



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM
"DR. EUGENIO LEY KOO"

ROMPIMIENTO DE SIMETRÍA $SO(2)$ EN ÁTOMO
DE HIDRÓGENO CONFINADO POR ÁNGULO
DIEDRO, MANIFESTACIÓN EN EL EFECTO
ZEEMAN.

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

Físico

PRESENTA:

Rodrigo Emanuel Albarrán Ruiz

TUTOR:

Dr. Eugenio Ley Koo



Cd. Universitaria, Ciudad de México., 2019



Universidad Nacional
Autónoma de México



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 esta 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.

1. Datos del alumno

Albarrán Ruiz

Rodrigo Emanuel

55-3414-5230

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Física

310114121

2. Datos del tutor

Dr Eugenio

Ley Koo

3. Datos sinodal 1

Dra Myriam

Mondragón Ceballos

4. Datos sinodal 2

Dr Carlos

Ramirez Ramos

5. Datos sinodal 3

Dr Ricardo

Mendez Fragoso

6. Datos sinodal 4

Dra Lucía

Medina Gomez

7. Datos del trabajo escrito

Rompimiento de Simetría $SO(2)$ en Átomo de Hidrógeno Confinado por Ángulo
Diedro, Manifestación en el Efecto Zeeman

71 p

2019

“Para mi Abi, Siempre estás conmigo”

Reconocimientos

Primeramente me gustaría agradecer a mis padres, Mónica Mercedes y Ángel, por acomañarme en mis logros además de impulsar y guiar cada uno de mis pasos, en cada uno de ellos los llevo conmigo. Los amo infinitamente; estoy totalmente agradecido por su amor incondicional, su paciencia... y, especialmente agradecido con mi madre por dejarme "pellizcarle las lonjas". Gracias también a mis hermanos, Ángel Sebastián (Ziny) y a Mari Jose (Chungus), por el cariño y apoyo brindado en todo momento.

A mis amigos, Marce y Sebas, reconociendo que gracias al segundo decidí cursar la carrera de Física. Sin olvidar a mis amigos de la Facultad y del Instituto de Física, Maureen, Miguel, Claudio, Luis, Adán, Nayeli (quien se fue a Medicina), Gabriela, Luis Enrique, Omar y Micaela. Gracias por estar presentes y ser incondicionales.

Del mismo modo, un profundo agradecimiento a Benito Atonio Ocasio, pues siempre me recuerda que "estamos bien", al Equipo de desarrolladores de BOTW por enseñarme que todo debe hacerse bien. A Humberto por su gran apoyo, muchas gracias por aguantar tanto.

A los profesores, de quienes reconozco su completo esfuerzo en mi formación académica. Al Dr. Fernando Vilchis y al Dr. Hugo Rincón, ya que por ellos descubrí mi verdadera pasión. Agradezco profundamente al último por apoyarme en tiempos difíciles. También un profundo agradecimiento al Dr. Luis Beneth, ya que gracias a él obtuve las bases necesarias para completar mis programas. Sobre todo, mi mayor agradecimiento al Dr. Eugenio Ley Koo quien ha sido mi asesor y ejemplo a seguir en mis primeros pasos dentro de la academia. Gracias también a la Universidad Nacional Autónoma de México, por brindar al mundo un magnífico lugar para el libre pensamiento y el cultivo del pensamiento.

Finalmente Gracias a CONACYT por el apoyo durante 2 años para la realización de este trabajo

Declaración de autenticidad

Por la presente declaro que, salvo cuando se haga referencia específica al trabajo de otras personas, el contenido de esta tesis es original y no se ha presentado total o parcialmente para su consideración para cualquier otro título o grado en esta o cualquier otra Universidad. Esta tesis es resultado de mi propio trabajo y no incluye nada que sea el resultado de algún trabajo realizado en colaboración, salvo que se indique específicamente en el texto.

Rodrigo Emanuel Albarrán Ruiz. Cd. Universitaria, Ciudad de México., 2019

Resumen

El átomo de Hidrógeno confinado por ángulos diedros es una variante de la modulación de Levine de impurezas donadoras en la superficie de un semiconductor como estados del átomo de Hidrógeno con superficies nodales ecuatoriales [1]. Efectivamente, la variante consiste en considerar planos meridianos en $\phi = 0$ y $\phi = \phi_0 = \pi$ en vez del plano ecuatorial y después considerar otros valores de ϕ_0 . La investigación original de confinamiento en ángulos diedros [3], reconoció el rompimiento de simetría $SO(2)$ en el átomo de Hidrógeno en que las eigenfunciones del cuadrado de la componente axial del momento angular $\sin(\mu\phi)$, tienen eigenvalores $\mu = n_\phi\pi/\phi_0$, con $n_\phi = 1, 2, 3, \dots$ que ya no son enteros en general y convierten los números cuánticos orbital l y principal n del átomo libre en $\lambda = n_\theta + \mu$ y $\nu = n_r + n_\theta + \mu + 1$, en las respectivas eigenfunciones polar y radial y el eigenvalor de la energía. Entre las manifestaciones del rompimiento de simetría destacan:

1. La reducción de orden de degeneración de las eigenfunciones de los niveles de energía.
2. El átomo adquiere un momento dipolar eléctrico.
3. El término de contacto de Fermi en la estructura hiperfina se anula.
4. Se cuantifican los efectos de distribución de presión en las superficies confinantes del ángulo diedro.

En esta tesis se analiza el efecto Zeeman en el Átomo de Hidrógeno confinado en ángulos diedros, problema que se planteó en [3] pero para el cual ya no hubo tiempo de ser abordado. El análisis parte del Hamiltoniano de interacción entre el momento magnético del electrón, con sus contribuciones orbital y de espín, con un campo magnético externo. El método para determinar el desdoblamiento de los niveles de energía consiste en la construcción de la matriz del Hamiltoniano de Zeeman en las bases de estados degenerados para cada nivel del átomo confinado. Aquí nos concentramos en la contribución orbital, sabiendo que la contribución de espín esta asociada a los estados de sus proyecciones $m_s = 1/2$ y $m_s = -1/2$ que no dependen del efecto de confinamiento. Los elementos de matriz de la componente axial del momento angular orbital $\langle n'_r, n'_\theta, \mu' | \hat{l}_z | n_r, n_\theta, \mu \rangle$ estan restringidos por las reglas de selección $\mu' \pm \mu$ non,

$n'_\theta \pm n_\theta$ par, y n'_r y n_r compatibles con las anteriores y con la condición de degeneración de $\nu' = \nu$. Los estados de degeneración D determinan el tamaño $D \times D$ de la matriz del Hamiltoniano; las reglas de selección de paridad de las funciones polares distinguen $D = D_+ + D_-$ y separan los bloques $D_+ \times D_+$ y $D_- \times D_-$ en la matriz completa. Esto reduce el esfuerzo computacional, mejora la precisión de los resultados numéricos y facilita la identificación e interpretación de los eigenvalores de las energías Zeeman y sus respectivas eigenfunciones, en la diagonalización de las matrices. Se ilustran los resultados para el ángulo de confinamiento $\phi_0 = \pi/4, \pi/3, \pi/2, \pi, 3\pi/2, 5\pi/3, 7\pi/4$. Se formulan conclusiones generales:

1. Los promedios de las energías Zeeman son nulos.
2. Por cada nivel de energía positiva hay un compañero con la misma energía negativa.
3. Sus funciones de onda son complejas conjugadas.
4. Algunos niveles no cambian y conservan sus eigenestados originales.
5. Al agregar la contribución del espín se incorporan los corrimientos respectivos.

Índice general

Índice de figuras	xv
Índice de tablas	xix
1. Introducción	1
2. Eigensoluciones exactas y sus Degeneraciones para el Átomo de Hidrógeno Confinado por Ángulo Diedro en Coordenadas Esféricas	5
2.1. Separación de la Ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas . . .	5
2.2. Soluciones Exactas para el Átomo de Hidrógeno confinado por ángulo diedro	6
2.3. Degeneraciones para distintas configuraciones de confinamiento por medio de ángulo diedro para el Átomo de Hidrógeno	8
3. Efecto Zeeman para Átomo de Hidrógeno confinado por Ángulo Diedro	13
3.1. Efecto Zeeman	13
3.2. Solución matricial del Efecto Zeeman	13
3.3. Construcción de los elementos de matriz	14
3.4. Reglas de Selección	14
3.5. Metodología Computacional y Numérica	15
3.5.1. Construcción de Funciones Angular Polar y Radial	15
3.5.2. Construcción de la Matriz del Hamiltoniano Zeeman Orbital en la Base de Estados Degenerados	16
3.5.3. Eigenvalores de la matriz	17
3.5.4. Eigenfunciones de la matriz	18
4. Resultados: Desdoblamientos de Niveles de Energía y Eigenfunciones para las Distintas Configuraciones de Confinamiento	21
4.1. Ángulo de Confinamiento π	22
4.1.1. Segundo nivel energético, etiquetado por $\nu = 3$	22
4.1.2. Tercer nivel energético, etiquetado por $\nu = 4$	24
4.1.3. Cuarto nivel energético, etiquetado por $\nu = 5$	25

ÍNDICE GENERAL

4.1.4.	Quinto nivel energético, etiquetado por $\nu = 6$	26
4.1.5.	Sexto nivel energético, etiquetado por $\nu = 7$	26
4.2.	Ángulo de Confinamiento $\frac{\pi}{2}$	27
4.2.1.	Tercer nivel energético, etiquetado por $\nu = 5$	28
4.2.2.	Cuarto nivel energético, etiquetado por $\nu = 6$	29
4.2.3.	Quinto nivel energético, etiquetado por $\nu = 7$	30
4.2.4.	Sexto nivel energético, etiquetado por $\nu = 8$	31
4.2.5.	Séptimo nivel energético, etiquetado por $\nu = 9$	32
4.2.6.	Octavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 10$	33
4.3.	Ángulo de Confinamiento $\frac{\pi}{3}$	34
4.3.1.	Cuarto nivel energético, etiquetado por $\nu = 7$	35
4.3.2.	Quinto nivel energético, etiquetado por $\nu = 8$	36
4.3.3.	Sexto nivel energético, etiquetado por $\nu = 9$	37
4.3.4.	Séptimo nivel energético, etiquetado por $\nu = 10$	38
4.3.5.	Octavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 11$	39
4.4.	Ángulo de Confinamiento $\frac{\pi}{4}$	40
4.4.1.	Quinto nivel energético, etiquetado por $\nu = 9$	40
4.4.2.	Sexto nivel energético, etiquetado por $\nu = 10$	42
4.4.3.	Séptimo nivel energético, etiquetado por $\nu = 11$	43
4.5.	Ángulo de Confinamiento $\frac{3\pi}{2}$	44
4.5.1.	Sexto nivel energético, etiquetado por $\nu = 11/3$	45
4.5.2.	Octavo Bloque nivel energético, etiquetado por $\nu = 13/3$	46
4.5.3.	Noveno nivel energético, etiquetado por $\nu = 14/3$	47
4.5.4.	Décimo nivel energético, etiquetado por $\nu = 5$	48
4.5.5.	Onceavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 16/3$	49
4.5.6.	Doceavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 17/3$	49
4.5.7.	Treceavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 6$	50
4.5.8.	Catorceavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 19/3$	51
4.6.	Ángulo de Confinamiento $\frac{5\pi}{3}$	52
4.6.1.	Doceavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 23/5$	52
4.6.2.	Quinceavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 26/5$	54
4.6.3.	Diecisieteavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 28/5$	55
4.6.4.	Dieciochoavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 29/5$	56
4.6.5.	Veinteavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 31/5$	56
4.7.	Ángulo de Confinamiento $\frac{7\pi}{4}$	57
4.7.1.	Veinteavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 39/7$	57
5.	Conclusiones	61
A.	Apéndices	65
A.1.	Apéndice 1: Teoría de Perturbaciones para Estados Degenerados	65
A.2.	Apéndice 2: Tablas complementarias	68
	Bibliografía	71

Bibliografía	73
Bibliografía	73

Índice de figuras

2.1. Distintos ángulos asociados a las configuraciones de confinamiento.	9
4.1. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al segundo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	23
4.2. Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.	23
4.3. Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo negativo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.	24
4.4. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al tercer nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	25
4.5. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al cuarto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	25
4.6. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al quinto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	26
4.7. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al sexto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	27
4.8. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al tercer nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	28
4.9. Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.	29
4.10. Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo negativo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.	29
4.11. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al cuarto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	30
4.12. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al quinto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	31
4.13. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al sexto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	32

4.14. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al séptimo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	33
4.15. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al octavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	34
4.16. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al cuarto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	35
4.17. Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.	36
4.18. Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo negativo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.	36
4.19. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al quinto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	37
4.20. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al sexto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	38
4.21. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al séptimo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	39
4.22. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al octavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	40
4.23. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al quinto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	41
4.24. Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.	42
4.25. Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.	42
4.26. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al sexto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	43
4.27. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al séptimo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	44
4.28. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al sexto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	45
4.29. Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.	46
4.30. Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo negativo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.	46
4.31. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al octavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	47

