = \frac{1}{\left( \frac{a_0\nu}{Z} \right)^B \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p C_s^{(0,1)} C_{p-s}^{(0,1)} \left[ \frac{\rho_{10}^{p+2}}{p+2} + \frac{1}{2} \frac{\rho_{10}^{p+1}}{p+1} \right]} \quad (2.43)$$

de donde se observa que la constante de normalización al cuadrado tiene unidades de  $1/a_0^B$ . Como ya se sabe la manera práctica en la que se pueden calcular los coeficientes  $C_s^{(0,1)}$  y  $C_{p-s}^{(0,1)}$ , que la  $\rho_{10}$  es simplemente la raíz de la expresión (2.35) que da la posición de la pared respecto del núcleo y que la  $\nu$  es el parámetro de energía correspondiente a la posición  $\rho_{10}$ , entonces los valores de  $C^2$  de la ecuación (2.43) se pueden calcular fácilmente. De esta forma la solución a la ecuación de Schrodinger planteada, para el caso en que  $m = 0$  y  $\nu_2 = 0$  para

energías negativas, queda dada por la expresión (2.38) en donde la constante de normalización está determinada por la raíz cuadrada de la ecuación (2.43).

Si de manera general se hubiera normalizado la expresión (2.37) y no la (2.38), la constante de normalización hubiera quedado en términos de  $m$  y de  $\nu_2$ , así pues para cada conjunto de valores de  $m$  y de  $\nu_2$ , hay una constante diferente.

Por otro lado, como ya se tiene la solución (2.38) para la función de onda  $\Psi$  se puede construir adicionalmente la función de densidad de probabilidad parabólica  $P(\rho_1, \rho_2)$ , recordando que  $\rho = \Psi \Psi^* dV$  da la probabilidad de encontrar al electrón dentro de un volumen  $dV$ , así pues:

$$\rho = \left( \frac{2a_0 \nu}{Z} \right)^3 \frac{C^2}{2\pi} \sum_{s=0}^{\infty} C_s^{(0,s)} \rho_1^s \sum_{l=0}^{\infty} C_l^{(0,l)} \rho_1^l e^{-2\rho_2} \frac{(\rho_1 + \rho_2)}{4} d\rho_1 d\rho_2$$

Integrando con respecto a  $\rho$  y haciendo como antes  $\rho = t + s$  se obtiene que:

$$\rho = \left( \frac{2a_0 \nu}{Z} \right)^3 \frac{C^2}{4} \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p C_s^{(0,s)} C_{p-s}^{(0,s)} \rho_1^p e^{-2\rho_2} (\rho_1 + \rho_2) d\rho_1 d\rho_2$$

Por consiguiente la densidad de probabilidad parabólica queda como:

$$\rho = \frac{C^2}{4} \left[ \frac{2a_0 \nu}{Z} \right]^a e^{-2\rho_2} (\rho_1 + \rho_2) \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p C_s^{(0,1)} C_{p-s}^{(0,1)} \rho_1^p \quad (2.44)$$

Para una posición fija  $\rho_{10}$ ,  $\rho_1$  se va a encontrar acotada por  $0 \leq \rho_1 \leq \rho_{10}$  y  $\rho_2$  por  $0 \leq \rho_2 \leq \infty$ , entonces como ya se conocen los coeficientes  $C_s^{(0,1)}$ ,  $C_{p-s}^{(0,1)}$  y el valor del parámetro  $\nu$  correspondiente a  $\rho_{10}$ ,  $P(\rho_1, \rho_2)$  se puede calcular sin mayor problema.

## **CAPITULO TRES**

### **RESULTADOS NUMERICOS PARA ENERGIAS Y EIGENFUNCIONES**

## CAPITULO 3

### RESULTADOS NUMERICOS PARA ENERGIAS Y EIGENFUNCIONES

#### 3.1 INTRODUCCION

En este capítulo se presentan los resultados numéricos obtenidos para las energías, para el eigenvalor de la componente  $z$  del vector de Runge-Lenz y para la función de densidad de probabilidad parabólica del átomo de hidrógeno en el espacio semi-infinito, a medida que la frontera paraboloïdal se acerca al núcleo.

#### 3.2 ENERGIA Y COMPONENTE Z DEL VECTOR DE RUNGE-LENZ

Algunos de los valores numéricos más representativos para la energía y para el eigenvalor de la componente  $z$  del vector de Runge-Lenz para los estados  $\sigma$ , se muestran en las siguientes tabulaciones. En estas tablas también se dan el parámetro  $\nu$  de la energía con los correspondientes pares  $\nu_1, \nu_2$ . La designación de los estados, como ya se vió en la sección 2.4, está en términos del orden de excitación de los respectivos grados de libertad del sistema. Las distancias se dan en unidades del radio de Bohr y las energías en Rydbergs. En esta sección, además de presentar las gráficas que con estas tabulaciones se obtienen, se muestran las gráficas correspondientes a los estados  $\Pi$  y  $\delta$ .

TABLA I

ENERGIA Y PARAMETROS DE ENERGIA PARA LOS ESTADOS  $\sigma$   
DEL ATOMO DE HIDROGENO EN UN ESPACIO SEMI-INFINITO  
LIMITADO POR DIFERENTES SUPERFICIES PARABOLOIDALES

$(n, n, m)$	$E \left[ \frac{e^2}{2a_0} \right]$	$\nu$	$\nu_1$	$\nu_2$	$\frac{\nu_1 - \nu_2}{\nu}$	$\xi_0 [a_0]$
(0 0 $\sigma$ )	-1.00000	1	0	0	0	$\infty$
	-0.99980	1.0001	0.0001	0	0.0001	11.5565
	-0.99820	1.0009	0.0009	0	0.00057	7.0922
	-0.99800	1.001	0.001	0	0.00099	8.9721
	-0.99007	1.005	0.005	0	0.00498	7.1164
	-0.98224	1.009	0.009	0	0.00892	6.4312
	-0.90703	1.05	0.05	0	0.04762	4.4636
	-0.84158	1.09	0.09	0	0.08257	3.6345
	-0.27701	1.9	0.9	0	0.47368	2.0475
	-0.17361	2.4	1.4	0	0.58333	1.8678
	-0.01384	6.5	7.5	0	0.88235	1.5381
0.00000	$\infty$	$\infty$	0	1.00000	1.4458	
(0 1 $\sigma$ )	-0.25000	2	0	1	-0.50000	$\infty$
	-0.24752	2.01	0.01	1	-0.49254	12.5540
	-0.23795	2.05	0.05	1	-0.46342	8.7146
	-0.22893	2.09	0.09	1	-0.43541	7.3524
	-0.22676	2.1	0.1	1	-0.42857	7.1144
	-0.18904	2.3	0.3	1	-0.30435	4.8310
	-0.11891	2.9	0.9	1	-0.63448	3.1251
	-0.09183	3.3	1.3	1	0.09091	2.7182
	-0.06575	3.9	1.9	1	0.23077	2.3824
	-0.04000	5	3	1	0.40000	2.0789
	-0.01208	9.1	7.1	1	0.67033	1.7335
0.00000	$\infty$	$\infty$	1	1.00000	1.4458	
(0 2 $\sigma$ )	-0.11111	3	0	2	-0.66667	$\infty$
	-0.11074	3.005	0.005	2	-0.66389	21.2785
	-0.11045	3.009	0.009	2	-0.66168	19.1767
	-0.10750	3.05	0.05	2	-0.63934	12.9656
	-0.10473	3.09	0.09	2	-0.61812	10.8703
	-0.07716	3.6	0.6	2	-0.38889	5.0834
	-0.06250	4	1	2	-0.25000	4.0000
	-0.04216	4.87	1.87	2	-0.02669	2.0137
	-0.03004	5.77	2.77	2	0.15345	2.5702
	-0.01929	7.2	4.2	2	0.30556	2.1228
	-0.01000	10	7	2	0.50000	1.9304
0.00000	$\infty$	$\infty$	2	1.00000	1.4458	
(0 3 $\sigma$ )	-0.06250	4	0	3	-0.75000	$\infty$
	-0.06188	4.02	0.02	3	-0.74129	21.6861
	-0.06097	4.05	0.05	3	-0.72839	17.2166
	-0.05978	4.09	0.09	3	-0.71148	14.3882
	-0.05949	4.1	0.1	3	-0.70732	13.8900
	-0.04978	4.5	0.5	3	-0.55556	7.1098
	-0.04165	4.9	0.9	3	-0.42357	5.2634
	-0.03845	5.1	1.1	3	0.37155	4.7530
	-0.02441	6.4	2.4	3	0.99375	3.2212
	-0.01772	7.5	3.5	3	0.73667	2.7244
	-0.00592	17	7	3	0.46154	1.8802
0.00000	$\infty$	$\infty$	3	1.00000	1.4458	

TABLA I

ENERGIA Y PARAMETROS DE ENERGIA PARA LOS ESTADOS  $\sigma$   
DEL ATOMO DE HIDROGENO EN UN ESPACIO SEMI-INFINITO  
LIMITADO POR DIFERENTES SUPERFICIES PARABOLOIDALES

$(n, n, m)$	$E \left[ \frac{e^2}{2a_0} \right]$	$\nu$	$\nu_1$	$\nu_2$	$\frac{\nu_1 - \nu_2}{\nu}$	$\zeta_0 [a_0]$
(1 0 $\sigma$ )	-0.25000	2	1	0	0	$\infty$
	-0.24876	2.005	1.005	0	0.50125	24.6928
	-0.22676	2.1	1.1	0	0.52381	16.0106
	-0.20661	2.2	1.2	0	0.54546	14.0347
	-0.17361	2.4	1.4	0	0.58333	12.2170
	-0.12755	2.8	1.8	0	0.64266	10.6677
	-0.08153	3.5	2.5	0	0.71429	9.5722
	-0.06250	4	3	0	0.75000	9.1771
	-0.03698	5.2	4.2	0	0.80769	8.6684
	-0.02770	6	5	0	0.83333	8.4804
	-0.01876	7.3	6.3	0	0.86301	8.2858
0.00000	$\infty$	$\infty$	0	1.00000	7.6179	
(1 1 $\sigma$ )	-0.11111	3	1	1	-0.50000	$\infty$
	-0.10406	3.1	1.1	1	0.03226	23.6347
	-0.09766	3.2	1.2	1	0.06250	20.4144
	-0.09183	3.3	1.3	1	0.09091	18.5726
	-0.08575	3.4	1.4	1	0.12000	17.0000
	-0.04938	4.5	2.5	1	0.33333	12.3070
	-0.04000	5	3	1	0.40000	11.4714
	-0.01208	9.1	7.1	1	0.67033	9.2171
	-0.00826	11	9	1	0.72727	8.8794
	-0.00691	12.03	10.03	1	0.77307	8.7501
	-0.00346	17	15	1	0.82353	8.3758
0.00000	$\infty$	$\infty$	1	1.00000	7.6179	
(1 2 $\sigma$ )	-0.06250	4	1	2	-0.66667	$\infty$
	-0.05408	4.3	1.3	2	-0.16279	24.2020
	-0.04938	4.5	1.5	2	-0.11111	21.0306
	-0.04216	4.87	1.87	2	-0.08669	17.8228
	-0.03952	5.03	2.03	2	0.00596	16.9149
	-0.03004	5.77	2.77	2	0.13345	14.2960
	-0.02778	6	3	2	0.16667	13.7657
	-0.01029	7.2	4.2	2	0.30556	12.0021
	-0.01552	8	5	2	0.37500	11.3072
	-0.01291	8.6	5.6	2	0.43182	10.8050
	-0.00494	12	9	2	0.58333	9.6866
0.00000	$\infty$	$\infty$	2	1.00000	7.6179	