4.32. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al noveno nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	48
4.33. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al décimo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	48
4.34. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al onceavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	49
4.35. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al doceavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	50
4.36. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al treceavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	51
4.37. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al catorceavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	51
4.38. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al doceavo bloque degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	53
4.39. Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.	53
4.40. Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo negativo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.	54
4.41. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al quinceavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	55
4.42. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al diecisieteavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	55
4.43. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al dieciochoavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	56
4.44. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al veinteavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	57
4.45. Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al veinteavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).	58
4.46. Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.	59
4.47. Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo negativo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.	59

Índice de tablas

2.1. Polinomios asociados de Legendre con paridad definida $(-)^{n_\theta}$	7
2.2. Funciones hipergeométricas confluentes polinomiales	8
2.3. Representación de los niveles degenerados para ángulos menores o iguales a π	10
2.4. Representación de los niveles degenerados para ángulos mayores a π . . .	11
A.1. Descripción de los niveles degenerados para ángulos menores a π	68
A.2. Descripción de los niveles degenerados para el ángulo π	69

Introducción

El átomo de Hidrógeno confinado en ángulos diedros es una variante de la modulación de Levine para impurezas donadoras en la superficies de un semiconductor [1]. Efectivamente, la investigación original de confinamiento en ángulos diedros [2],[4], [?] , subraya los efectos de superficie que se manifiestan como rompimiento de simetría de rotación alrededor de la arista del ángulo:

1. Las eigenfunciones de la componente axial del momento angular orbital son reemplazados por eigenfunciones del cuadrado de esa componente que se anulan en las caras del ángulo diedro $\sin(\mu\phi)$, con eigenvalores $\mu = n_\phi\pi/\phi_0$, con $n_\phi = 1, 2, 3, \dots$ y la paridad definida $-(-)^{n_\phi}$ con respecto al ángulo diedro $\phi_0/2$ que lo bisecta ángulo diedro.
2. Los polinomios de Legendre con asociatividad no entera $P_{n_\theta+\mu}^\mu$ contienen potencias pares y nones de su argumento $\cos(\theta)$; sus representaciones en términos de funciones hipergeométricas con argumento $(1 - \cos(\theta))/2$ y $(1 + \cos(\theta))/2$ permiten restablecer la simetría de paridad superponiéndolos con un coeficiente $(-)^{n_\theta}$ en la segunda. La combinación $n_\theta + \mu = \lambda$ es la etiqueta para el cuadrado del eigenvalor del momento angular $\lambda(\lambda + 1)\hbar^2$.
3. Las funciones radiales son del mismo tipo que del Hidrógeno libre con el reemplazo de la etiqueta de momento angular orbital l por λ en el factor de remoción de la singularidad al origen r^λ y en los polinomios de Laguerre asociados y el número cuántico principal n por la etiqueta cuántica $\nu = n_r + n_\theta + \mu + 1$ en el factor exponencial que asegura el buen comportamiento al infinito $\exp(-r/\nu a_0)$ y en el argumento $2r/\nu a_0$ de los polinomios.
4. Los eigenvalores de la energía son $E_\nu = -e^2/2a_0\nu^2$ y en consecuencia sus degeneraciones dependen del ángulo de confinamiento y son menores que en el átomo libre. Cuando $\nu \rightarrow \infty$ por que $\mu = n_\phi\pi/\phi_0 \rightarrow 0$ para $\phi_0 \rightarrow 0$, todos los niveles de energía tienden asintóticamente a cero, cuando $\mu \rightarrow \infty$, incluyendo el límite de ionización.

1. INTRODUCCIÓN

5. Cuando $\phi_0 \rightarrow 2\pi$ no se recupera el límite de átomo libre, por que la presencia del electrón esta excluida del semiplano meridiano mismo.

Los cambios en las funciones de onda en sus dependencias en las respectivas coordenadas y etiquetas cuánticas se menciona sucesivamente:

1. El átomo de Hidrógeno confinado adquiere un momento dipolar eléctrico, cuya componente axial es nula y cuya dirección en el plano ecuatorial es hacia el núcleo en la dirección del ángulo que bisecta al ángulo de confinamiento.
2. Se calculan las distribuciones de presión en los planos de confinamiento 0 y ϕ_0 para el átomo de Hidrógeno en los estados mas bajos, en función de la distancia radial y en direcciones polares fijas. Para el estado base la presión toma valores positivos; para estados excitados aparecen regiones con presiones negativas pequeñas, es decir tensiones.
3. En conexión con la estructura hiperfina, la probabilidad de encontrar al electrón en la posición del núcleo se anula debido a la presencia del factor r^λ en la función radial y por tanto el término de contacto de Fermi se anula y no hay contribución isotrópica. Para contribuciones cuadrupolares, los valores esperados de $(3\cos^2(\theta) - 1)/r^3$ y $\sin^2(\theta)\cos(2\phi')/r^3$ involucran integrales radiales, polares y en ϕ' referido al ángulo de bisector que son directos y conducen a las componentes anisotrópicas axial A_{zz} y transversal $A_{x'^2-y'^2}$ respectivamente como funciones de μ .

En la referencia [3] se planteo el análisis del Efecto Zeeman para el átomo de Hidrógeno confinado en ángulo diedros, pero por razones de tiempo quedó pendiente.

En esta tesis se reporta el análisis completo partiendo del Hamiltoniano para la interacción de los momentos energéticos orbital y de espín en un campo magnético uniforme. El método de solución se reconoce que es el de Teoría de Perturbaciones de Estados Degenerados, que requiere la construcción de la matriz del Hamiltoniano de interacción en la base de estados degenerados y sus diagonalizaciones, para obtener los desplazamientos de los niveles de energía Zeeman con respecto a la energía común de los estados de la base y sus respectivos eigenvectores en la base escogida.

Consecuentemente el resto de la tesis esta organizada de la siguiente manera. Capítulo 2 describe las soluciones de la ecuación de Schrödinger para el átomo de Hidrógeno, sujeto a las condiciones de frontera de anularse en los planos meridianos $\phi = 0$ y $\phi = \phi_0$ que definen el ángulo diedro de confinamiento. Se destacan los cambios en las etiquetas cuánticas magnética y orbital, μ y $\lambda = n_\theta + \mu$, con respecto al caso del átomo libre con valores enteros, m y $l = n_\theta + m$ y de $\nu = n_r + n_\theta + \mu + 1$ como etiqueta cuántica principal en vez de n . También se identifican las degeneraciones D de los estados $|n_r, n_\theta, \mu = n_\phi\pi/\phi_0\rangle$ para cada ángulo de confinamiento ϕ_0 .

Capítulo 3 formula la construcción de la matriz de la parte orbital del Hamiltoniano de Zeeman, reconociendo que la parte de espín no es afectada por el confinamiento y se reduce al desdoblamiento de sus estados con $m_s = 1/2$ y $m_s = -1/2$, respectivamente.

Para cada conjunto de estados $|n_r, n_\theta, \mu\rangle$ con degeneración D , los elementos de la matriz de la componente z del momento angular $l_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$, conduce a reglas de selección en los respectivos números cuánticos, $n'_\phi - n_\phi$ nones, $n'_\theta - n_\theta$ pares, n_r y n'_r compatibles con las condiciones anteriores y la degeneración. La regla de selección de paridad para las funciones polares separa la matriz $D \times D$ en dos bloques $D_+ \times D_+$ y $D_- \times D_-$ con $D_+ + D_- = D$. Esto reduce los trabajos de cálculo, mejora la precisión de los resultados y facilita su interpretación.

Capítulo 4 ilustra de manera sistemática los desdoblamientos de los niveles Zeeman orbital como funciones del ángulo de confinamiento y sus eigenfunciones respectivas. De la comparación de los resultados para cada ángulo también se reconocen conclusiones comunes a ellos.

Capítulo 5 se presenta un resumen del trabajo realizado, comentarios sobre los resultados y sus conclusiones.

Eigen soluciones exactas y sus Degeneraciones para el Átomo de Hidrógeno Confinado por Ángulo Diedro en Coordenadas Esféricas

2.1. Separación de la Ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas

La ecuación de Schrödinger $\hat{H}\Psi = E\Psi$ [7], [6], [8] de estados estacionarios para el átomo de Hidrógeno es

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi - \frac{e^2}{r}\Psi = E\Psi. \quad (2.1)$$

Su forma explicita en coordenadas esféricas toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right)\right] - \frac{e^2}{r}\Psi = E\Psi. \quad (2.2)$$

Para encontrar la solución a esta ecuación se utiliza el método de separación de variables con la función de onda de factorizable $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$. La substitución de esta función en la Ec. (2.2) conduce a las ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = m^2\Phi, \quad (2.3)$$

reconociendo la presencia de la componente z del operador del momento angular en la Ec.((2.2)), $\hat{l}_z^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$, la cual se identifica como una constante de movimiento.

2. EIGENSOLUCIONES EXACTAS Y SUS DEGENERACIONES PARA EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO CONFINADO POR ÁNGULO DIEDRO EN COORDENADAS ESFÉRICAS

Las otras ecuaciones diferenciales ordinarias comparten la constante de separación de la forma $l(l + 1)$, la cual es el eigenvalor del cuadrado del momento angular:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{\mu^2}{\sin^2\theta} \Theta(\theta) &= l(l + 1)\Theta(\theta) \\ \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l + 1)}{r^2} \right] - \frac{e^2}{r} \right\} R(r) &= ER(r). \end{aligned} \quad (2.4)$$

En las mismas ecuaciones se identifican las cantidades dinámicas conservadas, tales como: el cuadrado de la componente axial del momento angular, el cuadrado del momento angular mismo y la energía, con sus respectivos eigenvalores l, n y sus constantes de separación.

2.2. Soluciones Exactas para el Átomo de Hidrógeno confinado por ángulo diedro

En esta sección se analiza el átomo de Hidrógeno confinado por paredes impenetrables en los semiplanos meridianos $\phi_1 = 0$ y $\phi_2 = \phi_0$, sujeto a las condiciones de frontera:

$$\Phi(\phi_1 = 0) = 0 \quad \text{y} \quad \Phi(\phi_2 = \phi_0) = 0. \quad (2.5)$$

Las posibles soluciones de la ecuación (2.3), son $\sin(\mu\phi)$ y $\cos(\mu\phi)$, pero ya que la solución debe de satisfacer las condiciones de frontera, la solución de coseno queda descartada y la solución queda de la forma

$$\Phi_\mu(\phi) = \sqrt{\frac{2}{\phi_0}} \sin(\mu\phi) \quad (2.6)$$

de acuerdo con [3], con eigenvalores:

$$\mu = \frac{n_\phi \pi}{\phi_0}, \quad \text{con} \quad n_\phi = 1, 2, 3, \dots \quad (2.7)$$

Como consecuencia del confinamiento en general, μ ya no es entero e ilustra la manifestación del rompimiento de simetría $SO(2)$. Al analizar la ecuación para el ángulo polar (2.4), la solución tiene el factor $\sin^\mu(\theta)$ para remover las singularidades en $\theta = 0$ y $\theta = \pi$. El hecho de que el eigenvalor con las sustituciones μ deja de ser entero, genera que las cantidades conservadas se sustituyan como $m \rightarrow \mu$ y $l \rightarrow \lambda = n_\theta + \mu$ y además existen dos soluciones independientes de polinomios de Legendre asociados

$$\begin{aligned} {}_2F_1(-n_\theta, n_\theta + 2\mu + 1; \mu + 1; (1 - \cos(\theta)/2)) \quad \text{y} \\ {}_2F_1(-n_\theta, n_\theta + 2\mu + 1; \mu + 1; (1 + \cos(\theta)/2)). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Como consecuencia del rompimiento de simetría cada polinomio contiene potencias pares e impares de $\cos(\theta)$, por lo tanto estos no tienen una paridad bien definida. La

paridad z para el átomo de Hidrógeno se debe mantener, lo cual se logra mediante la superposición de ambos polinomios con el coeficiente relativo $(-1)^{n_\theta}$, que conduciendo a las soluciones con paridad bien definida:

$$\Theta_{n_\theta}^\mu(\cos(\theta)) = N_{n_\theta+\mu} \frac{\sin^\mu \theta}{2} [2F_1(-n_\theta, n_\theta + 2\mu + 1; \mu + 1; (1 - \cos(\theta)/2)) + (-1)^{n_\theta} 2F_1(-n_\theta, n_\theta + 2\mu + 1; \mu + 1; (1 + \cos(\theta)/2))] \quad (2.9)$$

En la tabla 2.1 se ilustran estos polinomios.

n_θ	
0	1
1	$\cos\theta$
2	$\frac{-1+(2\mu+3)\cos^2\theta}{2(\mu+1)}$
3	$\frac{-3\cos\theta+(2\mu+5)\cos^3\theta}{2(\mu+1)}$
4	$\frac{3-6(2\mu+5)\cos^2\theta+(2\mu+5)\cos^4\theta}{4(\mu+1)(\mu+2)}$
5	$\frac{15\cos\theta-10(2\mu+7)\cos^3\theta+(2\mu+7)(2\mu+9)\cos^5\theta}{4(\mu+1)(\mu+2)}$
6	$\frac{-15*45(2\mu+7)\cos^2\theta-10(2\mu+7)(2\mu+9)\cos^4\theta+(2\mu+7)(2\mu+9)(2\mu+11)\cos^6\theta}{8(\mu+1)(\mu+2)(\mu+3)}$
7	$\frac{-105\cos\theta+105(2\mu+9)\cos^3\theta-21(2\mu+9)(2\mu+11)\cos^5\theta+(2\mu+7)(2\mu+9)(2\mu+11)(2\mu+13)\cos^7\theta}{8(\mu+1)(\mu+2)(\mu+3)}$

Tabla 2.1: Polinomios asociados de Legendre con paridad definida $(-1)^{n_\theta}$

Por otra parte al analizar la ecuación radial 2.4, con la sustituciones de $l \rightarrow \lambda = n_\theta + \mu$ y $n \rightarrow \nu$ se identifica la solución radial

$$R_{n_r, \lambda}(r) = N_{n_r, \lambda} r^\lambda e^{-r/\nu a_0} M(-n_r, 2\lambda + 2, 2r/\nu a_0) \quad (2.10)$$

donde r^λ es el factor para remover la singularidad al origen, la exponencial asegura un comportamiento asintótico correcto y se tienen funciones hipergeométricas confluentes polinomiales . En la tabla 2.2 se ilustran las últimas.

Los eigenvalores de la energía se expresan en términos de la etiqueta cuántica principal

$$\nu = n_r + n_\theta + \mu + 1, \quad (2.11)$$

tomando la forma

$$E_\nu = \frac{-e^2}{2a_0\nu^2} \quad (2.12)$$

donde a_0 es el radio de Bohr.

2. EIGENSOLUCIONES EXACTAS Y SUS DEGENERACIONES PARA EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO CONFINADO POR ÁNGULO DIEDRO EN COORDENADAS ESFÉRICAS

n_r	$M(-n_r, 2\lambda + 2, 2r/\nu a_0)$
0	1
1	$1 - \frac{2r/\nu a_0}{(2\lambda+2)}$
2	$1 - \frac{2(2r/\nu a_0)}{(\lambda+2)} + \frac{2(2r/\nu a_0)^3}{(2(\lambda+2)(\lambda+3))}$
3	$1 - \frac{3(2r/\nu a_0)}{(2\lambda+2)} + \frac{6(2r/\nu a_0)^2}{(2(2\lambda+2)+(2\lambda+3))} - \frac{6(2r/\nu a_0)^3}{(6(2\lambda+2)(2\lambda+3)(2\lambda+6))}$

Tabla 2.2: Funciones hipergeométricas confluentes polinomiales

2.3. Degeneraciones para distintas configuraciones de confinamiento por medio de ángulo diedro para el Átomo de Hidrógeno

Las variaciones de las energías corresponden a variaciones en las etiquetas n_r, n_θ y μ , donde la última de acuerdo con la Ec.((2.7)), queda en función del ángulo de confinamiento. Los estados degenerados quedan determinados por la condición $\nu' = \nu$ según la Ec. (2.12), es decir $n'_r + n'_\theta + \mu' + 1 = n_r + n_\theta + \mu + 1$. Para cada distinto ángulo de confinamiento se presenta una distinta configuración de estados degenerados. El número D indica el número de estados que se encuentran etiquetados por el mismo nivel energético, pero con distintos valores en cada uno de sus números cuánticos, dicho numero es $D_{(n_r+n_\theta+\mu)}$. La suma de número de estados degenerados para todos los niveles define el número total de degeneración para cada configuración asociada a un ángulo de confinamiento

$$D = \sum_{n_r, n_\theta, \mu} D_{(n_r+n_\theta+\mu)}. \quad (2.13)$$

En la figura ?? se muestran los distintos ángulos de confinamiento para los cuales se identifican los distintos estados degenerados.

2.3 Degeneraciones para distintas configuraciones de confinamiento por medio de ángulo diedro para el Átomo de Hidrógeno

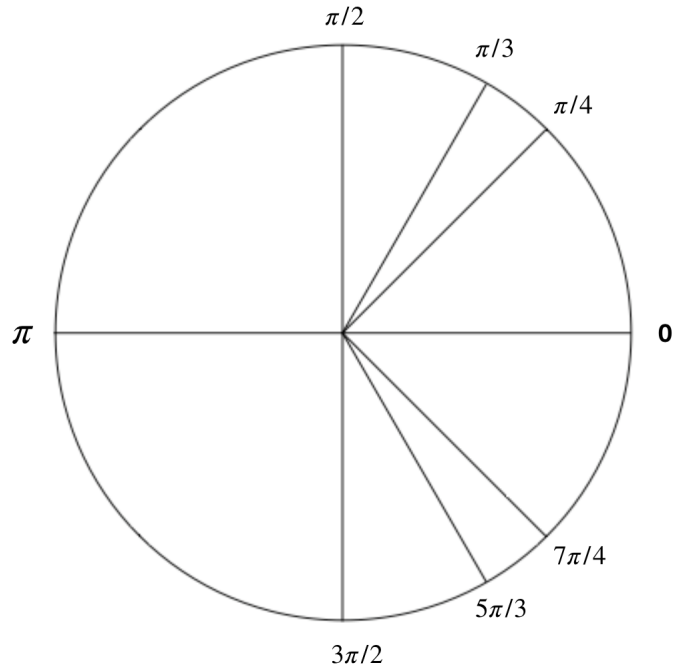


Figura 2.1: Distintos ángulos asociados a las configuraciones de confinamiento.

En la tabla 2.3 se ilustran las degeneraciones para los niveles de energía del átomo de Hidrógeno para configuraciones de confinamiento con ángulos menores o iguales a π , mientras que la tabla 2.4 ilustra las degeneraciones para la contraparte de los ángulos mostrados en la tabla 2.3. Es importante reconocer que cuando el ángulo de confinamiento es de $\phi_0 = 2\pi$, las eigenfunciones, las eigenenergías y el número de estados degenerados difieren del caso para el átomo libre debido a las condiciones de frontera en las Ec.s ((2.5)).

2. EIGENSOLUCIONES EXACTAS Y SUS DEGENERACIONES PARA EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO CONFINADO POR ÁNGULO DIEDRO EN COORDENADAS ESFÉRICAS

$\phi_0 = \pi/4$			$\phi_0 = \pi/3$			$\phi_0 = \pi/2$			$\phi_0 = \pi$		
n_r+n_θ	n_ϕ	D	n_1+n_2	n_ϕ	D	n_1+n_2	n_ϕ	D	n_1+n_2	n_ϕ	D
0	1	1	0	1	1	0	1	1	0	1	1
1	1	2	1	1	2	1	1	2	1	1	3
2	1	3	2	1	3	2	1	4	0	2	
3	1	4	3	1	5	0	2		2	1	6
4	1	6	0	2		3	1	6	1	2	
0	2		4	1	7	1	2		0	3	
5	1	8	1	2		4	1	9	3	1	10
1	2		5	1	9	2	2		2	2	
6	1	10	2	2		0	3		1	3	
2	2		6	1	12	5	1	12	0	4	
			3	2		3	2		4	1	15
			0	3		1	3		3	2	
			7	1	15	6	1	16	2	3	
			4	2		4	2		1	4	
			1	3		2	3		0	5	
						0	4		5	1	21
						7	1	20	4	2	
						5	2		3	3	
						3	3		2	4	
						1	4		1	5	
									0	6	

Tabla 2.3: Representación de los niveles degenerados para ángulos menores o iguales a π .

2.3 Degeneraciones para distintas configuraciones de confinamiento por medio de ángulo diedro para el Átomo de Hidrógeno

$3\pi/2$			$5\pi/3$			$7\pi/4$			2π		
$n_{r+n\theta}$	n_ϕ	D	n_{1+n_2}	n_ϕ	D	n_{1+n_2}	n_ϕ	D	n_{1+n_2}	n_ϕ	D
0	1	1	0	1	1	0	1	1	0	1	1
0	2	1	0	2	1	0	2	1	0	2	1
1	1	2	1	1	2	1	1	2	1	1	3
0	3	1	0	3	1	0	3	1	0	3	
1	2	2	1	2	2	1	2	2	1	2	3
2	1	4	0	4	1	0	4	1	0	4	
0	4		2	1	3	2	1	3	2	1	6
1	3	2	1	3	2	1	3	2	1	3	
2	2	4	0	5	1	0	5	1	0	5	
0	5		2	2	3	2	2	3	2	2	6
3	1	6	1	4	2	1	4	2	1	4	
1	4		3	1	5	0	6	1	0	6	
2	3	4	0	6		3	1	4	3	1	10
0	6		2	3	3	2	3	3	2	3	
3	2	6	1	5	2	1	5	2	1	5	
1	5		3	2	5	0	7	1	0	7	
4	1	9	0	7		3	2	4	3	2	10
2	4		2	4	3	2	4	3	2	4	
0	7		4	1	7	1	6	2	1	6	
3	3	6	1	6		4	1	6	0	7	
1	6		3	3	5	0	8		4	1	15
4	2	9	0	8		3	3	4	3	3	
2	5		2	5	3	2	5	3	2	5	
0	8		4	1	7	1	7	2	1	7	
			1	6		4	2	5			
						2	6	3			

Tabla 2.4: Representación de los niveles degenerados para ángulos mayores a π .

Efecto Zeeman para Átomo de Hidrógeno confinado por Ángulo Diedro

3.1. Efecto Zeeman

A finales del siglo del *XIX*, Pieter Zeeman realizó una serie de estudios sobre el efecto de un campo magnético uniforme de desdoblamiento de las líneas espectrales, emitidas por un átomo. A este fenómeno se le conoce como efecto Zeeman [5]. El electrón posee un momento magnético con contribuciones orbital y de espín

$$\vec{\mu}^e = \vec{\mu}_l^e + \vec{\mu}_s^e = -\frac{e}{2m_e c} [\hat{l}_z + g_s^e \hat{s}_z]. \quad (3.1)$$

donde $g_s^e = 2$ es la razón giromagnética del espín. El hamiltoniano de interacción de un momento magnético en un campo de inducción magnético uniforme $\vec{B} = \hat{k}B$, es

$$\hat{H}_{\vec{\mu}, \vec{B}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{eB}{2m_e c} [\hat{l}_z + g_s^e \hat{s}_z]. \quad (3.2)$$

En el caso de átomo de Hidrógeno libre, el efecto Zeeman conducen a un desdoblamiento uniforme de los estados degenerados de el número de $2l + 1$ y $2g_s^e$ y $m_s = 1/2, -1/2$ respectivamente. Al confinar al átomo de Hidrógeno la situación cambia ya que sus funciones de onda son eigenfunciones del cuadrado de la componente \hat{z} del momento angular pero \hat{l}_z cesa de ser constante de movimiento.

3.2. Solución matricial del Efecto Zeeman

El átomo de Hidrógeno confinado por ángulos diedros posee soluciones de estados degenerados de acuerdo con la Ec.(2.12), explícitamente ilustrados en las Tablas 2.3 y 2.4.

3. EFECTO ZEEMAN PARA ÁTOMO DE HIDRÓGENO CONFINADO POR ÁNGULO DIEDRO

La evaluación y análisis del efecto de desdoblamiento de los niveles de energía degenerados cuando el átomo esta bajo la acción del campo magnético uniforme externo, se puede formular en base de la matriz del Hamiltoniano de Zeeman, Ec. (3.2), en los subespacios de los estados degenerados.

En esta sección nos concentramos en la contribución orbital a la interacción, sabiendo que la contribución de espín se reduce al desdoblamiento de los estados de proyección paralela y antiparalela al campo magnético que no dependen del confinamiento.