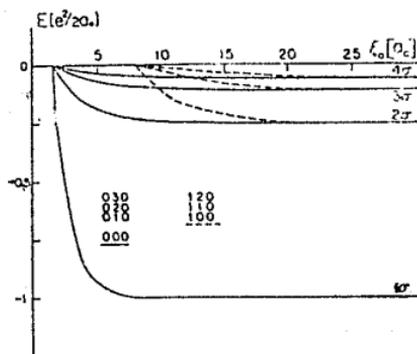


fig. 4a Curvas de energía para los estados sigma como función de la posición

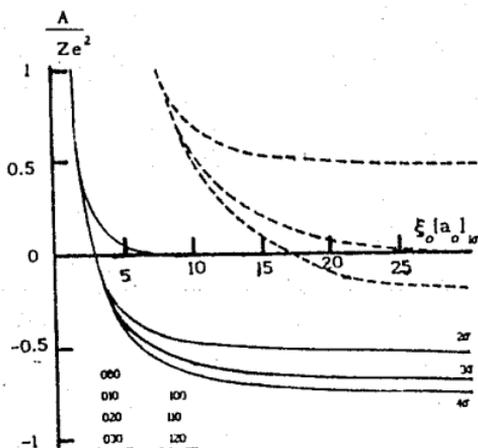


fig. 4b Curvas del eigenvalor de la componente z del vector de Runge-Lenz como función de la posición para los estados sigma

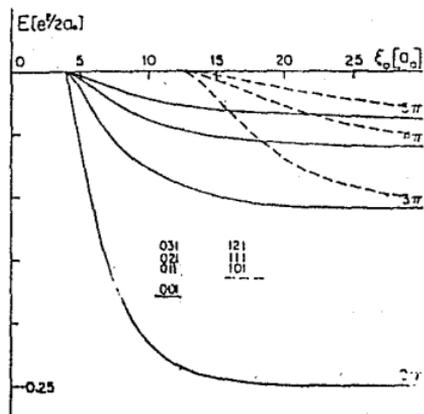


fig. 5a Curvas de energía para los estados  $\pi_l$  como función de la posición

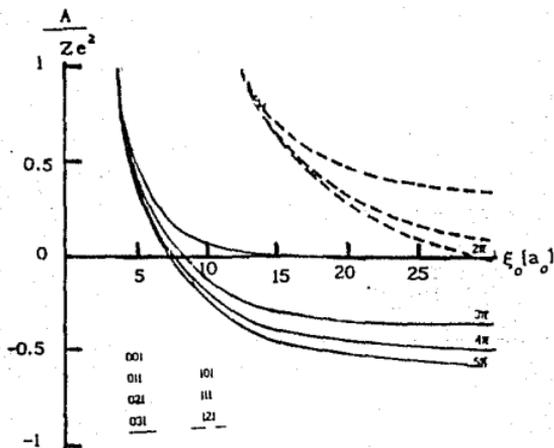


fig. 5b Curvas del eigenvalor de la componente  $z$  del vector de Runge-Lenz como función de la posición para los estados  $\pi_l$

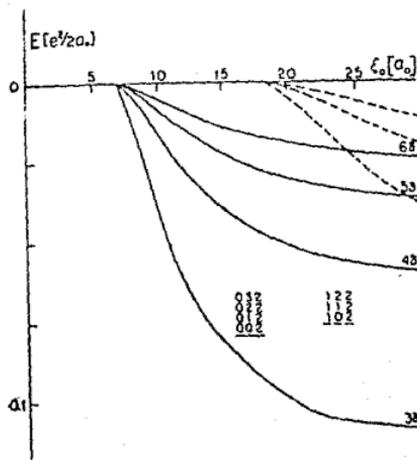


fig. 6a Curvas de energía para los estados delta como función de la posición

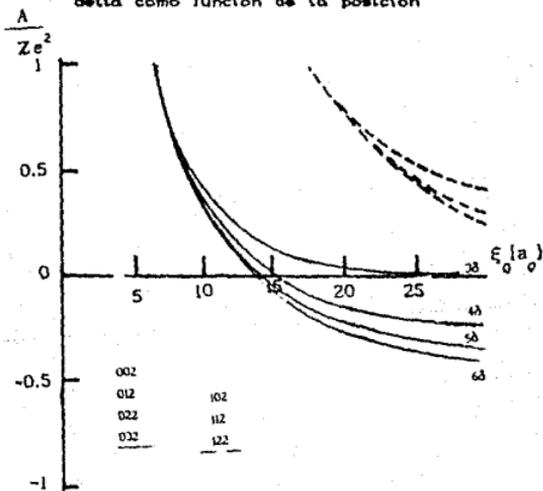


fig. 6b Curvas del eigenvalor de la componente z del vector de Runge-Lenz como función de la posición para los estados delta

Para discutir los resultados obtenidos para las energías, partimos del átomo de hidrógeno libre, situación que se presenta cuando la frontera paraboloidal está muy lejos. En este caso se tiene al número cuántico  $n = n_1 + n_2 + |m| + 1$  y la degeneración accidental  $n_1 + n_2 + 1$  para cada valor de  $m$ . Tomando en cuenta todos los posibles valores para  $m$ , se obtiene la bien conocida degeneración accidental  $n^2$ . A medida que la superficie paraboloidal se aproxima al núcleo del átomo de hidrógeno, es decir conforme  $\xi_0$  toma valores más pequeños, la degeneración accidental se pierde y las energías aumentan monótonicamente debido al efecto de confinamiento. Cuando la frontera paraboloidal llega a las posiciones definidas por la ecuación (2.41), los estados correspondientes tienen energía cero, y por consiguiente el átomo llega al umbral de ionización. Ya que al eigenvalor le corresponde más de una eigenfunción, entonces se presenta una degeneración de los estados en este caso.

Por otro lado, en lo referente a las gráficas que muestran la variación del eigenvalor de la componente  $z$  del vector de Runge-Lenz, se observa que cuando la frontera paraboloidal está muy lejos, se obtiene de la ecuación (2.28), el valor 
$$\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2 + |m| + 1}$$
 correspondiente al átomo de hidrógeno libre. Conforme la superficie paraboloidal se acerca al núcleo, los valores de  $A$  aumentan monótonicamente, siendo negativos cuando  $\nu_2 > \nu_1$ , cero cuando  $\nu_1 = \nu_2$  y positivos cuando  $\nu_1 > \nu_2$ . Para los diferentes estados las curvas alcanzan su valor máximo 1, en el momento de la ionización.

### 3.3 FUNCION DE DENSIDAD PARABOLICA

En las gráficas que se presentan en la siguiente página, se aprecia la variación de la función de densidad de probabilidad parabólica para el estado base conforme la pared se acerca al núcleo del átomo de hidrogeno. En el plano horizontal se encuentran graficadas las coordenadas parabólicas y en el eje vertical la función de densidad de probabilidad parabólica, ecuación (2.44). La parábola delimitadora en el plano corresponde al valor  $\xi = \xi_0$ .

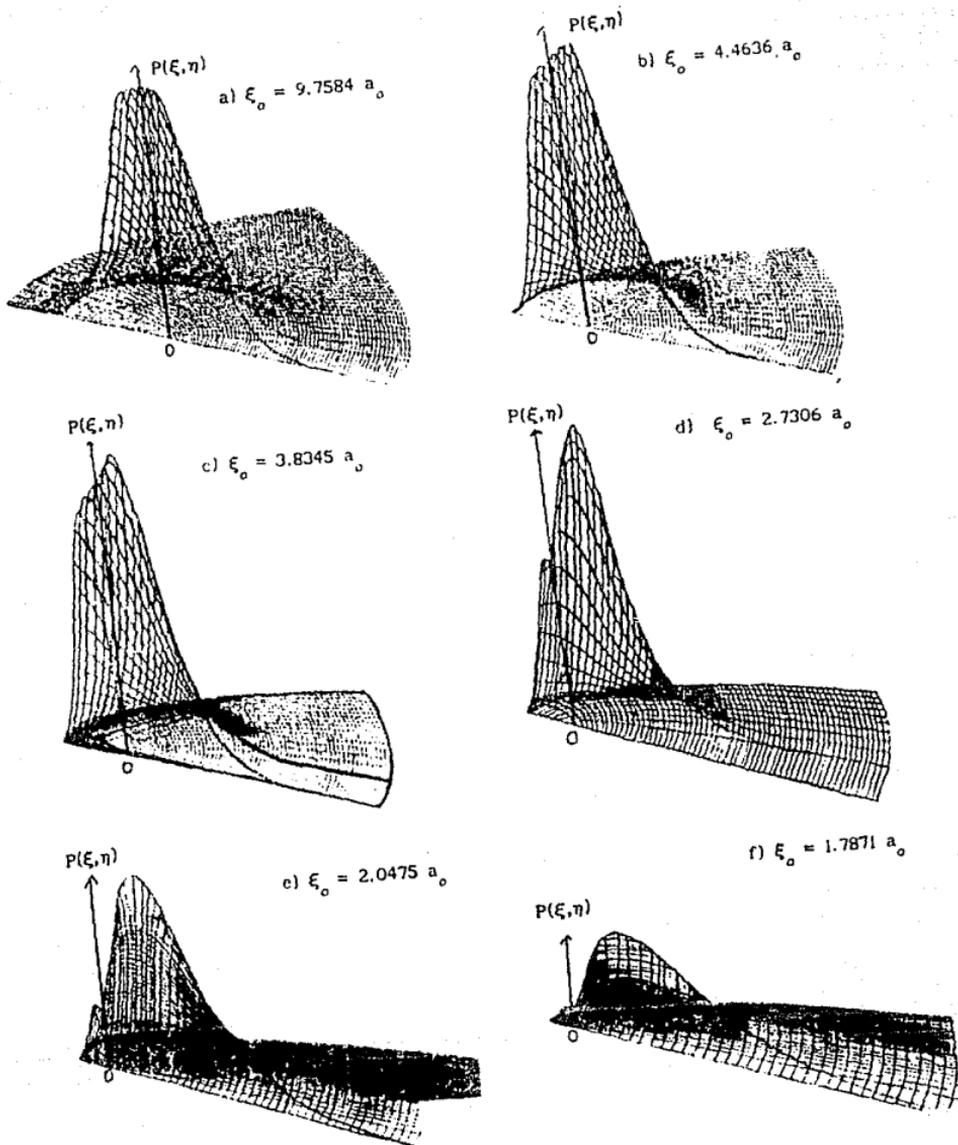


Fig. 7 Variación de la función de densidad de probabilidad parabólica a medida que la pared se aproxima al núcleo del átomo de hidrógeno para el estado base

En el átomo de hidrógeno libre, la probabilidad de hallar al electrón de un lado o del otro del núcleo es la misma. Cuando se introduce la superficie paraboloidal, la probabilidad de encontrar al electrón entre ésta y el núcleo, va disminuyendo conforme la frontera se aproxima a dicho núcleo, y consecuentemente aumenta la probabilidad de hallar al electrón del otro lado del núcleo, como lo muestra la fig. 7.

Las gráficas que a continuación se muestran, corresponden a un corte longitudinal de la función de densidad de probabilidad parabólica sobre el eje de las parábolas, en el que se tiene de un lado diferentes valores de  $\xi$  con  $\eta=0$  y del otro  $\xi=0$  barriendo varios valores de  $\eta$ . De estas gráficas se aprecian los valores numéricos que la función va adquiriendo para las diferentes posiciones de la frontera paraboloidal.