3.3. Construcción de los elementos de matriz

La evaluación de los elementos de matriz de la componente \hat{z} del momento angular es factorizable:

$$\langle \psi_{n'_r, n'_\theta, n'_\phi} | \hat{l}_z | \psi_{n_r, n_\theta, n_\phi} \rangle = \langle n'_r \lambda' | n_r \lambda \rangle \langle n'_\theta \mu' | n_\theta \mu \rangle \langle n'_\phi | \hat{l}_z | n_\phi \rangle. \quad (3.3)$$

Ya que el operador l_z solo actúa en la componente $\hat{\phi}$ azimutal de la función de onda. La integral correspondiente en la base de las eigenfunciones de 2.6 y 2.7 tiene la forma

$$\langle n'_\phi | \hat{l}_z | n_\phi \rangle = \frac{-i2\hbar}{\phi_0} \int_0^{\phi_0} \sin\left(\frac{n'_\phi \pi \phi}{\phi_0}\right) \frac{d}{d\phi} \sin\left(\frac{n_\phi \pi \phi}{\phi_0}\right). \quad (3.4)$$

La contribución polar es la integral de traslape entre las funciones de paridad definida 2.9 y la Tabla 2.1

$$\langle n'_\theta \mu' | n_\theta \mu \rangle = \int_0^\pi \sin \theta \Theta_{n'_\theta}^{\mu'} \Theta_{n_\theta}^\mu d\theta \quad (3.5)$$

La contribución radial es el traslape entre las funciones de la Ec. 2.10 y la Tabla 2.2

$$\langle n'_r \lambda' | n_r \lambda \rangle = \int_0^\infty r^2 R_{n'_r \lambda'}(r) R_{n_r \lambda}(r) dr. \quad (3.6)$$

3.4. Reglas de Selección

La integral de la Ec.((3.4)) se evalua reescribiendo el producto de las funciones seno y coseno como la suma de senos de la semisuma y la semidiferencia de los argumentos respectivos con el resultado:

$$\langle n'_\phi | \hat{l}_z | n_\phi \rangle = \int_0^{\phi_0} \sin\left(\frac{n'_\phi \pi \phi}{\phi_0}\right) \frac{d}{d\phi} \sin\left(\frac{n_\phi \pi \phi}{\phi_0}\right) d\phi \quad (3.7)$$

$$\begin{cases} 0 & \text{par}_{n'_\phi \pm n_\phi} \quad \text{par} \\ \frac{-i\hbar}{\phi_0} \left[\frac{4n_\phi n'_\phi}{n^2 - n'^2} \right] & \text{par}_{n'_\phi \pm n_\phi} \quad \text{non} \end{cases},$$

La regla de selección indica que el elemento de matriz se anula para estados de la misma paridad y solo hay contribución para estados de diferente paridad. Nótese también el cambio de signo al intercambiar n'_ϕ y n_ϕ , el cual refleja el carácter Hermitiano del operador y de la matriz. La integral de traslape de la Ec. (3.5) se anula si sus etiquetas μ' y μ debido a la Ec. (3.7). También se anulan si la suma de n_θ y n'_θ es non y solo se necesitan calcular según, la Ec. (3.5) cuando n'_θ y n_θ tienen la misma paridad. Esta regla de paridad de los estados polares:

$$\langle n'_\theta | n_\theta \rangle = \begin{cases} 0 & \text{para } n'_\theta \pm n_\theta \text{ par} \\ \neq 0 & \text{para } n'_\theta \pm n_\theta \text{ non} \end{cases} \quad (3.8)$$

La integral de traslape de las funciones radiales de la Ec. (3.6) para cada valor escogido de $\lambda = n_\theta + \mu$ esta restringida a los números cuánticos radiales compatibles con la degeneración de estados: $n'_r + n'_\theta + \mu' + 1 = n_r + n_\theta + \mu + 1$.

Para una degeneración D de los estados, la regla de selección de paridad solo permite conexión entre D_+ estados de paridad positiva y entre D_- estados de paridad negativa, tales que $D_+ + D_- = D$. Entonces, la matriz original de dimensión $D \times D$ se divide en dos submatrices de dimensión $D_+ \times D_+$ y $D_- \times D_-$. Las consecuencias son una reducción en el esfuerzo de tiempo y cálculo, un incremento en la precisión de los resultados y una interpretación simple y directa de los eigenvalores de la energía y de las eigenfunciones.

3.5. Metodología Computacional y Numérica

Se realizo la construcción y diagonalización de las matrices asociadas a cada una de los niveles de energía degenerados mostrados en las (tablas 2.3 y 2.4), por medio de un método computacional empleando la plataforma de Jupyter bajo el lenguaje de programación Julia.

3.5.1. Construcción de Funciones Angular Polar y Radial

Se comenzó desarrollando un programa, para determinar las funciones polares de Legendre con paridad definida $(-)^{n_\theta}$ mostradas en la tabla 2.1 con el orden de los números cuánticos dados en cada uno de los bloques de degeneración de dimención D_+ y D_- . De esta manera al momento de construir de la matriz elemento por elemento, el programa que construya la matriz pueda llamar a cada una de estas funciones en el elemento de matriz que le corresponda. Posteriormente se desarrollo un programa que ayuda a determinar las constantes de normalización para la ecuación (2.9) y evalúe la integral (3.5) en cada uno de los elementos de matriz que le corresponda.

La misma tarea se realizo para las funciones radiales. Se desarrollo un programa el cual construye de cada una de las funciones hipergeométricas polinómicas confluentes mostradas en la tabla 2.2 en el orden de los números cuánticos dados en cada uno de los bloques de degeneración. El programa que construye la matriz pueda mandar a llamar a cada una de estas funciones en el elemento de matriz que le corresponda. También se

3. EFECTO ZEEMAN PARA ÁTOMO DE HIDRÓGENO CONFINADO POR ÁNGULO DIEDRO

desarrolló un programa que ayuda a determinar las constantes de normalización para la ecuación (2.10) y evalúe la integral (3.6) en cada uno de los elementos de matriz, la cual se desarrolla como un producto de funciones Gamma.

3.5.2. Construcción de la Matriz del Hamiltoniano Zeeman Orbital en la Base de Estados Degenerados

Una vez que se contó ya con estas herramientas previas, se seleccionó una configuración de degeneraciones para un determinado ángulo de confinamiento dado de las tablas 2.3 y 2.4, se prosigue desarrollando para cada nivel de degeneración un arreglo matricial de dimensión $D \times D$ donde cada renglón representa cada una de las distintas configuraciones para cada estado degenerado, que sumados los números cuánticos puede tomar la etiqueta cuántica principal común $n_r + n_\theta + \mu + 1$. El número de arreglos para este caso dependerá de el número de niveles de energía degenerados que posee cada configuración para cada distinto ángulo de confinamiento.

Con lo anterior se evalúa los elementos de matriz (3.4), (3.5), (3.6) y (3.7). Para esto se inició el programa definiendo los parámetros sobre los cuales se va a construir la matriz, estos parámetros están definidos de acuerdo al ángulo de confinamiento, si el ángulo de confinamiento resulta ser menor o igual a π el programa solo queda en términos de un parámetro $\phi_0 = \pi/N$, mientras que si el ángulo de confinamiento es mayor a π queda en términos de un cociente expresado por el eigenvalor μ por lo que para este caso el programa queda definido en términos de dos parámetros. Posteriormente se define la dimensión de acuerdo con la dimensión del arreglo sobre el cual se va a generar la matriz, se definen los parámetros para cada uno de los programas que va a integrar las funciones antes mencionadas. Posteriormente se prosigue a definir un arreglo matricial de $D \times D$ con todas las entradas de este cero y cada entrada posible es de un valor complejo. A partir de este punto la construcción de la matriz se divide en dos partes. Para la primera parte se define una condición para el arreglo de tal forma que en cada punto de la diagonal se vuelva cero en cada entrada de esta. Para la segunda parte se prosigue a definir el resto de los elementos de la matriz, se comienza definiendo las reglas de selección descritas en la sección anterior, esto con el fin de optimizar el proceso computacional. Una vez definidas estas reglas se vuelve a subdividir el programa en tres sub-bloques donde cada uno corresponde a las contribuciones radial, angular y azimutal.

1. Contribución Radial

Se comienza definiendo los parámetros para μ , λ y ν en términos de las combinaciones dadas por el arreglo que se introdujo al inicio de este programa. Se manda llamar al arreglo que se construyó en la sección 3.5.1 y este queda definido por cada una de las entradas introducidas por el arreglo definido al inicio del programa. Este proceso se realiza dos veces ya que de acuerdo con la Ec. (3.6), la interacción en un elemento de matriz esta dada por distintas configuraciones para una determinada ν . De igual manera para calcular las constantes de normalización

de la Ec.(3.6) se definen dos funciones de acuerdo con la Ec.(2.10), ocupando el segundo arreglo definido en la sección 3.5.1 y obteniendo la raíz cuadrada del resultado , se calcula el producto interior para cada una de las funciones consigo misma antes descritas. Posteriormente estos resultados se integran como parámetros para determinar el producto interior, aplicando el mismo proceso que para calcular las constantes de normalización solo que en este caso se usa la Ec. (3.6) se calcula la contribución de la parte radial en el elemento de matriz.

2. Contribución Polar

Se comienza definiendo el parámetro ν en términos de las combinaciones dadas por el arreglo que se introdujo al inicio de este programa. Se manda llamar al arreglo que se construyó en la sección3.5.1 y este queda definido por cada una de las entradas introducidas por el arreglo definido, al inicio del programa. Este proceso se realiza dos veces ya que de acuerdo con la Ec. (3.5), la interacción en un elemento de matriz esta dada por distintas configuraciones para una determinada ν , en este caso de acuerdo a la segunda regla de selección las configuraciones para la contribución Polar solo pueden ser pares. Para calcular las constantes de normalización de la Ec. (3.5) se definen dos funciones de acuerdo con la Ec. (2.9), ocupando el segundo arreglo definido, en la sección 3.5.1 y obteniendo la raíz cuadrada del resultado , se calcula el producto interior para cada una de las funciones consigo misma antes descritas. Posteriormente estos resultados se integran como parámetros para determinar el producto interior, aplicando el mismo proceso que para calcular las constantes de normalización solo que en este caso se usa la Ec. (3.5) se calcula la contribución de la parte radial en el elemento de matriz.

3. Contribución Azimutal

Se comienza definiendo la constante \hbar , la cual forma parte de la interacción azimutal y provee de magnitud a los elementos de matriz. Para describir la contribución azimutal solo basta con incluir en el programa la primera regla de selección mostrada en la Ec. (3.4).

Una vez desarrolladas todas las contribuciones, para cada elemento de matriz distinto de cero, este queda definido de acuerdo al producto de cada una de las contribuciones descritas anteriormente, por lo que cada elemento de matriz se puede observar que es el producto de los resultados para las Ec.s (3.4), (3.5) y (3.6). Por lo que una vez realizado todo esto, la matriz queda construida.

3.5.3. Eigenvalores de la matriz

Lo que prosigue ahora es obtener los eigenvalores asociados a esta matriz, esto se hace por medio del comando eigvals.

Ya una vez que se cuenta con los eigenvalores asociados a un nivel de energía con un determinado número de estados degenerados, estos eigenvalores se guardan en un

3. EFECTO ZEEMAN PARA ÁTOMO DE HIDRÓGENO CONFINADO POR ÁNGULO DIEDRO

arreglo y se prosigue a definir otro arreglo, el cual determina el cambio de la energía final.

Se comienza definiendo el parámetro ν asociado al determinado nivel de energía sobre el cual se trabaja. Posteriormente dentro del mismo arreglo se añade un arreglo de $[0,3]$ en pasos de 0.2, este arreglo representa al campo magnético el cual varía de 0 a 3 Teslas. Se define la energía inicial para el H^0 como se muestra en la Ec. (2.12). Se terminan de definir parámetros como la constante giromagnética para el spín y el magnetón de Bohr, de tal forma que el producto final quede en unidades de energía. Posteriormente se define un arreglo matricial de $z \times 15$, donde z representa el número de elementos contenidos en el arreglo de eigenvalores, mientras que 15 es el número de elementos contenidos en el arreglo que define el cambio en la magnitud del campo magnético. De tal forma que en este punto lo que el arreglo hace es aplicar la interacción con el spín, el campo magnético y sumar la contribución inicial de E^0 . Al final en cada renglón se obtiene el corrimiento a lo largo del campo magnético para cada distinto eigenvalor de la matriz desarrollada con base en el método de teoría de perturbaciones para estados degenerados.

De esta forma para un determinado valor de energía con D estados degenerados, se obtiene una matriz en la cual se rompe la degeneración de estos y además se observa el corrimiento lineal de la energía para el átomo de Hidrógeno confinado en ángulo diedro en presencia de un campo magnético. Usando el programa Mathematica, se transfieren los resultados obtenidos de forma que cada renglón de la matriz represente ahora un elemento de un nuevo arreglo y a su vez cada renglón de la matriz se grafique respecto a la variación del campo magnético. Esto se realizó para todas las distintas degeneraciones, para las distintas configuraciones de confinamiento mostradas en las tablas 2.3 y 2.4, excepto el ángulo de confinamiento 2π ya que en este caso de acuerdo con las reglas de selección mostradas en la sección anterior, se tiene que todos los elementos de matriz se desvanecen.

3.5.4. Eigenfunciones de la matriz

Por último para obtener las eigenfunciones, se determinan los eigenvectores asociados a la matriz y sobre la base de estados degenerados asociados a un determinado nivel de energía, se definen las funciones de onda asociadas a cada elemento de la base, de modo que las eigenfunciones resultan de las combinaciones lineales de las funciones de onda asociadas a la base de estados degenerados términos de cada eigenvector contenido en el conjunto de eigenvectores asociados a los eigenvalores obtenidos previamente. De forma general lo que se hace es generar nuevas funciones al escribir cada eigenvector como combinación lineal en términos de la base de funciones de onda asociadas a un determinado número de estados degenerados, donde a cada estado le corresponde una función. Una vez que se cuenta con todas las eigenfunciones asociadas a un determinado bloque de degeneraciones se prosigue a graficarlas, para esto se dividen en dos: la parte angular y la parte radial. Para graficar la parte polar, primero se separa la parte angular de la ecuación de onda, se determinan las nuevas constantes de normalización y estas

se agregan a las nuevas funciones como parámetros, tales eigenfunciones se desarrollan en Mathematica, y mediante la función *3DPolarplot* se inserta cada eigenfunción y se prosigue a graficar. Para la parte radial se desarrolla un proceso similar a la parte polar, solo que en este caso se enfoca en la parte radial de la función de onda y se prosigue a graficar usando la función *Plot* de Mathematica.

Resultados: Desdoblamientos de Niveles de Energía y Eigenfunciones para las Distintas Configuraciones de Confinamiento

En este capítulo se ilustran de forma sistemática los desdoblamientos de los niveles Zeeman orbital y de espín, como funciones del ángulo de confinamiento y de los valores de la etiqueta cuántica magnética μ , como se observa en Ec. (2.7). Para cada distinto ángulo de confinamiento se identifica el conjunto de estados degenerados con el valor común de la etiqueta cuántica principal ν según la Ec. (2.11). Para cada valor de ν , se identifican las combinaciones de $n'_r + n'_\theta = n_r + n_\theta$ para valores de μ' y μ compatibles con las condiciones de las Ec.s (2.7) y (2.11). El orden de la degeneración que sobrevive D queda explícitamente determinada por estas ecuaciones. Se ilustran en el Apéndice B para los ángulos de confinamiento $\phi_0 = \pi, \pi/2, \pi/3, \pi/4$ y $\phi_0 = 3\pi/2, 5\pi/3, 7\pi/4, 2\pi$.

La matriz de la interacción orbital Zeeman se separa en bloques de dimensión $D \times D$, con base en las reglas de selección para n'_ϕ y n_ϕ de paridades opuestas, Ec.(3.7), y de la misma paridad, Ec.(3.8). Esta última conduce a que el bloque bajo consideración, a su vez se separe en dos bloques de dimensiones $D_+ \times D_+$ y $D_- \times D_-$, cuyos valores específicos se representan en el Apéndice B.

Los elementos de matriz involucran el producto de las integrales azimutales de $\langle \mu' | l_z | \mu \rangle$ en la Ec.(3.7), que reflejan la hermiticidad de la matriz completa, el traslape de las funciones polares es $\langle n'_\theta \mu' | n_\theta \mu \rangle$ según la Ec.(3.8) y las funciones radiales $\langle n'_r \lambda' | n_r \lambda \rangle$ Ec.(3.6).

La diagonalización de los bloques sucesivos de la matriz conduce a los resultados numéricos de los corrimientos de las energías orbitales ΔE_z con respecto a la energía de

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

los estados originalmente degenerados respectivos. También se obtienen los eigenvectores en las bases finitas de cada conjunto de estados degenerados: $\Psi_z = \sum |n_r n_\theta n_\phi \rangle \langle n_r n_\theta n_\phi | \Psi_z \rangle$.

Una muestra ilustrativa de los resultados sobre los corrimientos de energía Zeeman orbitales y contribución de espín, así como de las eigenfunciones orbitales, se presentan para los ángulos de confinamiento escogidos. Se formulan conclusiones generales sobre los resultados de los cálculos y su extensión, por inducción para ángulos menores y mayores que π .

4.1. Ángulo de Confinamiento π

Considerando el ángulo de confinamiento $\phi_0 = \pi$, este genera cinco distintos bloques degenerados que contienen distintas etiquetas cuánticas en n_ϕ , de acuerdo con la tabla 2.3 en la sección de π .

4.1.1. Segundo nivel energético, etiquetado por $\nu = 3$

Comenzando con el segundo bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de π , se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 3 \times 3$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de 1×1 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_θ son impares y para el otro caso el sub-bloque es de 2×2 . Dada la primera regla de selección para la matriz asociada al sub-bloque de 2×2 este bloque solo contiene dos elementos distintos de cero, donde el determinante secular es una combinación lineal de todos los elementos de matriz distintos de cero. Por lo que para el bloque completo se obtienen tres distintos eigenvalores. El estado que genera el sub-bloque de 1×1 queda directamente asociado a la energía que define al espacio degenerado, por lo que el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en tres distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.1 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

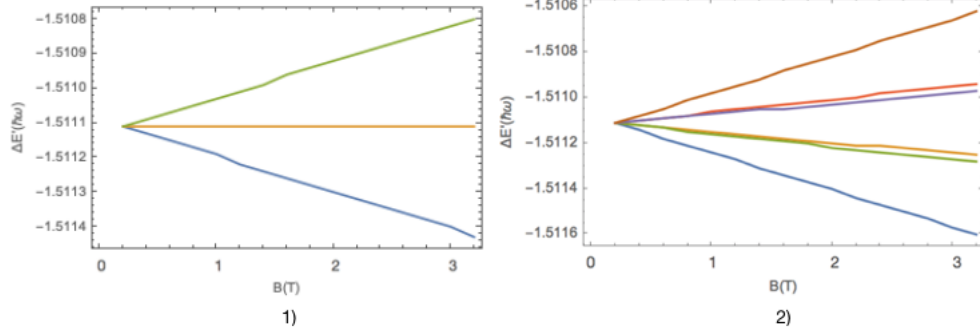


Figura 4.1: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al segundo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

Al considerar el bloque de 3×3 , se observa que este se divide en dos sub-bloques: uno de 1×1 y otro de 2×2 . Para el caso del primer sub-bloque de 1×1 la energía de este bloque queda asociada a la energía inicial de todos los estados degenerados. Para el caso del bloque de 2×2 se observa que al aplicar el método descrito en la sección 3.2, se obtienen dos distintas raíces con el mismo valor pero signo distinto. Pero al momento de obtener los eigenvectores asociados a los eigenvalores previamente obtenidos, reescribiendo cada eigenvector en términos de la base de funciones, se obtiene una nueva base de eigenfunciones etiquetada por las nuevas eigenenergías. Para el caso del sub-bloque de 2×2 para diferenciar a los nuevos estados etiquetados por las nuevas eigenenergías, se analizan los dos nuevos estados que se encuentran etiquetados por la misma eigenenergía pero con diferente signos. En las figuras 4.2 y 4.3 se presentan las Eigenfunciones para dichos estados, en coordenadas esféricas y a un radio fijo.

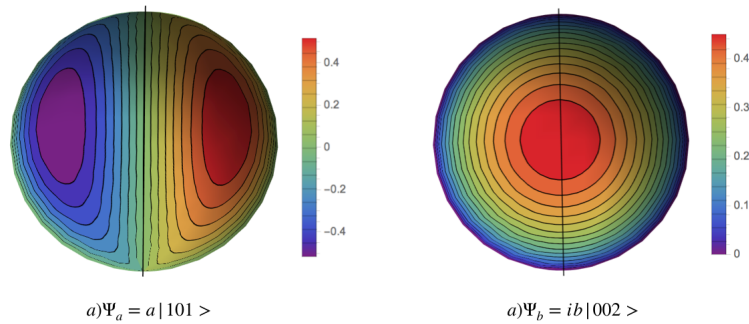


Figura 4.2: Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

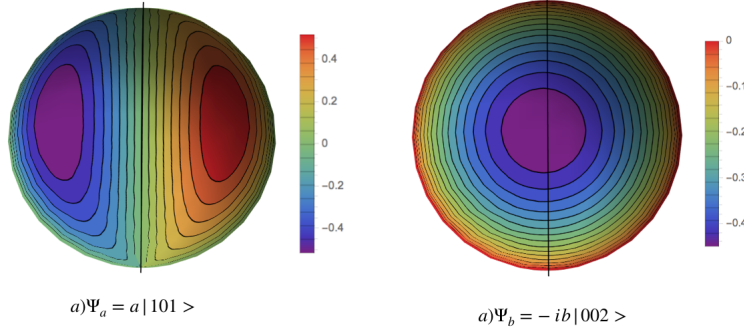


Figura 4.3: Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo negativo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.

Los valores expresados en cada función son los siguientes: $a = b = c = 0.707107$, esto para ambas funciones mostradas. Para el caso de esta configuración de confinamiento de $\phi_0 = \pi$.

4.1.2. Tercer nivel energético, etiquetado por $\nu = 4$

Para el tercer bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de π , se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 6 \times 6$, la matriz generada se divide en dos sub-bloques, para este caso el primer sub-bloque queda dividido en un sub-bloque de 2×2 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso el sub-bloque es de 4×4 . En el caso para el sub-bloque de 2×2 hereda la estructura del sub-bloque de 2×2 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de este sub-bloque todos los estados quedan distintos. Al momento de realizar la diagonalización para el sub-bloque de 4×4 , al calcular el determinante secular se observa que este se factoriza de tal modo que queda una ecuación de segundo grado, en la cual todos los elementos de matriz se ven involucrados, por tanto para este sub-bloque solo se obtienen dos energías distintas a la energía degenerada y de los cuatro estados degenerados solo se logran desdoblar dos. Dada la estructura del determinante secular es imposible determinar que estados quedan sin degenerar. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en cuatro distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.4 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

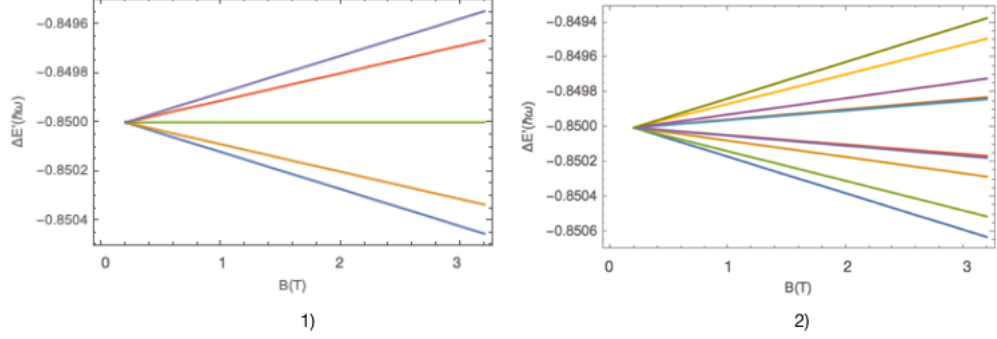


Figura 4.4: Desdoblamiento ZeEman para la energía asociada al tercer nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.1.3. Cuarto nivel energético, etiquetado por $\nu = 5$

En el cuarto bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de π , se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 10 \times 10$, este bloque se divide en dos sub-bloques, para este caso la dimensión del primer sub-bloque es de 4×4 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso la dimensión del sub-bloque es de 6×6 . El sub-bloque de 4×4 hereda la estructura del sub-bloque de 4×4 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de este sub-bloque, este hereda la misma estructura de degeneración, conservando dos estados sin degenerar. Mientras que el caso del bloque de 6×6 en el que todos los estados rompen la degeneración. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en ocho distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.5 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

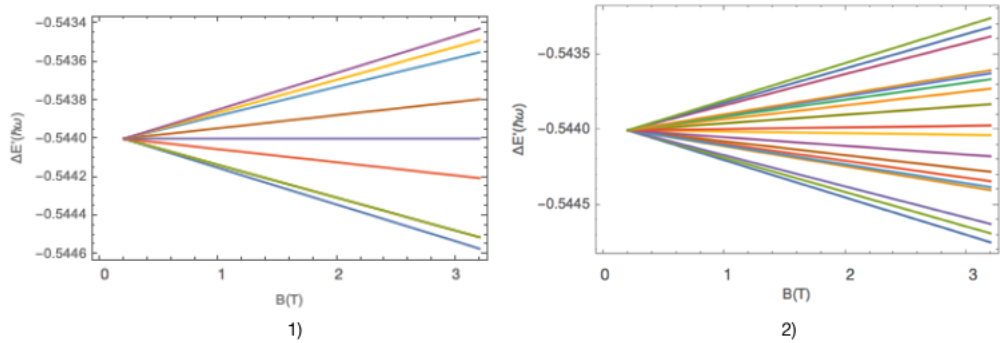


Figura 4.5: Desdoblamiento ZeEman para la energía asociada al cuarto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

4.1.4. Quinto nivel energético, etiquetado por $\nu = 6$

En el quinto bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de π , se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 15 \times 15$, el bloque se divide en dos sub-bloques para este caso la dimensión el primer sub-bloque es de 6×6 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso la dimensión del sub-bloque es de 9×9 . El sub-bloque de 6×6 hereda la estructura del sub-bloque de 6×6 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de este sub-bloque, este hereda la misma estructura de degeneración, conservando todos sus estados que rompen la degeneración. Mientras que el caso del bloque de 9×9 en el que tres estados permanecen sin degenerar. Dada la estructura del determinante secular, el cual se reduce a un polinomio de tercer grado, es imposible determinar que estados quedan sin degenerar. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en doce distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.6 se muestran dichos desdoblamientos , incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

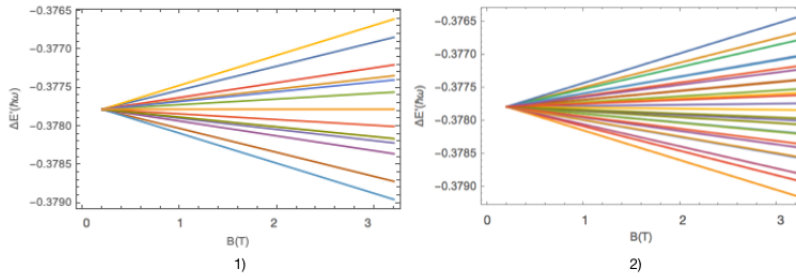


Figura 4.6: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al quinto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.1.5. Sexto nivel energético, etiquetado por $\nu = 7$