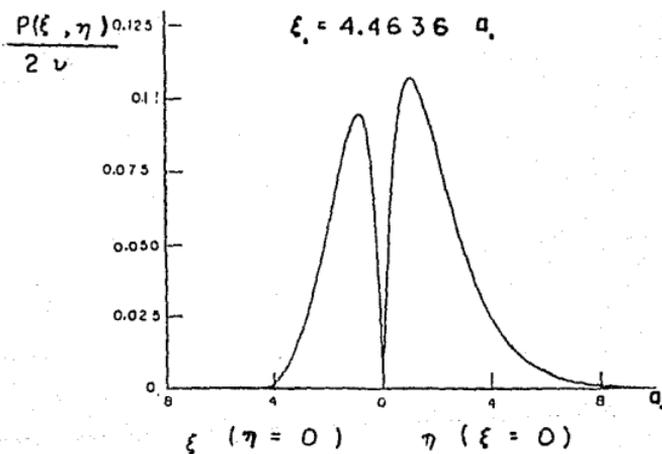
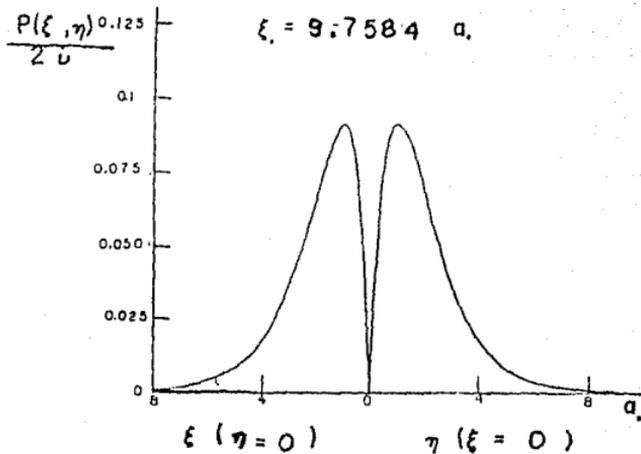


fig. 8 Corte longitudinal de la variación de la función de densidad de probabilidad parabólica para el estado base, para cuando la pared está en  $\xi_0 = 9.7584 a_0$  y en  $\xi_0 = 4.4636 a_0$ .

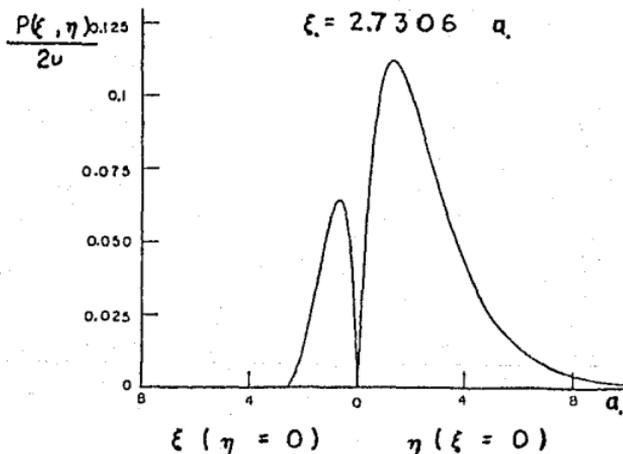
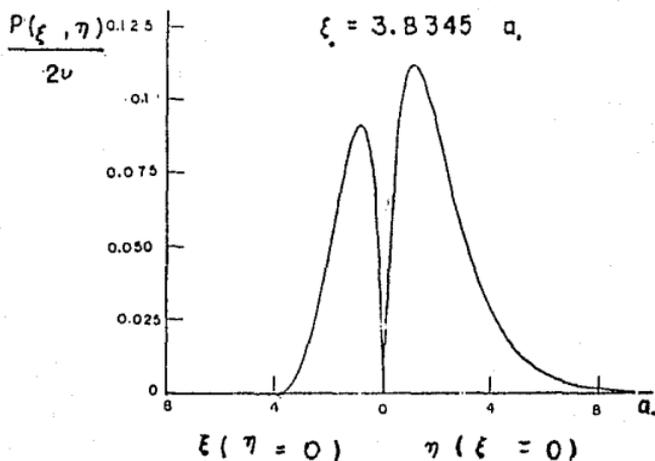
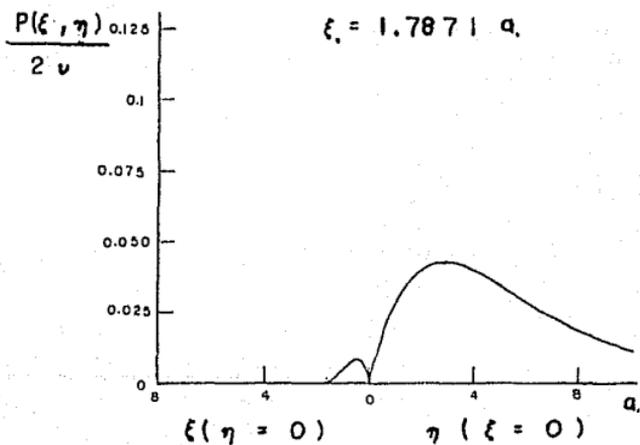
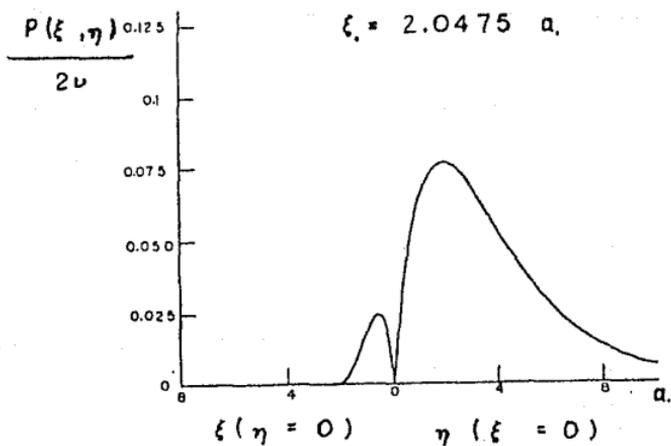


fig. 9 Corte longitudinal de la variación de la función de densidad de probabilidad parabólica para el estado base, para cuando la pared está en  $t_0 = 3.8345 a_0$  y en  $t_0 = 2.7306 a_0$



**Fig.10** Corte longitudinal de la variación de la función de densidad de probabilidad parabólica para el estado base, para cuando la pared está en  $\xi_0 = 2.0475 a_0$  y en  $\xi_0 = 1.7871 a_0$ .

De las figuras 8, 9 y 10, nuevamente se aprecia el hecho de que conforme la superficie paraboloidal se aproxima al núcleo del átomo de hidrógeno, va aumentando la probabilidad de hallar al electrón del otro lado del núcleo. Además se observa que a partir de la posición  $\xi_0 = 2.7306 a_0$ , es notable que la oscilación de la función de densidad de probabilidad parabólica, se va alargando en la región en la cual  $\xi = 0$ , ya que de este lado  $\eta \rightarrow \infty$ . Además, los máximos alcanzados por la función para  $\xi_0 = 2.0475 a_0$  y  $\xi_0 = 1.7871 a_0$  en la zona en que  $\xi = 0$ , son menores que los valores alcanzados para posiciones mayores, debido a la presencia del factor  $e^{-\frac{\eta}{a_0 \nu}}$  que aparece en la expresión (2.44).

## **CAPITULO CUATRO**

**PROPIEDADES DEL ATOMO DE HIDROGENO  
CONFINADO EN UN ESPACIO SEMI-INFINITO  
LIMITADO POR PAREDES PARABOLOIDALES**

## CAPITULO 4

### PROPIEDADES DEL ATOMO DE HIDROGENO CONFINADO EN UN ESPACIO SEMI-INFINTO LIMITADO POR PAREDES PARABOLOIDALES

#### 4.1 INTRODUCCION

En este capítulo se usan las funciones de onda obtenidas en los capítulos 2 y 3 para calcular la constante de estructura hiperfina, en sus componentes isotrópica y anisotrópica, el momento dipolar eléctrico y la presión del átomo de hidrógeno en el espacio semi-infinito. El estudio se limita al estado base, presentándose en cada caso la variación de estas propiedades a medida que la pared se va acercando al núcleo del átomo de hidrógeno. Es importante hacer notar que el desarrollo que aquí se hace sobre la presión, es diferente a los que ya se han hecho en la literatura<sup>(8)</sup>, ya que en el caso analizado en esta tesis, la presión no es uniforme, sino que varía para cada punto de la superficie paraboloidal.

#### 4.2 CONSTANTE DE ESTRUCTURA HIPERFINA

La llamada estructura hiperfina tiene su origen en la interacción dipolar magnética entre el momento magnético del electrón y el campo magnético debido al núcleo. Esta interacción da lugar al desdoblamiento de cada una de las componentes individuales de un multiplete atómico, siendo el orden de separación entre las líneas resultantes, 3 órdenes de magnitud menores que la separación entre las líneas de la estructura fina.

El hamiltoniano de la interacción entre el momento magnético del electrón y el campo magnético debido al núcleo es<sup>(14)</sup>:

$$\hat{H}_{\text{mag}} = - \vec{\mu}_e \cdot \vec{B}_N$$

en donde:

$$\vec{B}_N = \frac{8\pi}{3} \vec{\mu}_N \delta(\vec{r}) + \frac{3(\vec{\mu}_N \cdot \vec{r})\hat{r} - \vec{\mu}_N \hat{r}^2}{r^4}$$

En teoría de perturbación a primer orden, los corrimientos hiperfinos de la energía están dados por el valor esperado del hamiltoniano  $\hat{H}_{\text{mag}}$ . Entonces escribiendo en la expresión para éste a los momentos magnéticos del electrón y del núcleo respectivamente como:

$$\begin{aligned} \vec{\mu}_e &= -g_e \beta \vec{S} \\ \vec{\mu}_N &= g_N \beta_N \vec{I} \end{aligned}$$

en donde  $g_e$  es el factor giromagnético del electrón,  $g_N$  es el factor giromagnético del núcleo,  $\beta$  el magnetón de Bohr y  $\beta_N$  el magnetón nuclear, se llega a que:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \frac{-8\pi}{3} g_e \beta g_N \beta_N |\Psi(0)|^2 \langle \vec{S} \cdot \vec{I} \rangle + \langle \vec{S} \cdot \vec{I} \rangle$$

En el primer término se reconoce la presencia del término de contacto de Fermi, que es la parte isotrópica de la constante de

estructura hiperfina, a saber:

$$A_{iso} = \frac{8\pi}{3} \epsilon_0 \beta \epsilon_N \beta_N |\Psi(0)|^2 \quad (4.1)$$

La ecuación (4.1) generalmente se da en unidades de momento magnético nuclear, o sea en unidades de  $\beta_N \epsilon_N$ . En tal caso  $A_{iso}$  posee dimensiones de campo magnético, es decir de gauss, o lo que es más común de milliteslas. En el segundo término, las componentes anisotrópicas de la matriz del desdoblamiento hiperfino, están dadas por el valor esperado del operador Dipolo-Dipolo dado por:

$$A_{ij}^0 = \epsilon_0 \beta \epsilon_N \beta_N \left\langle \Psi \left| \frac{3x_i x_j - r^2 \delta_{ij}}{r^5} \right| \Psi \right\rangle \quad (4.2)$$

en donde los índices  $i, j = 1, 2, 3$  se refieren a las componentes correspondientes de las coordenadas cartesianas. Además el cero que aparece como superíndice indica precisamente que la traza de la matriz es cero.

Sustituyendo la ecuación (2.38) para  $\rho_1 = \rho_2 = 0$  en (4.1) se tiene que:

$$\frac{A_{iso}}{\epsilon_0 \beta} = \frac{4}{3} \epsilon_N \beta_N G^2 \quad (4.3)$$

Como ya se conoce  $G^2$ , entonces la ecuación (4.3) fácilmente se puede calcular, a medida que la pared se acerca al núcleo.