En el sexto bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de π , se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 21 \times 21$, el bloque queda dividido en dos sub-bloques, la dimensión del primer sub-bloque es de 9×9 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso, la dimensión del sub-bloque es de 12×12 . El sub-bloque de 9×9 hereda la estructura del sub-bloque de 9×9 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de este sub-bloque, este hereda la misma estructura de degeneración, conservando todos 3 estados que mantienen la misma energía degenerada. Mientras que el caso del bloque de 12×12 todos los estados rompen la degeneración. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en 18 distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.7 se muestran dichos desdoblamientos , incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

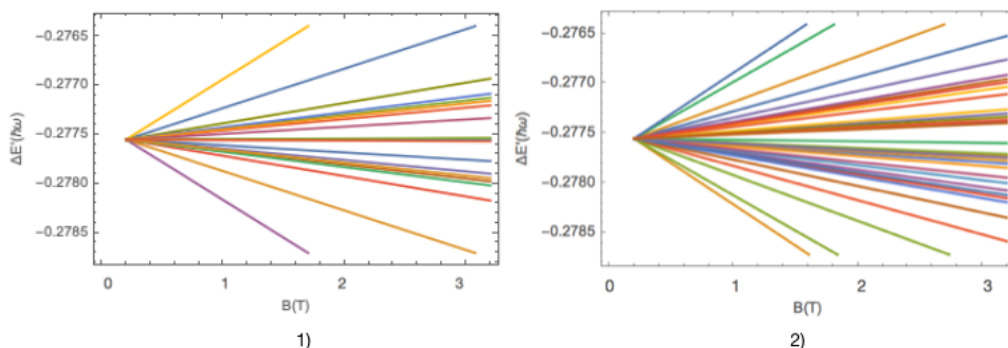


Figura 4.7: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al sexto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

El único sub-bloque en el cual se todos los estados rompen la degeneración es en el segundo, esto se debe al hecho de que el bloque se divide en dos sub-bloques, uno de 1×1 y el otro de 2×2 para el sub-bloque de 1×1 se observa que este se genera solo por un estado, de modo que este queda directamente asociado con la energía del estado sin degenerar. En este último bloque a diferencia de los demás, se observa que hay tres estados que pueden alcanzar el umbral de ionización antes de que el campo magnético llegue a 3 teslas, y de estos tres estados solo dos pueden alcanzar el umbral antes de que el campo magnético llegue a 3 teslas.

En general se observa que cada bloque de la sección π de la tabla 2.3, se relaciona con el siguiente bloque. Esto se debe al hecho de que cada bloque con distintos valores en las etiquetas para n_ϕ se puede dividir en dos sub-bloques de acuerdo con la paridad de sus valores en las etiquetas para $n_{\theta'}$ y n_θ ; de este modo partiendo del estado base con un único estado, el siguiente bloque degenerado se divide en dos sub-bloques, para el sub-bloque que se genera con $n_{\theta'}$ y n_θ pares, este hereda la estructura del bloque anterior con $n_{\theta'}$ y n_θ impares. Y para el caso de $\phi_0 = \pi$ esto se cumple para todos sus bloques, de tal forma que estos están concatenados ya que el sub-bloque con $n_{\theta'}$ y n_θ par lo heredan del bloque anterior y el sub-bloque con $n_{\theta'}$ y n_θ lo ceden al siguiente sub-bloque.

4.2. Ángulo de Confinamiento $\frac{\pi}{2}$

Considerando el ángulo de confinamiento $\phi_0 = \frac{\pi}{2}$, este genera seis distintos bloques degenerados que contienen distintas etiquetas cuánticas en n_ϕ , de acuerdo con la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{2}$.

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

4.2.1. Tercer nivel energético, etiquetado por $\nu = 5$

Comenzando con el tercer bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{2}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 4 \times 4$, se obtiene un sub-bloque de 3×3 en el cual solo se distinguen 4 elementos de matriz distintos de cero. Para este caso al momento de diagonalizar, al analizar el determinante secular se obtiene un polinomio de tercer grado, el cual se reduce a un polinomio de segundo grado, por tanto solo se obtienen dos estados que rompen la degeneración al obtener dos raíces para este polinomio se observa que todos los elementos de la matriz se combinan, por lo que no se puede asegurar que estados son los que se desdoblaron a través del campo magnético. El desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en 3 distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.8 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

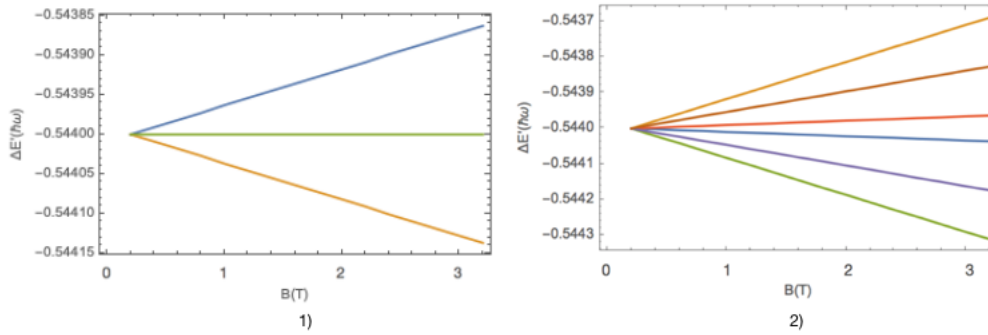


Figura 4.8: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al tercer nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

Al considerar el bloque de 4×4 , se observa que este se divide en dos sub-bloques: uno de 1×1 y otro de 3×3 . Para el caso del primer sub-bloque de 1×1 la energía de este bloque queda asociada a la energía inicial de todos los estados degenerados. Para el caso del bloque de 3×3 se observa que al aplicar el método descrito en la sección 3.2, al momento de obtener el determinante secular de la matriz asociada al bloque degenerado se reduce de un polinomio de grado, a un polinomio de segundo grado. Por lo que en este bloque se observa que la degeneración persiste. Pero al momento de obtener los eigenvectores asociados a los eigenvalores previamente obtenidos, reescribiendo cada eigenvector en términos de la base de funciones, se obtiene una nueva base de eigenfunciones etiquetada por las nuevas eigenenergías. Para el caso del sub-bloque de 3×3 para diferenciar a los nuevos estados etiquetados por las nuevas eigenenergías, se analizan los dos nuevos estados que se encuentran etiquetados por la misma eigenenergía pero con diferente signos. En las figuras 4.9 y 4.10 se presentan las Eigenfunciones para dichos estados, en coordenadas esféricas y a un radio fijo.

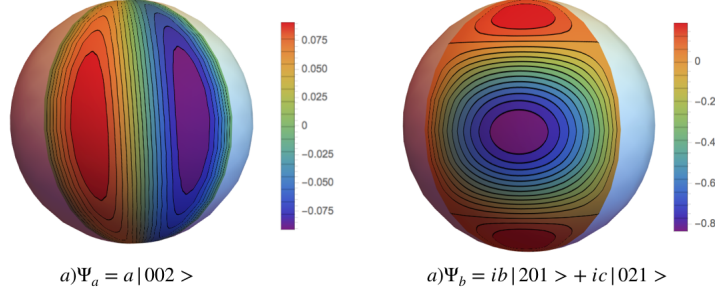


Figura 4.9: Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.

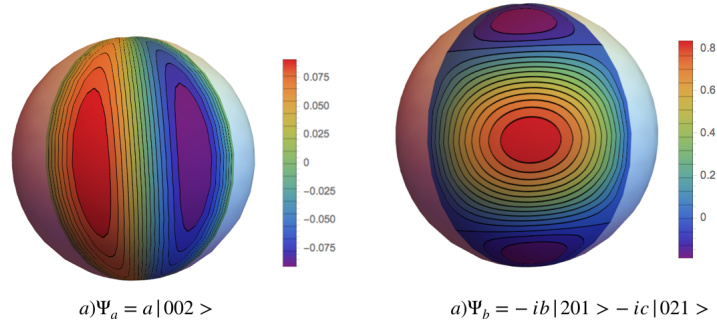


Figura 4.10: Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo negativo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.

Los valores de expresados en cada función son los siguientes: $a = 0.75272$, $b = -0.514449$ y $c = 0.410798$, esto para ambas funciones mostradas. Para el caso de esta configuración de confinamiento de $\phi_0 = \frac{\pi}{2}$.

4.2.2. Cuarto nivel energético, etiquetado por $\nu = 6$

Para el cuarto bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{2}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 6 \times 6$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 3×3 para el caso en el que n_θ y n_ϕ son impares y para el otro caso el sub-bloque es de 3×3 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 3×3 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de dicho sub-bloque este hereda la misma estructura de degeneración, conservando un estado sin degenerar. Mientras que el caso del sub-

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTOS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

bloque de paridad no conserva también la misma estructura del bloque anterior. Al heredar la misma estructura, también heredan el mismo número de estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en cuatro distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.11 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

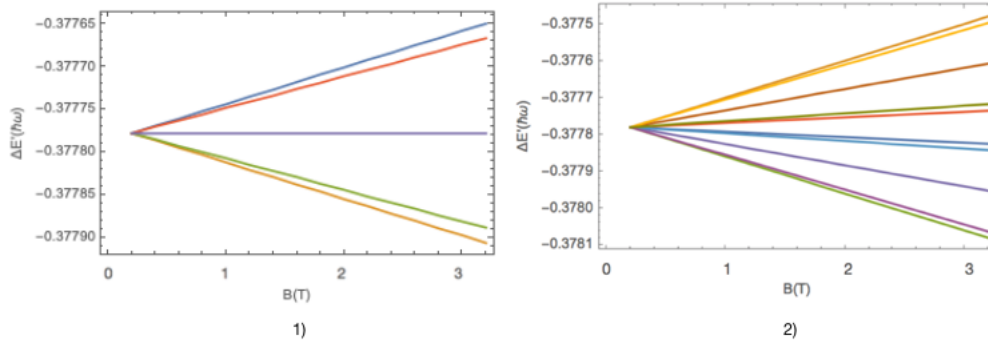


Figura 4.11: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al cuarto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.2.3. Quinto nivel energético, etiquetado por $\nu = 7$

En el quinto bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{2}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 9 \times 9$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 3×3 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso la dimensión del sub-bloque es de 6×6 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 3×3 del subespacio degenerado anterior, mientras que el sub-bloque de 6×6 genera una nueva estructura. Para el caso del primer sub-bloque solo un estado mantiene la degeneración, mientras que en el segundo bloque la ecuación asociada al determinante secular se factoriza de tal forma que el polinomio original de sexto grado se reduce a uno de cuarto grado, obteniendo así solo cuatro estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en seis distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.12 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

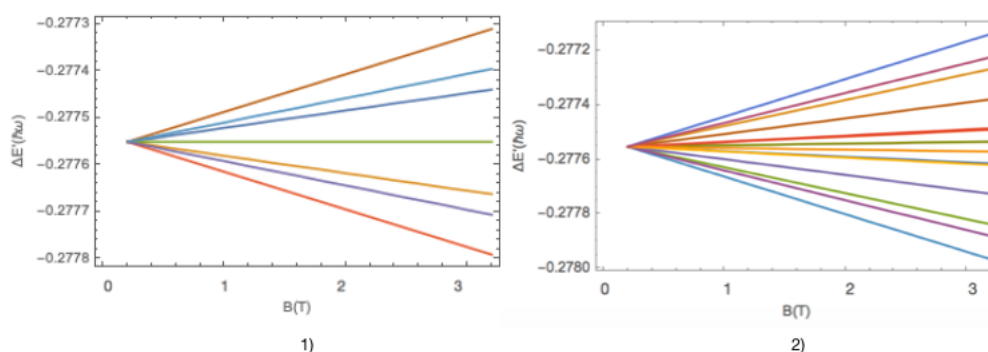


Figura 4.12: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al quinto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.2.4. Sexto nivel energético, etiquetado por $\nu = 8$

Para el sexto bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{2}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 12 \times 12$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 6×6 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso el sub-bloque es de 6×6 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 6×6 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de dicho sub-bloque este hereda la misma estructura de degeneración, conservando un estados sin degenerar. Mientras que el caso del sub-bloque de paridad non conserva también la misma estructura del bloque anterior. Al heredar la misma estructura, también heredan el mismo numero de estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en ocho distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.13 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

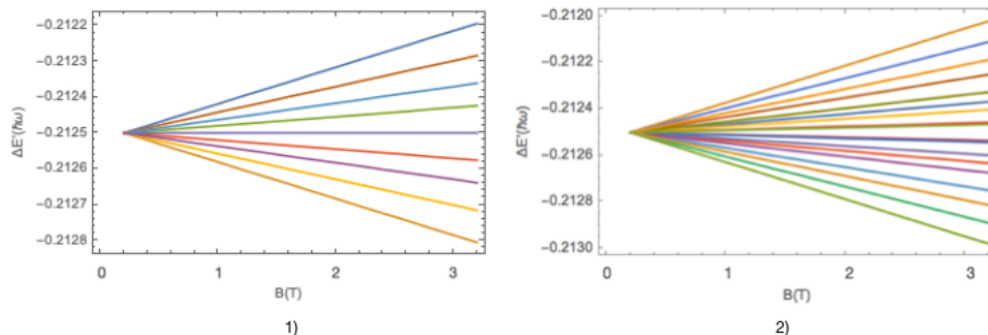


Figura 4.13: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al sexto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.2.5. Séptimo nivel energético, etiquetado por $\nu = 9$

En el séptimo bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{2}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 16 \times 16$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 6×6 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso la dimensión del sub-bloque es de 10×10 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 6×6 del subespacio degenerado anterior, mientras que el sub-bloque de 10×10 genera una nueva estructura. Para el caso del primer sub-bloque solo un estado mantiene la degeneración, mientras que en el segundo bloque la ecuación asociada al determinante secular se factoriza de tal forma que el polinomio original de décimo grado se reduce a uno de octavo grado, obteniendo así solo ocho estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en doce distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.14 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

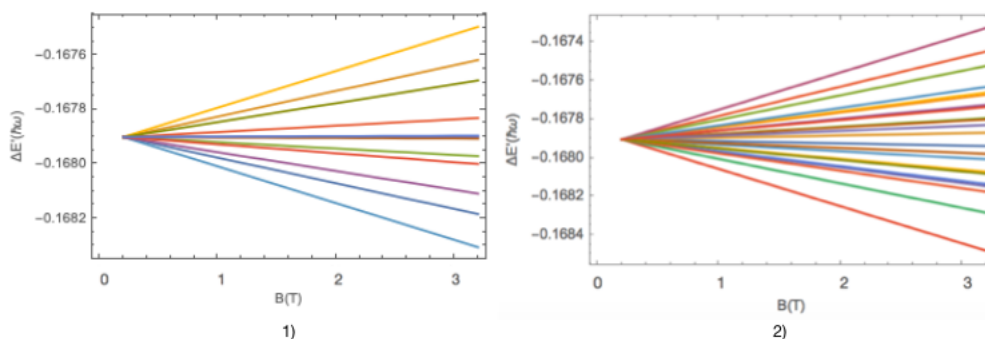


Figura 4.14: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al séptimo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.2.6. Octavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 10$

Para el octavo bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{2}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 20 \times 20$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 10×10 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso el sub-bloque es de 10×10 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 10×10 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de dicho sub-bloque este hereda la misma estructura de degeneración, conservando un estados sin degenerar. Mientras que el caso del sub-bloque de paridad non conserva también la misma estructura del bloque anterior. Al heredar la misma estructura, también heredan el mismo numero de estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en dieciséis distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.15 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

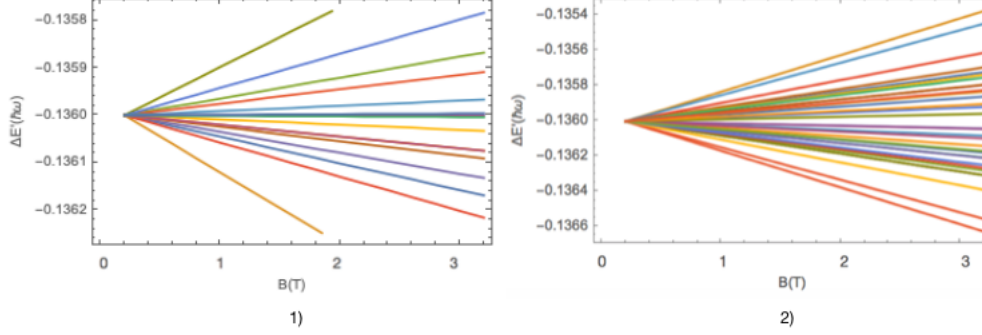


Figura 4.15: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al octavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

Para el caso de esta configuración de confinamiento de $\phi_0 = \frac{\pi}{2}$, a diferencia del caso anterior se observa que los bloques degenerados se desfasan un bloque con respecto a la configuración de confinamiento de $\phi_0 = \pi$. Además de que para esta configuración de confinamiento se presentan una mayor número de bloques para analizar.

A diferencia del caso anterior, en esta configuración no se obtiene ningún bloque en el que todos sus estados se logren desdoblar completamente. Esto se debe principalmente a que la estructura de cada bloque esta en función del ángulo de confinamiento de acuerdo con la ecuación (2.12). Pero un hecho que si es importante al resaltar es la forma en que se generan los bloques de acuerdo a sus sub-bloques. De acuerdo con las reglas de selección definidas en la sección 3.4 y de los resultados que se presentaron en la sección anterior, obtenemos que cada bloque se conecta con el anterior y con el siguiente, esto por que para el sub-bloque con $n_{\theta'}$ y n_{θ} par hereda la misma estructura del sub-bloque con $n_{\theta'}$ y n_{θ} non del subespacio anterior y a su vez el nuevo sub-bloque generado con $n_{\theta'}$ y n_{θ} impar heredara la estructura para el sub-bloque del siguiente subespacio con $n_{\theta'}$ y n_{θ} par. Para este caso en particular, dicho "anidamiento" de bloques se ve desfasado en cada bloque, de modo que en el número de bloque no se presenta dicho "anidamiento", mientras que si el número de bloque es par el "anidamiento" se estaciona de tal forma que para estos bloques sus propios sub-bloques comparten la misma estructura, heredada del sub-bloque con $n_{\theta'}$ y n_{θ} impares del subespacio anterior. Esto se debe a la configuración de confinamiento seleccionada.

4.3. Ángulo de Confinamiento $\frac{\pi}{3}$

Considerando el ángulo de confinamiento $\phi_0 = \frac{\pi}{3}$, este genera cinco distintos bloques degenerados que contienen distintas etiquetas cuánticas en n_{ϕ} , de acuerdo con la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{3}$.

4.3.1. Cuarto nivel energético, etiquetado por $\nu = 7$

Comenzando con el cuarto bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{3}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 5 \times 5$, se obtiene un sub-bloque de 3×3 en el cual solo se distinguen 4 elementos de matriz distintos de cero. Para este caso al momento de diagonalizar, al analizar el determinante secular se obtiene un polinomio de tercer grado, el cual se reduce a un polinomio de segundo grado, por tanto solo se obtienen dos estados que rompen la degeneración al obtener dos raíces para este polinomio se observa que todos los elementos de la matriz se combinan, por lo que no se puede asegurar que estados son los que se desdoblaron a través del campo magnético. El desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en 3 distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.16 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

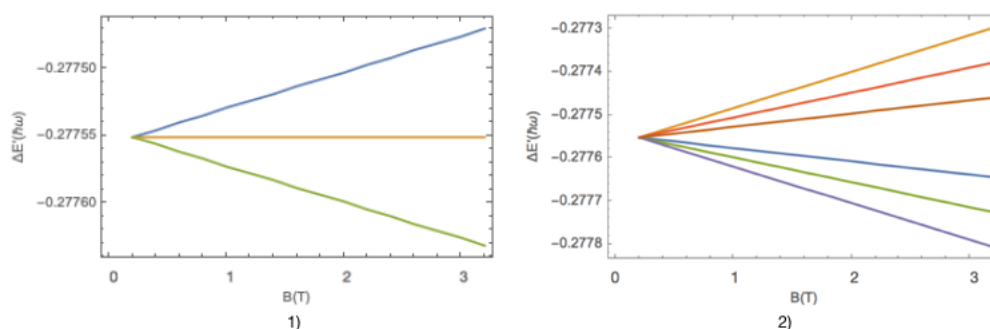


Figura 4.16: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al cuarto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

Al considerar el bloque de 5×5 , se observa que este se divide en dos sub-bloques: uno de 2×2 y otro de 3×3 . Para el caso del primer sub-bloque de 2×2 la energía de este bloque queda asociada a la energía inicial de todos los estados degenerados. Para el caso del bloque de 3×3 se observa que al aplicar el método descrito en la sección 3.2, al momento de obtener el determinante secular de la matriz asociada al bloque degenerado se reduce de un polinomio de grado, a un polinomio de segundo grado. Por lo que en este bloque se observa que la degeneración persiste. Pero al momento de obtener los eigenvectores asociados a los eigenvalores previamente obtenidos, reescribiendo cada eigenvector en términos de la base de funciones, se obtiene una nueva base de eigenfunciones etiquetada por las nuevas eigenenergías. Para el caso del sub-bloque de 3×3 para diferenciar a los nuevos estados etiquetados por las nuevas eigenenergías, se analizan los dos nuevos estados que se encuentran etiquetados por la misma eigenenergía pero con diferente signo. En las figuras 4.17 y 4.18 se presentan las Eigenfunciones para dichos estados, en coordenadas esféricas y a un radio fijo.

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

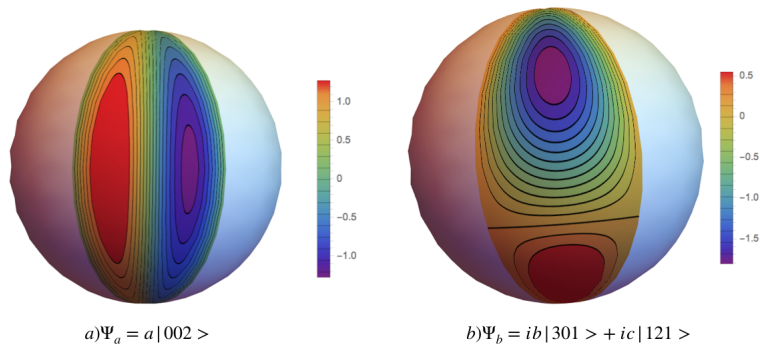


Figura 4.17: Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.

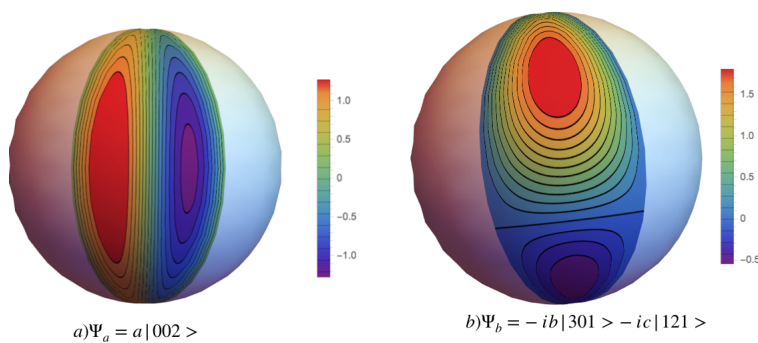


Figura 4.18: Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo negativo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.

Los valores de expresados en cada función son los siguientes: $a = , b = y c = ,$ esto para ambas funciones mostradas. Para el caso de esta configuración de confinamiento de $\phi_0 = \frac{\pi}{3}$.

4.3.2. Quinto nivel energético, etiquetado por $\nu = 8$

Para el quinto bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{3}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 7 \times 7$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 3×3 para el caso en el que n_θ y n_ϕ son pares y para el otro caso el sub-bloque es de 4×4 . El primer sub-bloque

con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 3×3 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de dicho sub-bloque este hereda la misma estructura de degeneración, conservando un estados sin degenerar, mientras que el sub-bloque de 4×4 genera una nueva estructura. Para el caso del primer sub-bloque solo un estado mantiene la degeneración, mientras que en el segundo bloque la ecuación asociada al determinante secular se factoriza de tal forma que el polinomio original de cuarto grado se reduce a uno de segundo grado, obteniendo así solo dos estados que se desdoblán. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en cuatro distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.19 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

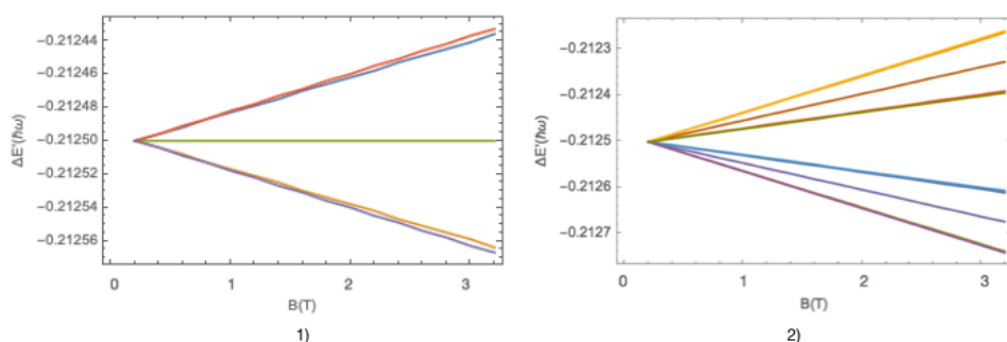


Figura 4.19: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al quinto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.3.3. Sexto nivel energético, etiquetado por $\nu = 9$

Para el sexto bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{3}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 9 \times 9$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 4×4 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son pares y para el otro caso el sub-bloque es de 5×5 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 4×4 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de dicho sub-bloque este hereda la misma estructura de degeneración, conservando dos estados sin degenerar, mientras que el sub-bloque de 5×5 genera una nueva estructura. Para el caso del primer sub-bloque solo dos estados mantienen la degeneración, mientras que en el segundo bloque la ecuación asociada al determinante secular se factoriza de tal forma que el polinomio original de quinto grado se reduce a uno de cuarto grado, obteniendo así solo cuatro estados que se desdoblán. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en seis distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.20 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