Por otro lado, como se tiene simetría de rotación alrededor del eje z, de la expresión (4.2) se sigue inmediatamente que:

$$A_{ij}^0 = 0 \quad i \neq j \quad (4.4)$$

$$A_{11}^0 = A_{22}^0 = \frac{1}{2} A_{33}^0 \quad (4.5)$$

y por consiguiente se necesita calcular explícitamente sólo una de las componentes diagonales. Así pues, la componente axial para el estado base es:

$$A_{33}^0 = \frac{4G^2}{\pi} \sum_{s=0}^{\infty} G_s^{(0,1)} \sum_{l=0}^{\infty} G_l^{(0,1)} \int_0^{\rho_1} \int_0^{\rho_2} \int_0^{2\pi} \rho_1^{s+1} e^{-2\rho_2} \left[ \frac{3(\rho_2 - \rho_1)^2 - (\rho_1 + \rho_2)^2}{(\rho_1 + \rho_2)^6} \right] (\rho_1 + \rho_2) d\rho_1 d\rho_2 d\phi_1$$

El integrando de la triple integral que aparece en la expresión anterior, tiene una singularidad integrable en  $\rho_1 = \rho_2 = 0$ , la cual de acuerdo con el método de Stephen y Auffray<sup>(17)</sup>, da la contribución:

$$\lim_{k \rightarrow 0} \int_0^k d\rho_1 \rho_1^s \int_{k+\rho_1}^k d\rho_2 e^{-2\rho_2} \frac{\rho_1^2 - 4\rho_1\rho_2 + \rho_2^2}{(\rho_1 + \rho_2)^4} = \frac{\delta_{p,0}}{6} \quad (4.6)$$

entonces, ahora se procede a resolver la integral:

$$T_p(\rho_{10}) = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{4G^2}{\pi} \sum_{s=0}^{\infty} C_s^{(0,1)} \sum_{l=0}^{\infty} C_l^{(0,1)} \int_0^{\rho_{10}} \int_0^{\rho_1} \int_0^{2\pi} \rho_1^{s+l} e^{-2\rho_2} \left[ \frac{3(\rho_2 - \rho_1)^2 - (\rho_1 + \rho_2)^2}{(\rho_1 + \rho_2)^5} \right] X(\rho_1 + \rho_2) d\rho_1 d\rho_2$$

integrando primero con respecto a  $\rho$  y haciendo  $p = s + t$ , después de algunos cálculos se tiene que:

$$T_p(\rho_{10}) = 4G^2 \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p C_s^{(0,1)} C_{p-s}^{(0,1)} \int_0^{\rho_{10}} \rho_1^p \left\{ \int_0^{\infty} \frac{e^{-2\rho_2}}{(\rho_1 + \rho_2)^2} d\rho_2 - 6\rho_1 \int_0^{\infty} \frac{e^{-2\rho_2}}{(\rho_1 + \rho_2)^2} d\rho_2 + 6\rho_1^2 \int_0^{\infty} \frac{e^{-2\rho_2}}{(\rho_1 + \rho_2)^4} d\rho_2 \right\} d\rho_1$$

resolviendo por partes las 3 integrales que están en el paréntesis y simplificando términos, se llega a lo siguiente:

$$T_p(\rho_{10}) = 4G^2 \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p C_s^{(0,1)} C_{p-s}^{(0,1)} \left[ \frac{4\rho_{10}^{p+1}}{p+1} + \frac{4\rho_{10}^{p+2}}{p+2} + \int_0^{\rho_{10}} (-2 - 12\rho_1 - 8\rho_1^2) \rho_1^p \int_0^{\infty} \frac{e^{-2\rho_2}}{\rho_1 + \rho_2} d\rho_2 \right]$$

haciendo el cambio de variable a  $t = 2\rho_2 + 2\rho_1$  se obtiene :

$$T_p(\rho_{10}) = 4 G^2 \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p C_s^{(0,1)} C_{p-s}^{(0,1)} \left[ \frac{4\rho_{10}^{p+1}}{p+1} + \frac{4\rho_{10}^{p+2}}{p+2} - 2 \int_0^{\rho_{10}} (1 + 6\rho_1 + 4\rho_1^2) \rho_1^p e^{2\rho_1} \int_{2\rho_1}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt d\rho_1 \right]$$

en donde se reconoce que en el último término aparece la integral exponencial definida como<sup>(40)</sup>:

$$\int_x^{\infty} \frac{e^{-u}}{u} du = E_1(x)$$

con esto se llega a que:

$$T_p(\rho_{10}) = 4 G^2 \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p C_s^{(0,1)} C_{p-s}^{(0,1)} \left[ \frac{4\rho_{10}^{p+1}}{p+1} + \frac{4\rho_{10}^{p+2}}{p+2} - 2 \int_0^{\rho_{10}} (1 + 6\rho_1 + 4\rho_1^2) \rho_1^p e^{2\rho_1} E_1(2\rho_1) d\rho_1 \right] \quad (4.7)$$

expresión que fue evaluada a través de una cuadratura Gauss-Legendre<sup>(40)</sup>.

Así pues, uniendo los resultados (4.6) y (4.7), finalmente se tiene que la parte anisotrópica de la constante de estructura hiperfina adquiere la forma:

$$A_{\text{is}}^0 = A_{\text{is}} \left[ \frac{1}{2} + 3 \sum_{p=0}^m \sum_{s=0}^p C_{\bullet}^{(0,s)} C_{p-s}^{(0,s)} T_p(\rho_{10}) \right] \quad (4.8)$$

donde  $T_p(\rho_{10})$  está dada de acuerdo a la expresión (4.7).

A continuación se presentan tabulados algunos de los valores más representativos tanto para la parte isotrópica, así como para la parte anisotrópica de la constante de estructura hiperfina, a medida que la pared se acerca al núcleo del átomo de hidrógeno. También se muestran las curvas que con estas tabulaciones se construyeron.

TABLA II

COMPONENTES ISOTROPICA Y ANISOTROPICA DE LA CONSTANTE DE ESTRUCTURA HIPERFINA PARA EL ATOMO DE HIDROGENO CONFINADO EN UN ESPACIO SEMI-INFINITO LIMITADO POR SUPERFICIES PARABOLOIDALES

$\zeta_0 [a_0]$	$\frac{A_{\text{is}}^0}{\epsilon_0 \beta} [mT]$	$\frac{A_{\text{ns}}^0}{\epsilon_0 \beta} [mT]$
10.0100	50.8918	0.0000
9.7585	50.9826	0.0000
8.9721	51.2222	0.0000
7.1164	42.4805	0.0000
6.4312	53.4566	0.0000
4.4636	59.1818	0.0000
3.8345	61.8336	0.0402
2.0475	42.3291	2.3571
1.8678	30.3252	2.7534
1.7871	23.8069	2.4572
1.7018	16.4188	2.2173
1.6631	13.0265	2.1811
1.6054	8.1465	1.7051
1.5814	6.2662	1.4391
1.5548	4.3488	1.1144
1.5381	3.2633	0.8999

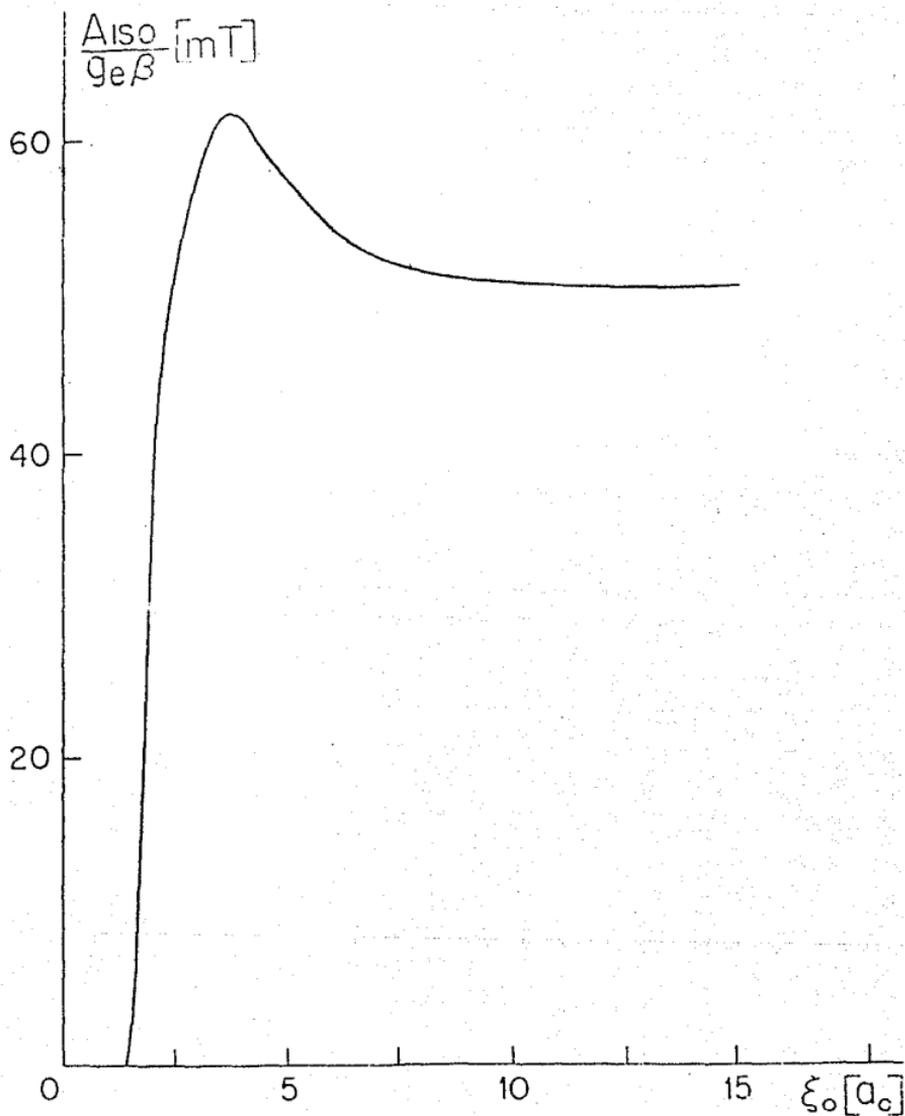


fig. 11 Variación de la componente isotrópica de la constante de estructura hiperfina, conforme la pared se aproxima al núcleo del átomo de hidrógeno.

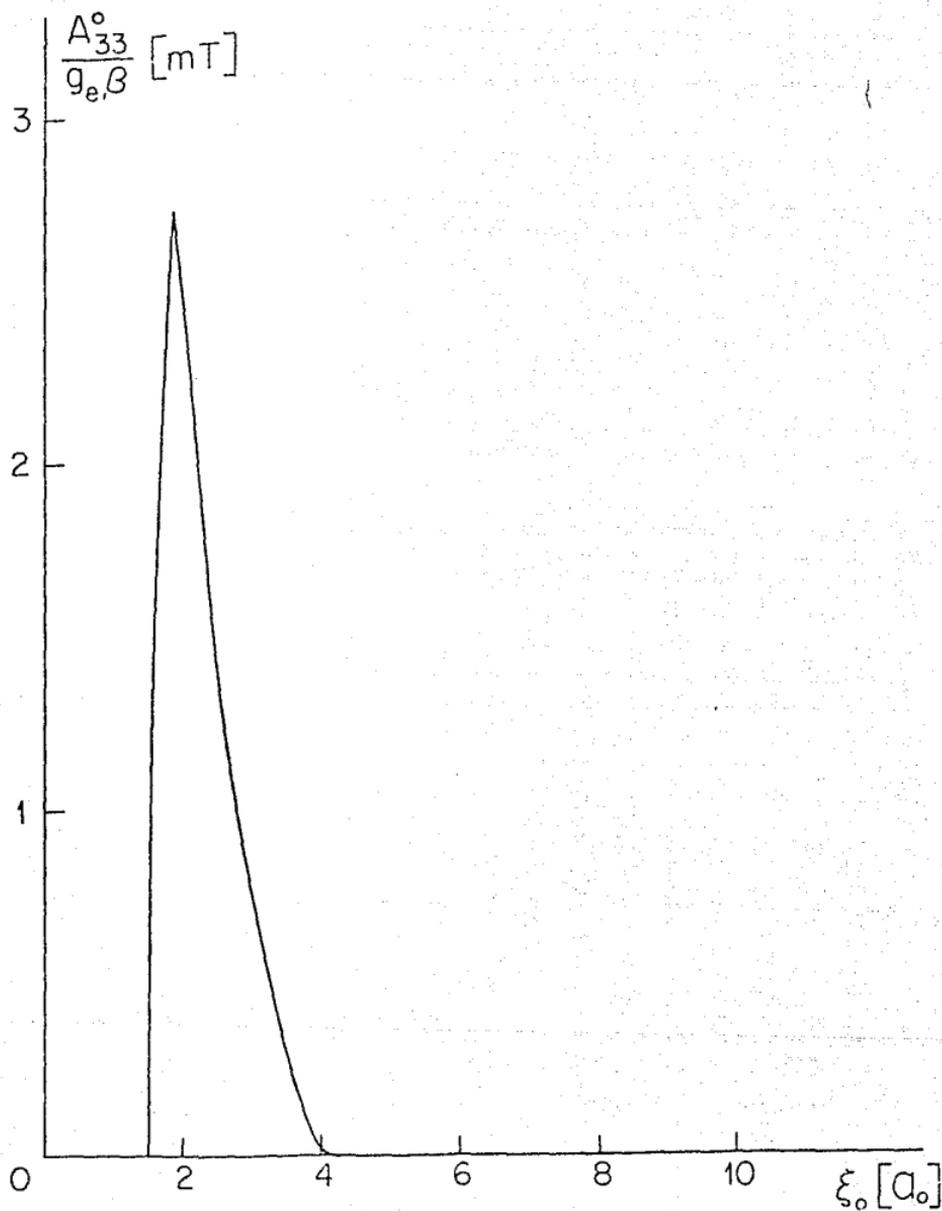


fig. 12 Variación de la componente anisotrópica de la constante de estructura hiperfina, conforme la pared se aproxima al núcleo del átomo de hidrógeno.

De la gráfica referente al desdoblamiento hiperfino isotrópico, se observa que para posiciones muy lejanas de la pared, i.e. del orden de 13 a 15  $a_0$ , se tiene el valor de 50.762 mT correspondiente al átomo de hidrógeno libre. A medida que la pared se va acercando al núcleo, se tienen lentos incrementos en esta componente. Sin embargo, hay cambios más apreciables conforme la pared se va aproximando al valor de  $\zeta_0 = 5a_0$ , hasta que oventualmente se alcanza un máximo, presentándose después una caída brusca. Así pues, el incremento en los valores de la componente isotrópica reflejan el aumento en la probabilidad de hallar al electrón en la posición del núcleo, que debido al efecto de confinamiento, la presencia de la pared introduce. El hecho que después de haber alcanzado un máximo, la curva presente una caída brusca, significa que una vez que el electrón está del otro lado del núcleo, la probabilidad de hallarlo en la posición de éste va a ir decreciendo, hasta que llega a ser cero, situación que corresponde al caso en el cual el átomo ha quedado ionizado.

Por su parte, la gráfica referente a la componente anisotrópica, muestra que para posiciones de la pared de alrededor de 4  $a_0$ , los valores de  $A_{33}^0$  se van rápidamente a cero. Si la pared se acerca de 4  $a_0$  a 3  $a_0$  y luego inclusive hasta 2  $a_0$ , se observa que los valores de la componente anisotrópica para estos casos crecen rápidamente, hasta que alrededor de 2  $a_0$  se presenta un máximo. Si la pared se acerca aún más al núcleo del átomo de hidrógeno, es apreciable el hecho de que la curva tiene una caída brusca, hasta que en la posición para la cual se ioniza el átomo, esta componente se anula. El signo positivo que los valores de  $A_{33}^0$  tienen, es una indicación de que la distribución electrónica es

preferentemente proliata. Que el signo sea positivo o negativo, depende de qué término sea mayor en la expresión (4.2), si  $3x_i x_j$  o  $r^2 \delta_{ij}$ .

### 4.3 MOMENTO DIPOLAR ELECTRICO

En el átomo de hidrógeno libre, el centro de carga del electrón coincide con la posición del núcleo y por ello no se tiene un momento dipolar eléctrico. Sin embargo, en el caso del átomo de hidrógeno confinado, el centro de carga del electrón, no está en la posición del núcleo y por lo tanto se tiene un momento dipolar eléctrico.

Si  $\vec{r}$  es el vector de posición relativo que va desde el núcleo al electrón, entonces  $\langle \vec{r} \rangle = \langle x \rangle \hat{i} + \langle y \rangle \hat{j} + \langle z \rangle \hat{k}$  y el momento dipolar eléctrico se puede escribir como:

$$\vec{d} = -e \langle \vec{r} \rangle \quad (4.9)$$

Debido a la simetría de rotación alrededor del eje z  $\langle x \rangle = 0$  y  $\langle y \rangle = 0$ , así que solamente es necesario calcular  $\langle z \rangle$ . Ya que  $z = \frac{\eta - \xi}{2}$  entonces se tiene que:

$$\langle z \rangle = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sum_{l=0}^{\infty} C_l^{(0,l)} \left( \frac{Z\xi}{2a_0\nu} \right)^l \sqrt{\xi\eta} \frac{\eta - \xi}{2} \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(0,n)} \left( \frac{Z\xi}{2a_0\nu} \right)^n e^{-\frac{Z\xi}{a_0\nu}} \left( \frac{\xi + \eta}{4} \right) dp d\xi d\eta$$

integrando con respecto a  $\rho$  y a  $\xi$  se llega a que:

$$\langle z \rangle = \frac{C^2}{8} \sum_{l=0}^{\infty} C_l^{(0,l)} \sum_{s=0}^{\infty} C_s^{(0,s)} \left( \frac{Z \xi}{2a_0 \nu} \right)^{l+s} \left[ \frac{\xi_0^{l+s+1}}{l+s+1} \int_0^{\infty} \eta^2 e^{-\frac{Z\eta}{a_0 \nu}} d\eta - \frac{\xi_0^{l+s+3}}{l+s+3} \int_0^{\infty} e^{-\frac{Z\eta}{a_0 \nu}} d\eta \right]$$

resolviendo las integrales que quedan, reconociendo la presencia de la función gamma en el primer término y haciendo  $p = l + s$ , después de algunas simplificaciones se obtiene finalmente que:

$$\langle z \rangle = \left( \frac{a_0 \nu}{Z} \right)^4 C^2 \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p C_s^{(0,s)} C_{p-s}^{(0,s)} \left[ \frac{\rho_{10}^{p+1}}{p+1} - \frac{\rho_{10}^{p+3}}{p+3} \right] \quad (4.10)$$

así que el momento dipolar, expresión (4.9), queda como:

$$\vec{d} = -\hat{k}e\langle z \rangle \quad (4.11)$$

con  $\langle z \rangle$  dada por (4.10).

De la tabulación y la gráfica que a continuación se muestran, es clara la variación monótonica del momento dipolar eléctrico del átomo de hidrógeno confinado, desde su valor asintótico nulo, hasta su valor infinito conforme  $\xi_0$  se va haciendo más pequeña. Esta variación es un reflejo del hecho de que la probabilidad de hallar al electrón del otro lado del núcleo vaya aumentando, de acuerdo con los resultados de la sección 3.3, dando

como consecuencia un aumento en los valores del momento dipolar.

TABLA III

MOMENTO DIPOLAR PARA EL ESTADO BASE DEL ATOMO DE HIDROGENO  
EN UN ESPACIO SEMI-INFINITO LIMITADO POR DIFERENTES SUPERFICIES  
PARABOLOIDALES

$\xi_0$ [a <sub>0</sub> ]	d [-ea <sub>0</sub> ]
10.0100	0.0041
9.7883	0.0101
8.9721	0.0219
7.1164	0.0693
6.4312	0.1026
4.4636	0.2682
3.8843	0.3976
2.0473	1.4728
1.8678	2.0051
1.7871	2.4199
1.7018	3.1358
1.6631	3.6430
1.6034	4.8540
1.5814	5.6583
1.5548	6.9636
1.5381	8.1669

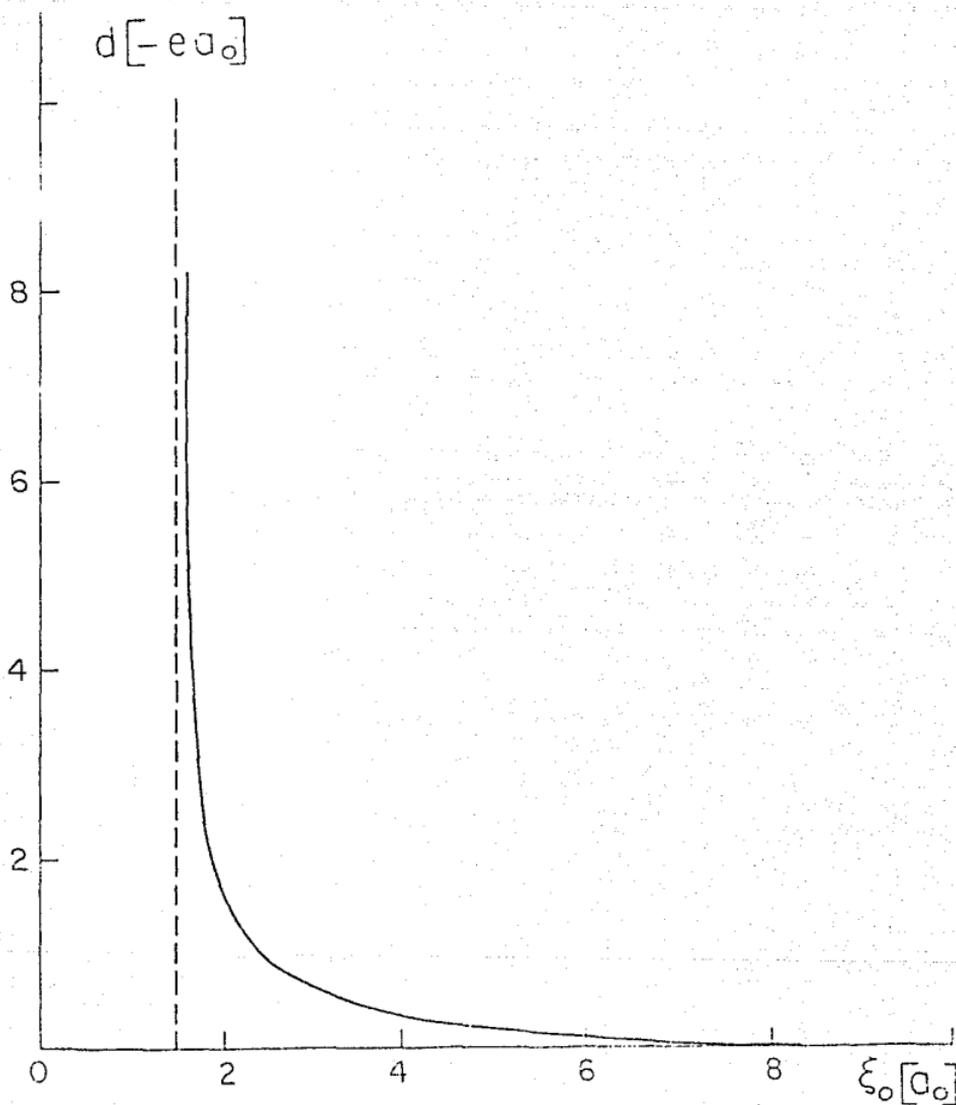


Fig. 13 variación del momento dipolar conforme la pared se aproxima al núcleo del átomo de hidrógeno

#### 4.4 PRESION

En lo referente a presión en átomos confinados, es importante señalar que en el trabajo de la referencia (8), el análisis que sobre la presión se hace únicamente se desarrolla para estados  $s$  en cajas esféricas, situación en la cual la presión es uniforme debido a la simetría que se tiene de la caja y del estado elegido. Sin embargo, si en vez de considerar estados  $s$ , se toman estados  $p$  en la caja esférica, es notable el hecho de que la presión no es uniforme, y que se anula en el nodo del ecuador, aumentando hacia los polos, conforme lo determinan las variaciones angulares de la densidad de probabilidad del electrón.

En el modelo que se está estudiando en esta tesis, la presión no es uniforme en los diferentes puntos de la pared paraboloïdal, así que es necesario evaluarla punto a punto. Para ello se introduce la densidad de energía  $\varepsilon(\xi_0, \eta, \rho) \Delta\eta \Delta\rho$  asociada con un elemento en forma de cilindro, alrededor de los puntos  $(\eta, \rho)$  con un área transversal  $h_\eta h_\rho \Delta\eta \Delta\rho$  que va desde  $\xi = 0$  hasta  $\xi = \xi_0$ , esto es:

$$\varepsilon(\xi_0, \eta, \rho) \Delta\eta \Delta\rho = \left[ \int_0^{\xi_0} h_z h_\eta h_\rho d\xi \Psi^* \hat{H} \Psi \right] \Delta\eta \Delta\rho \quad (4.12)$$

El cambio en la energía dada por la ecuación (4.12) conforme la pared se va acercando al núcleo infinitesimalmente, dividido entre el área de la sección transversal del elemento, da la presión:

$$P(\xi_0, \eta, \rho) = - \frac{1}{h_\eta h_\rho \Delta\eta\Delta\rho h_z} \frac{\partial}{\partial \xi_0} \varepsilon(\xi_0, \eta, \rho) \Delta\eta\Delta\rho \quad (4.13)$$

Para calcular explícitamente la ecuación (4.13) se introduce (2.38) en (4.12) y así se tiene:

$$\varepsilon(\xi_0, \eta, \rho) \Delta\eta\Delta\rho = \int_0^{\xi_0} d\xi \left( \frac{\xi + \eta}{4} \right) \sum_{l=0}^{\infty} C_l^{(0,l)} \left( \frac{Z\xi}{2a_0\nu} \right)^l e^{-\frac{\xi\eta}{2a_0\nu}} \hat{H} \sum_{s=0}^{\infty} C_s^{(0,s)} \left( \frac{Z\xi}{2a_0\nu} \right)^s X e^{-\frac{Z\eta}{2a_0\nu}} \frac{C^2}{2\pi} \Delta\eta\Delta\rho$$

Recordando de la expresión (2.5) que  $\hat{H}\Psi = E\Psi$ , haciendo  $p = s+l$  e integrando sobre  $\xi$ , se llega a que:

$$\varepsilon(\xi_0, \eta, \rho) \Delta\eta\Delta\rho = - \frac{Za^2}{2a_0\nu^2} \frac{C^2}{16\pi} e^{-\frac{Z\eta}{2a_0\nu}} \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p \left( \frac{Z}{2a_0\nu} \right)^p C_s^{(0,s)} C_{p-s}^{(0,s)} \left[ \frac{\xi_0^{p+2}}{p+2} + \frac{\eta \xi_0^{p+1}}{p+1} \right] \Delta\eta \Delta\rho$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación (4.13) y poniendo los correspondientes factores de escala, después de algunos cálculos se tiene que la presión adquiere la forma:

$$P = \frac{e^2 e^{-2\rho_2}}{a_0^4 \nu^2 4\pi (\rho_{10} + \rho_2)} \frac{\partial}{\partial \rho_{10}} \left\{ C^2 \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^p C_s^{(0,s)} C_{p-s}^{(0,s)} \left[ \frac{\rho_{10}^{p+2}}{p+2} + \frac{\rho_{10}^{p+1}}{p+1} \right] \right\} \quad (4.14)$$

La derivada respecto de  $\rho_{10}$  que aparece en la ecuación (4.14), se calculó numéricamente, fijando en cada caso un valor para  $\rho_2$  y variando  $\rho_{10}$ , en base a la definición:

$$\left. \frac{\partial}{\partial \rho_{10}} f(\rho_{10}) \right|_{\rho_{10}^{(m)}} = \frac{f(\rho_{10}^{(2)}) - f(\rho_{10}^{(1)})}{\rho_{10}^{(2)} - \rho_{10}^{(1)}}$$

donde  $\rho_{10}^{(m)}$  es el punto medio entre  $\rho_{10}^{(1)}$  y  $\rho_{10}^{(2)}$ .

Algunos de los puntos que se utilizaron para construir la curva en la que se aprecia la variación de la presión conforme se acerca la pared, se muestran en la siguiente tabulación:

TABLA IV

PRESION DEL ATOMO DE HIDROGENO CONFINADO EN UN SEMI-ESPACIO INFINITO LIMITADO POR SUPERFICIES PARABOLOIDALES, EN LOS VERTICES, i.e.  $\rho_2=0$ , Y EN LOS PUNTOS EN LOS QUE  $\rho_2=1$ .

$\zeta_0 [a_0]$	$P_{\rho_2=0} [Pa \times 10^{12}]$	$P_{\rho_2=1} [Pa \times 10^{12}]$
10.0100	1.6200	0.2700
9.7385	1.7192	0.2688
8.9721	1.4350	0.0251
7.1164	0.2599	0.0068
6.4312	0.0514	0.0045
4.4636	0.0217	0.0030
3.8345	0.0164	0.0035
2.0475	0.0074	0.0023
1.8678	0.0051	0.0020
1.7871	0.0032	0.0011
1.7018	0.0018	0.0007
1.6631	0.0009	0.0005
1.6054	0.00014	0.0002
1.5814	0.00013	0.0001
1.5548	0.00012	0.00009
1.5381	0.00011	0.00005

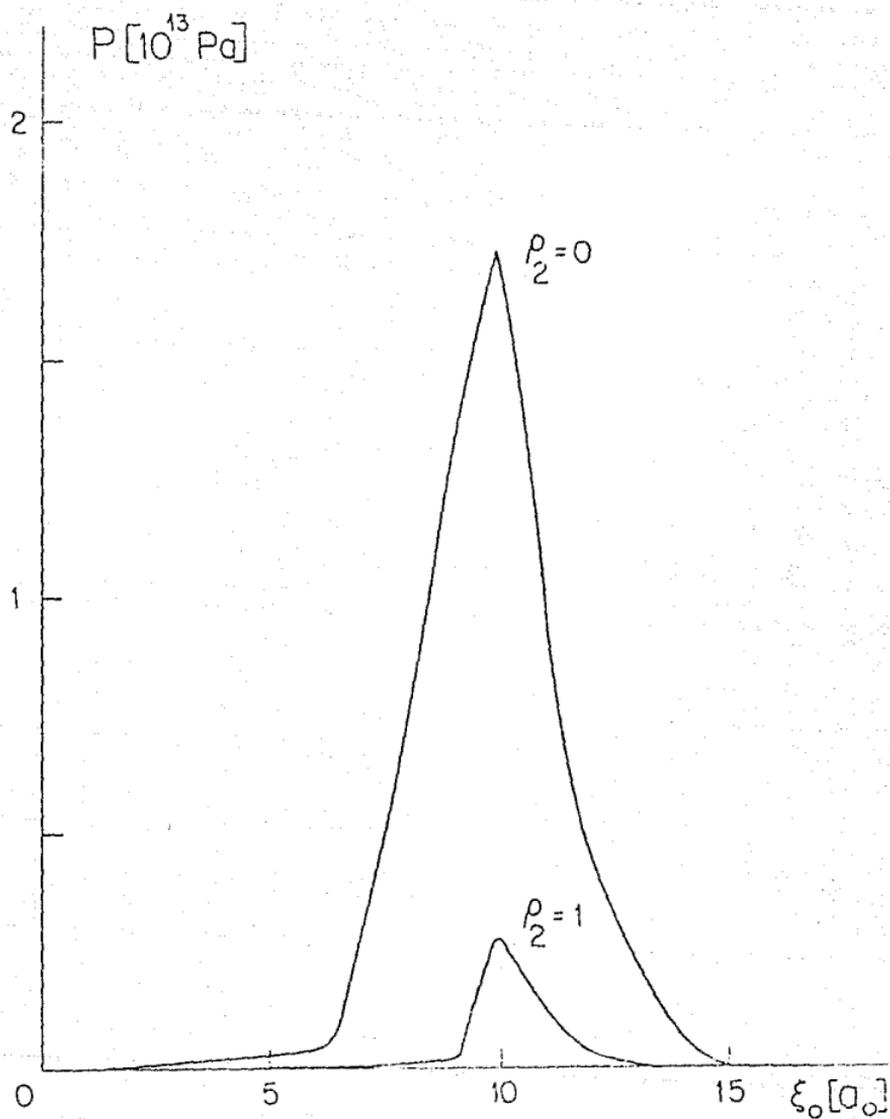


Fig. 14 Variación de la presión para  $\rho_2=0$  y  $\rho_2=1$  conforme la pared se aproxima al núcleo del átomo de hidrógeno

De la gráfica anterior se observa que ya desde posiciones de alrededor de  $14 a_0$ , el efecto de la presión es apreciable y que aumenta hasta llegar a un valor máximo para  $9.7385 a_0$ , para después disminuir rápidamente. El orden de magnitud de los datos experimentales que se tienen sobre presiones aplicadas a muestras de rocas es de cientos de MPa. Así que el modelo aquí estudiado, es consistente con el orden de magnitud que se ha reportado, cuando se toma en cuenta el factor de intensificación de esfuerzos<sup>(17)</sup>. Este simplemente nos dice la manera en la cual responde o se comporta, un determinado material, frente a ciertos estímulos externos. Por ejemplo, cuando se le aplica una cierta presión a un fluido, ésta se transmite uniformemente a través de todo su volumen, por lo que en cada punto de éste la presión es la misma. Sin embargo, en el caso que se está estudiando, la presión es diferente para cada punto de la superficie paraboloidal, como lo indican las 2 curvas mostradas en la fig. 14. El que el efecto de la presión no presente su variación máxima alrededor de  $2 a_0$  o de  $4 a_0$ , como las otras propiedades atómicas que se han estudiado aquí, es un reflejo del hecho de que para estas posiciones, la probabilidad de encontrar al electrón del otro lado del núcleo es mayor que la de encontrar al electrón entre éste y la pared. Si el electrón ya está prácticamente del otro lado del núcleo, entonces la presión que sobre éste puedan ejercer los átomos vecinos es menor que la presión que sobre él se ejerce cuando se está entre el núcleo y la pared.

## CAPITULO CINCO

## CONCLUSIONES

## CAPITULO 5

### CONCLUSIONES

En esta tesis se demostró que el átomo de hidrógeno confinado en un espacio semi-infinito limitado por una superficie paraboloidal, admite una solución exacta. Esto permitió el cálculo de algunas propiedades atómicas como la energía del sistema, la constante de estructura hiperfina, en sus componentes isotrópica y anisotrópica, el momento dipolar eléctrico y la presión.

En particular, la ionización y la presión del sistema atómico como funciones de la posición de la frontera paraboloidal, dan información física de utilidad para el entendimiento de la emisión de electrones por rocas comprimidas. Este análisis se llevará a cabo en otro trabajo. Por su parte, la comparación del desdoblamiento hiperfino y del momento dipolar eléctrico del átomo de hidrógeno en un espacio semi-infinito, con las propiedades del átomo libre, o del átomo atrapado dentro de un sólido, da una forma de precisar y de caracterizar los efectos de la superficie.

Por otro lado, el presente trabajo permitió a Ley-Koo reconocer que en el átomo de hidrógeno en un campo magnético muy intenso, el campo mismo confina de manera natural al electrón dentro de un paraboloides. Por ello es mejor formular este problema en coordenadas parabólicas en vez de coordenadas cilíndricas, que son las coordenadas que usualmente se han empleado. El que el electrón se confine en un paraboloides da por resultado el

rompimiento de la simetría de paridad, ya que las soluciones para  $z > 0$  son independientes de aquellas para  $z < 0$ , por lo que no tiene ningún sentido mezclarlas.

## APENDICE

```

PROGRAM PARABOLA (IN=BT,OUT=BT);
*****
ESTE PROGRAMA CALCULA LOS COEFICIENTES DE UN POLINOMIO QUE ES SOLUCION
DE LA ECUACION DE SCHROEDINGER EN COORDENADAS PARABOLICAS. ADEMAS CAL-
CULA LAS RAICES DE DICHO POLINOMIO, LA ENERGIA CORRESPONDIENTE ASI CO-
MUNEL VALOR DE NU EN CADA CASO.
*****

```

```

CONST
POSITIVA = 'P';
NEGATIVA = 'N';
MAXTAM1 = 100;
MAXTAM2 = 200;

```

```

/PE

```

```

TAMANO1 = 0..MAXTAM1;
TAMANO2 = 0..MAXTAM2;
ZTAM1 = 1..MAXTAM1;
ZTAM2 = 1..MAXTAM2;
POLI1 = ARRAY [TAMANO1] OF DOUBLE;
POLI2 = ARRAY [TAMANO2] OF DOUBLE;
ZPOLY1 = ARRAY [ZTAM1] OF DOUBLE;
ZPOLY2 = ARRAY [ZTAM2] OF DOUBLE;

```

```

VAR

```

```

DAT, SAL : TEXT;
AA, E, D, R, K, J, T, S, Q, V1, CN, AUX, CNMNS, CNUNO, CNMENOS : DOUBLE;
V, V11, VP, ENERGIES : DOUBLE;
IER1, m, CONT, N, H : INTEGER;
ENERGY : CHAR;
POLICOEFS, POLIEXFS : POLI1;
A1 : ZPOLY1;
Z1 : ZPOLY2;

```

```

PROCEDURE ZRPOLY ( A : ZPOLY1; IORD : INTEGER; VAR Z : ZPOLY2;
IER : INTEGER);
FORTRAN;

```

```

BEGIN

```

```

OPEN ( DAT, 'PARABOLA.DAT', OLD,, SEQUENTIAL);
RESET ( DAT );
OPEN ( SAL, 'PARABOLA.OUT', NEW,, SEQUENTIAL);
REWRITE ( SAL );

```

```

WRITELN ( SAL, 'DAME EL VALOR DE "m". RECUERDA QUE DEBE SER UN NUMERO ENTERO' );

```

```

READLN ( DAT, m );
WRITELN ( SAL, m:2 );
WRITELN ( SAL, 'FIJA UN VALOR PARA "V1"');
READLN ( DAT, V1);
WRITELN ( SAL, V1:6);
WRITELN ( SAL, 'FIJA UN VALOR PARA "V11"');

```

```

READLN (DAT,V1);
WRITELN (SAL,V1:6);
WRITELN (SAL,'DIME HASTA CUAL COEFICIENTE QUIERES CALCULAR');
READLN (DAT,H);
WRITELN (SAL,H:3);
WRITELN (SAL,'SI LA ENERGIA ES POSITIVA TECLEA P. SINO TECLEA N ');
READLN (DAT,ENERGY);
WRITELN (SAL,ENERGY);
WRITELN (SAL);

```

```

N := 0; (* PRIMERO SE INICIALIZAN LAS VARIABLES *)
CN := 1; (* CALCULO DEL COEFICIENTE CERO *)
CONT := N;
POLICOEFS[CONT] := CN;
POLIEXPS[CONT] := N;
WRITELN (SAL,'EL COEFICIENTE 0 ES ',POLICOEFS[CONT]);
CNMENOS := 0;
CONT := N + 1;

```

```

D := N + ABS(m) + 1;
R := N + 1;
E := D * R;
AA := 2 * V1 + ABS(m) + 1;
J := - (AA * CN);
CNUNO := J / E;
WRITELN (SAL,'EL COEFICIENTE 1 ES ',CNUNO);
POLICOEFS[CONT] := CNUNO;
POLIEXPS[CONT] := R;
CNMENOS := 1;
CN := CNUNO;

```

```

WHILE CONT <= ( H - 1 ) DO (* CALCULO DE LOS DEMAS COEFICIENTES *)
BEGIN

```

```

IF ENERGY = 'P' THEN
BEGIN
AUX := CNMENOS;
END
ELSE
BEGIN
AUX := - CNMENOS;
END;

```

```

R := R + 1;
N := N + 1;
CONT := CONT + 1;
T := - (AA * CN + AUX);
S := N + 1;
Q := N + ABS(m) + 1;
K := S * Q;
CNMAS := T / K;
WRITELN (SAL,'EL COEFICIENTE ',CONT:2,' ES ',CNMAS);
POLICOEFS[CONT] := CNMAS;

```

```
POLIEXPSCONTI := R;  
CNMENOS := CN;  
CN := CNMAS;
```

```
END;  
WRITELN ( SAL );
```

```
(* PREPARA EL ORDEN DE LOS COEFICIENTES PARA ZRPOLY1, QUE USA ZRPOLY (IMSL) *)
```

```
FOR CONT := 0 TO H DO  
  A1 [CONT - 1] := POLICEFS (H - CONT);
```

```
IER1 := 0;  
ZRPOLY1 (A1, H, Z1, IER1);
```

```
FOR CONT := 1 TO H + 1 DO  
  WRITELN (SAL, 'A1 [', CONT - 1:2, ']', A1 [CONT]:14,  
    'Z1 [', 2 * CONT - 1:2, ']', Z1 [2 * CONT - 1]:14,  
    'Z1 [', 2 * CONT - 1:2, ']', Z1 [2 * CONT]:14, ' ');
```

```
WRITELN ( SAL );
```

```
(* CALCULO DE LA ENERGIA *)  
V := V1 + V11 + ABS (m) + 1;  
WRITELN (SAL);  
WRITELN (SAL, 'NO VALE ', V);  
WRITELN (SAL);  
VP := V * V;
```

```
ENERGIES := 1/VP;  
IF ENERGY = 'P' THEN  
  WRITELN (SAL, 'LA ENERGIA ES ', ENERGIES)  
ELSE  
  WRITELN (SAL, 'LA ENERGIA ES - ', ENERGIES);
```

```
WRITELN ( SAL );
```

```
WRITELN ( SAL, 'YA TERMINE '); (* FIN DEL PROGRAMA *)
```

```
CLOSE ( DAT );  
CLOSE ( SAL );  
END.
```

ESTE PROGRAMA CALCULA LA CONSTANTE DE NORMALIZACION AL CUADRADO,  
LA CONSTANTE DE ESTRUCTURA HIPERFINA Y EL MOMENTO DIPOLAR

DOUBLE PRECISION AUXILIAR,S1,S2,SUMA,RR,RESULT,FINAL  
DOUBLE PRECISION RAIZ1,RAIZ2,RRR,FF,OTRO,RAIZ3,S22,S11  
DOUBLE PRECISION MOMENTO

DIMENSION COEF(0:30)

LECTURA DE LOS COEFICIENTES  
READ(S1,\*) COEF(IND),IND=0,30)

CALCULO DE LOS COEFICIENTES QUE SE NECESITAN

S1=0  
S11=0  
WRITE (6,\*) 'DAME EL VALOR DE LA RAIZ'  
READ (5,\*) RAIZ  
WRITE (6,\*) ' DAME EL VALOR DE V '  
READ (5,\*) V

DO P=0,30  
S2=0  
S22=0  
DO S=0,P

ICONT=P-S  
IS=S

AUXILIAR= COEF(ICONT)\*COEF(IS)

RAIZ1=(RAIZ\*\*(P+2))/(P+2)

RAIZ2=(RAIZ\*\*(P+1))/(2\*(P+1))

SUMA=RAIZ1+RAIZ2

FINAL=SUMA\*AUXILIAR

S2=S2+FINAL

RAIZ3=(-1)\*(RAIZ\*\*(P+3))/(P+3)

OTRO= (RAIZ3+RAIZ2)\*AUXILIAR

S22=S22+OTRO

ENDDO

S1=S1+S2

S11=S11+S22

ENDDO

CALCULO DE LA ESTRUCTURA HIPERFINA EN SU PARTE ISOTROPICA

```

WRITE(6,*) ' LA SUMA DE TODO ES ',S1
RESULT=1/(S1*(V**3))
WRITE(6,*) ' LA CTE ES ',RESULT
RR=(RESULT*4)/3
RRR=RR*(5.5852)*(5.05038E-23)
FF=RRR/((5.2917E-09)**3)
WRITE (6,*) 'CTE DE ESTRUCTURA HIPOEFINA ES',FF

CALCULO DEL MOMENTO DIPOLAR

MOMENTO=RESULT*(V**4)*S11
WRITE(6,*) 'EL MOMENTO DIPOLAR ES ',MOMENTO
END

```

C ESTE PROGRAMA CALCULA LA PARTE ANISOTROPICA DE LA CONSTANTE DE  
C ESTRUCTURA HIPERFINA

DOUBLE PRECISION SI,SP,COEFICIENTES,COEF,TODOS,RESULTADO  
DOBLE PRECISION UNAPARTE,OTRAPARTE,INTEGRAL,COMPLETA  
DOBLE PRECISION ACUMULA,PORTE,CORCHETE,MMEI,ARG,EI  
INTEGER I,II,III,P,S,ICONT,IS,IOPT,IER

DIMENSION COEF(0:30),PES0Z(1:40),Z(1:40),RAIZ(18),AISO(18)  
DIMENSION R01(1:40)

C "DATA RAIZ" GUARDA LOS VALORES DE LAS RAICES QUE SE VAN A USAR

DATA RAIZ / 5.0030031,4.8768051,4.5419850,4.4815708,4.0807266,  
1 3.5405103,3.1868913,2.1255120,1.7589435,0.53981595,0.3891319,  
2 0.31911981,0.24311114,0.20798728,0.15436057,0.13178016,  
3 0.10649034,0.090473816 /

C "DATA AISO" DA LOS VALORES DE LA PARTE ISOTROPICA REQUERIDA

DATA AISO /50.89177,30.98265,51.19157,31.32220,51.56557,52.48049,  
1 53.45660,59.18183,61.85364,42.32907,30.32517,23.80889,16.41878,  
2 13.02647,8.14654,6.26624,4.34279,3.26334 /

C READ(110,\*) (PES0Z(II),II=0,14)

C READ(116,\*) (PES0Z(II),II=1,49)

READ(2,\*) (PES0Z(II),II=1,40)

C READ(0,\*) (PES0Z(II),II=1,20)

C READ(34,\*) (PES0Z(II),II=1,36)

C READ(114,\*) (PES0Z(II),II=1,32)

C READ(8,\*) (PES0Z(II),II=1,28)

C READ(12,\*) (PES0Z(II),II=1,24)

C READ(14,\*) (PES0Z(II),II=1,16)

C READ(111,\*) (Z(II),II=0,14)

C READ(117,\*) (Z(II),II=1,49)

READ(4,\*) (Z(II),II=1,40)

C READ(7,\*) (Z(II),II=1,20)

C READ(35,\*) (Z(II),II=1,36)

C READ(115,\*) (Z(II),II=1,32)

C READ(9,\*) (Z(II),II=1,28)

C READ(13,\*) (Z(II),II=1,24)

C READ(15,\*) (Z(II),II=1,16)

OPEN(1,FILE='R0140',STATUS='OLD')

DO I=1,18

READ(100,\*) (COEF(IND),IND=0,30)

READ(1,\*) (R01(III),III=1,40)

SI=0

DO P=0,30

WRITE(11,\*) 'MOV EN P=' ,P

ACUMULA=0

DO II=1,40

UNAPARTE=(1+P)\*R01(II)-4\*(R01(II)\*\*2)+R01(II)\*\*4

```

IOPT=2
ARG=2*RO1*(II)
EL=MMDET(IOPT,ARG,IER)
OTRAPARTE=(EXP(2*500*(II)))*EL
INTEGRAL=FES02(II)*UNAPARTE*OTRAPARTE
WRITE(6,*)'INTEGRAL= ',INTEGRAL

ACUMULA=ACUMULA-INTEGRAL

ENDDO

COMPLETA=ACUMULA*(-1)*RAIZ(I)

PARTE=4*((RAIZ(I))**(F+1))/(P+1) + 4*((RAIZ(I))**(P+2))/(P+2)

CORCHETE=PARTE+COMPLETA

C CALCULO DE LOS COEFICIENTES QUE SE NECESITAN
SF=0
DO S=0,P

  ICONT=P-S
  IS=S

  COEFICIENTES=COEF(ICONT)*COEF(IS)

  TODOS=CORCHETE*COEFICIENTES

  SF=SF+TODOS

ENDDO
SI=SI+SP
WRITE(11,*)'SI=',SI
ENDDO

RESULTADO=AISO(I)*(0.5+3.*SI)

C EL ARCHIVO FOR010.DAT GUARDA 48 DATOS;EL FOR011.DAT 40; EL
C ARCHIVO FOR099.DAT GUARDA 20;EL FOR098, 36 ,EL FOR097.32 ;
C EL ARCHIVO FOR096.DAT, 28; EL FOR095.DAT, 24;EL FOR094.DAT
C TIENE 16

WRITE(11,*)' ANISO PARA LA RAIZ ',RAIZ(I), ' ES ',RESULTADO
ENDDO

END

```

```

2 ESTE PROGRAMA CALCULA LA PRESION
REAL R02,CTE,PAIS,RAIZP,RAIZM
DOUBLE PRECISION DERIVADA,AFUERA,RESULT,F1,F2,CONVER1,NU,PAI
DIMENSION COEF(30)
CHARACTER NAME1*16,NUM*1,NAME2*16

R02=1

WRITE(6,*) 'ORDEN DE LA RAIZ'
ACCEPT 25,NUM
25 FORMAT(A2)
ENCODE(11,30,NAME1)NUM
FORMAT('COSAS',A2,'.DAT')
30 OPEN(1,NAME=NAME1,STATUS='OLD',READONLY)
ENCODE(12,31,NAME2)NUM
FORMAT('COSAS',A2,'.DAT')
31 OPEN(2,NAME=NAME2,STATUS='OLD',READONLY)

READ(1,*)RAIZ
READ(1,*)CTE
READ(1,*)(COEF(IND),IND=0,30)
F1=DE_EVALUACION(RAIZ,R02,CTE,COEF)

READ(2,*)RAIZP
READ(2,*)CTE
READ(2,*)(COEF(IND),IND=0,30)
READ(2,*)NU
CLOSE(1)
CLOSE(2)
F2=DE_EVALUACION(RAIZP,R02,CTE,COEF)

DERIVADA=(F1-F2)/(RAIZ-RAIZP)
WRITE(6,*) 'F1,F2,DERIVADA =',F1,F2,DERIVADA
RAIZM=(RAIZ+RAIZP)/2
WRITE(6,*) 'RAIZM=',RAIZM
AFUERA=EXP(-2*R02)/(NU**2)*(RAIZM+R02)
RESULT=AFUERA*DERIVADA
WRITE(6,*) 'RESULT',RESULT
WRITE(6,*) 'LA PRESION EN UNIDADES ATOMICAS ES
50 FORMAT(E15.6)

C CONVERSION A PASCALES

CONVER1=RESULT* 1.014E+11)
WRITE(6,*) 'LA PRESION EN PASCALES ES
200 WRITE(6,200)CONVER1
FORMAT(E15.6)

C POSICION DE LA PARED
PARED=2.-RAIZM*NU
WRITE(6,*) 'PARED=',PARED
END

DOUBLE PRECISION FUNCTION DE_EVALUACION(RAIZ,R02,CTE,COEF)
REAL RAIZ,RAIZP,CTE

```

```
DOUBLE PRECISION COEFICIENTES, CORCHETE, SI, SP, AUX  
DIMENSION COEF(2:30)
```

```
SI=0  
DO P=0,30  
SF=0  
DO S=0,P  
ICONT=P-S  
IS=S  
COEFICIENTES=COEF(ICONT)*COEF(IS)  
CORCHETE=(RAIZ**(P+2))/(P+2) + R02*(RAIZ**(P+1))/(P+1)  
AUX=CORCHETE*COEFICIENTES  
SP=SP+AUX  
ENDDO  
SI=SI+SP  
ENDDO  
DE_EVALUACION=CTE*SI  
RETURN  
END
```

```

7 ESTE PROGRAMA CALCULA LA DENSIDAD DE PROBABILIDAD DE LA
7 FUNCION FI Y DA LOS PUNTOS PARA GRAFICAR EN 2 DIMENSIONES
7 HACIENDO UN GRABE EN R02= Y R01=0. TAMBIEN DA LOS PUNTOS
C POR GRAFICAR EN 1 DIMENSIONES.

```

```

DOUBLE PRECISION SI,SP,COEFICIENTES,COEF,PORTE,COMPLETO
DOUBLE PRECISION TERMINOENPTS,TERMINOR01,TERMINOR02
REAL RAIZ,R01,R02,NU,Y,X,XP
INTEGER P,S,ICONT,IS,GRAFICA

```

```

DIMENSION COEF(6:30)

```

```

NU=1.09
RAIZ=1.7599435

```

```

READ(3,*) (COEF(IND),IND=0,30)

```

```

WRITE(6,*) 'DA LAS DIMENSIONES EN LAS QUE QUIERES LA GRAFICA'
READ(5,*) GRAFICA

```

```

IF (GRAFICA.EQ.2) THEN

```

```

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C GRAFICA EN 2 DIMENSIONES C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

```

```

C CALCULO PARA R01=0

```

```

R01=0

```

```

DO R02=0,10,0.1

```

```

Y=NU*(R02-R01)

```

```

IF (R02.EQ.0) THEN

```

```

TERMINOR01=0

```

```

ELSE

```

```

TERMINOR01=(R01*EXP(-1*R02))+2.43700174

```

```

ENDIF

```

```

WRITE(68,*)Y,TERMINOR01

```

```

ENDDO

```

```

WRITE(68,*) 'FIN'

```

```

C CALCULO PARA R01=0

```

```

R02=0

```

```

DO R01=0,RAIZ,0.01
Y=NU*(R02-R01)
IF (R01.EQ.0) GOTO 200

SI=0
DO P=0,30

SP=0
DO S=0,P

ICONT=P-S
IS=S

COEFICIENTES=COEF(ICONT)*COEF(IS)
PARTE=COEFICIENTES*((R01)**P)
SP=SP+PARTE

ENDDO

SI=SI+SP

ENDDO

200  TERMINOR02=0
      TERMINOR02=(R01*SI*2.43700)/4
      WRITE(68,*)Y,TERMINOR02

      ENDDO

      WRITE(68,*)'JOIN'

ELSE

```

```

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C      GRAFICA EN 3 DIMENSIONES          C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

```

```

C      CALCULO PARA R01=0
      R01=0
      DO F02=0.6,0.1

```

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

```
Y=NU*(R02-R01)
IF (R02.EQ.0) THEN
TERMINOR01=0
ELSE
TERMINOR01=(R02*(EXP(-2*R02))*2.43700)/4
ENDIF
WRITE(68,*)0.0000000E+00,Y,TERMINOR01

ENDDO
WRITE(68,*)'JOIN'
```

```
C
CALCULO PARA R02=0
R02=0
DO R01=0,RAIZ,0.1
Y=NU*(R02-R01)
IF (R01.EQ.0) GOTO 300

SI=0
DO P=0,30
SP=0
DO S=0,P
ICONT=P-S
IS=S
COEFICIENTES=COEF(ICONT)*COEF(IS)
PARTE=COEFICIENTES*((R01)**P)
SP=SP+PARTE
ENDDO
SI=SI+SP
ENDDO
```

```

TERMINOR02=(R01*SI*2.43700)/4
WRITE(68,+)10.000000E+00,Y,TERMINOR02
ENDDO
WRITE(68,+) 'JOIN'

```

C

```

CALCULO PARA LOS DEMAS PUNTOS
DO R01=0.1,RAIZ,0.1
WRITE(68,+) 'JOIN'
DO R02=0.1,6,0.1
X=2*NU*(SQRT(R01*R02))
XP=-X
Y=NU*(R02-R01)
SI=0
DO P=0,30
SP=0
DO S=0,P
ICONT=P-S
IS=S
COEFICIENTES=COEF(ICONT)*COEF(IS)
TERMINOENPYS=COEFICIENTES*(R01*P)
SP=SP+TERMINOENPYS
ENDDO
SI=SI+SP
ENDDO
COMPLETO=(SI*(R01+R02))*EXP(-2*R02))+2.43700/4
WRITE(68,+)XP,Y,COMPLETO
ENDDO
ENDDO
ENDIF
END

```

## REFERENCIAS

## REFERENCIAS

- (1) G. I. Shevtsov, N.I. Migunov, G.A. Sobolev y E.V. Kozlov, Doklady Akademii Nauk SSSR (Proceeding of the Academy of Sciences of the USSR) Geophysics, 223, 313 (1978)
- (2) B.T. Brady y G.A. Rowell, Nature, 321, 488 (1986)
- (3) Guo Ziquang, D.Z. Zhou, X.J. Shi, F.S. Ma y Z.W. Zhou, Electron Emission During Rock Fracture, Science Bulletin, 32, (1987)
- (4) E. Ley-Koo, Guo Ziquang, Shi Xingjue, You Junhan, Diglu Wuli Xuebao, Acta Geophysica Sinica, 32, 173 (1989)
- (5) E. Ley-Koo y S Rubinstein, J. Chem. Phys., 71, 351, (1979)
- (6) J.D. Levine, Phys. Rev., 140, A586 (1965)
- (7) S. Satpathy, Phys. Rev. B, 28, 4389 (1983)
- (8) A. Michels, J. de Boer y A. Bijl, Physica (La Haya), 4, 981 (1937)
- (9) E. Ley-Koo y S. Rubinstein, J. Chem. Phys., 73, 887 (1980)
- (10) G. Arfken. Mathematical Methods for Physicists, Academic Press, New York, 1970
- (11) G. Baym. Lectures on Quantum Mechanics, W. A. Benjamin Inc. Publishers, Massachusetts, 1974, p. 175
- (12) A. Sommerfeld. Atomic Structure and Spectral lines, Vol.I, Dutton and Company Inc. Publishers, New York, 1931, p. 310
- (13) H. A. Bethe y E. E. Salpeter. Quantum Mechanics of one- and two- electron atoms, Plenum Publishing Corporation, New York, 1977, p. 27
- (14) J.D.Jackson. Classical Electrodynamics, Second Edition, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1975, p. 187
- (15) M.J. Stephen y J.P. Auffray, J. Chem Phys. 31, 1329 (1959)

- (16) A. Faires y F. Reynolds. Numerical Analysis, Second edition,  
Wadsworth International Student edition, U.S.A., 1978
- (17) B.R. Lawn and T.R. Wilshaw, Fracture of Brittle Solids,  
Cambridge University Press, (1975).