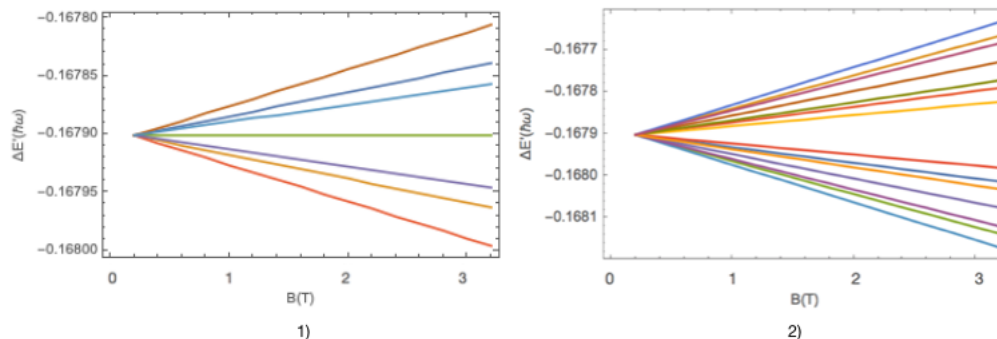


Figura 4.20: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al sexto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.3.4. Séptimo nivel energético, etiquetado por $\nu = 10$

Para el séptimo bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{3}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 12 \times 12$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 5×5 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son pares y para el otro caso el sub-bloque es de 7×7 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 5×5 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de dicho sub-bloque este hereda la misma estructura de degeneración, conservando un estado sin degenerar, mientras que el sub-bloque de 7×7 genera una nueva estructura. Para el caso del primer sub-bloque solo un estado mantiene la degeneración, mientras que en el segundo bloque la ecuación asociada al determinante secular se factoriza de tal forma que el polinomio original de séptimo grado se reduce a uno de cuarto grado, obteniendo así solo cuatro estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en ocho distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.21 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

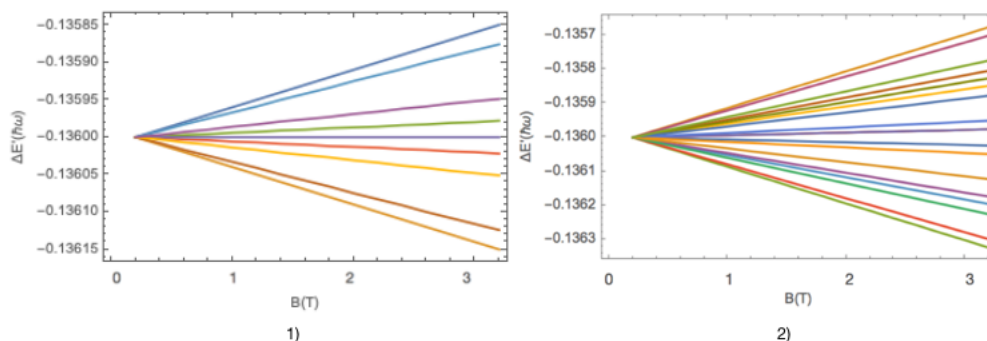


Figura 4.21: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al séptimo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.3.5. Octavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 11$

Para el octavo bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{3}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 15 \times 15$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 7×7 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son pares y para el otro caso el sub-bloque es de 8×8 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 7×7 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de dicho sub-bloque este hereda la misma estructura de degeneración, conservando tres estados sin degenerar, mientras que el sub-bloque de 8×8 genera una nueva estructura. Para el caso del primer sub-bloque solo tres estados mantienen la degeneración, mientras que en el segundo bloque la ecuación asociada al determinante secular se factoriza de tal forma que el polinomio original de octavo grado se reduce a uno de sexto grado, obteniendo así solo seis estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en ocho distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.22 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

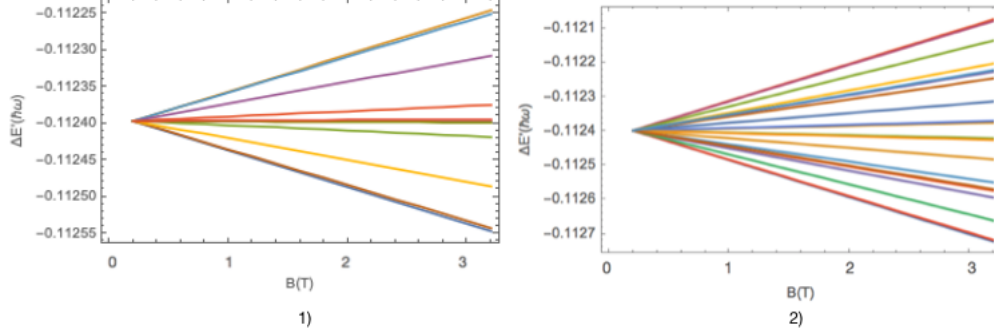


Figura 4.22: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al octavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

Para el caso de esta configuración de confinamiento de $\phi_0 = \frac{\pi}{3}$, a diferencia del caso anterior se observa que los bloques degenerados se desfasan dos bloques con respecto a la configuración de confinamiento de $\phi_0 = \pi$. Además de que para esta configuración de confinamiento se presentan el mismo número de bloques para analizar que para la configuración de confinamiento de $\phi_0 = \pi$ y a su vez un menor número de bloques que con respecto a la configuración de confinamiento de $\phi_0 = \frac{\pi}{2}$.

A diferencia del primer caso, en esta configuración no se obtiene ningún bloque en el que todos sus estados se logren desdoblar completamente. Esto se debe principalmente a que la estructura de cada bloque está en función del ángulo de confinamiento de acuerdo con la ecuación (2.12). En general se observa que cada bloque se relaciona con el siguiente bloque, siguiendo una configuración similar a la configuración de confinamiento de $\phi_0 = \pi$, solo que a diferencia de esa configuración la dimensión de cada sub-bloque es non, a excepción del último sub-bloque para el último bloque, de modo que la concatenación de los bloques queda en términos de puros números nones y además primos.

4.4. Ángulo de Confinamiento $\frac{\pi}{4}$

Considerando el ángulo de confinamiento $\phi_0 = \frac{\pi}{4}$, este genera tres distintos bloques degenerados que contienen distintas etiquetas cuánticas en n_ϕ , de acuerdo con la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{4}$.

4.4.1. Quinto nivel energético, etiquetado por $\nu = 9$

Comenzando con el cuarto bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{4}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 6 \times 6$, se obtiene un sub-bloque de 4×4 . Para este caso al momento de diagonalizar, al analizar el determinante secular se obtiene un polinomio de cuarto grado, el cual se reduce a

un polinomio de segundo grado, por tanto solo se obtienen dos estados que rompen la degeneración al obtener dos raíces para este polinomio se observa que todos los elementos de la matriz se combinan, por lo que no se puede asegurar que estados son lo que se desdoblan a través del campo magnético. El desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en 3 distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.23 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

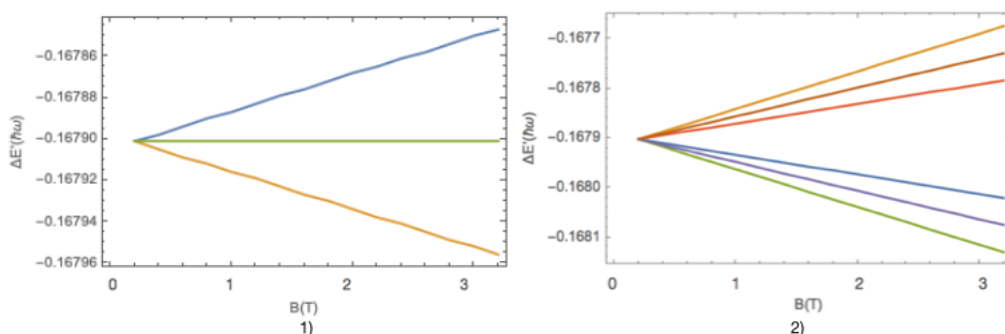


Figura 4.23: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al quinto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

Al considerar el bloque de 6×6 , se observa que este se divide en dos sub-bloques: uno de 2×2 y otro de 4×4 . Para el caso del primer sub-bloque de 2×2 la energía de este bloque queda asociada a la energía inicial de todos los estados degenerados. Para el caso del bloque de 4×4 se observa que al aplicar el método descrito en la sección 3.2, al momento de obtener el determinante secular de la matriz asociada al bloque degenerado se reduce de un polinomio de grado, a un polinomio de segundo grado. Por lo que en este bloque se observa que la degeneración persiste. Pero al momento de obtener los eigenvectores asociados a los eigenvalores previamente obtenidos, reescribiendo cada eigenvector en términos de la base de funciones, se obtiene una nueva base de eigenfunciones etiquetada por las nuevas eigenenergías. Para el caso del sub-bloque de \times para diferenciar a los nuevos estados etiquetados por las nuevas eigenenergías, se analizan los dos nuevos estados que se encuentran etiquetados por la misma eigenenergía pero con diferente signos. En las figuras 4.24 y 4.25 se presentan las Eigenfunciones para dichos estados, en coordenadas esféricas y a un radio fijo.

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

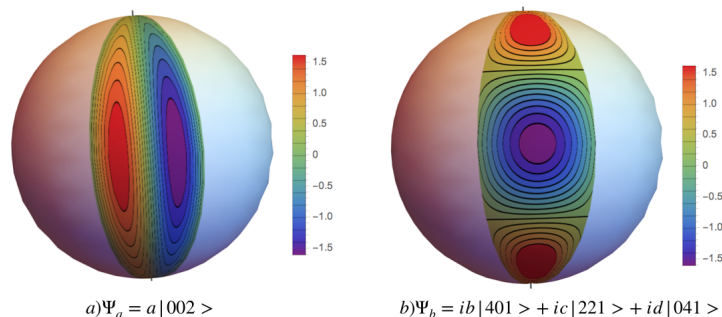


Figura 4.24: Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.

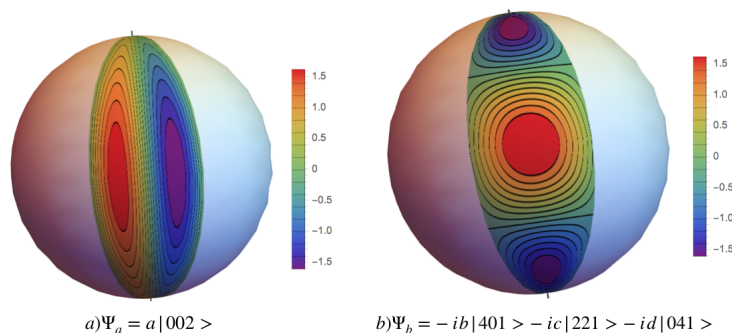


Figura 4.25: Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.

Los valores de expresados en cada función son los siguientes: $a = 0.795219$, $b = -0.390351$, $c = 0.461951$ Y $d = -0.0430602$, esto para ambas funciones mostradas. Para el caso de esta configuración de confinamiento de $\phi_0 = \frac{\pi}{4}$.

4.4.2. Sexto nivel energético, etiquetado por $\nu = 10$

Para el sexto bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{4}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 8 \times 8$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 4×4 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso el sub-bloque es de 4×4 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 4×4 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de dicho sub-bloque este hereda la misma estructura de

degeneración, conservando dos estados sin degenerar. Mientras que el caso del sub-bloque de paridad non conserva también la misma estructura del bloque anterior. Al heredar la misma estructura, también heredan el mismo numero de estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en cuatro distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.26 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

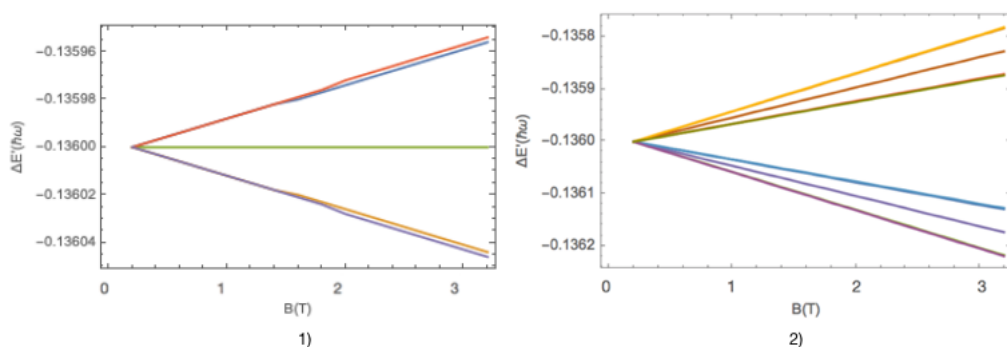


Figura 4.26: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al sexto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.4.3. Séptimo nivel energético, etiquetado por $\nu = 11$

En el séptimo bloque de degeneraciones de la tabla 2.3 en la sección de $\frac{\pi}{4}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 10 \times 10$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 4×4 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso la dimensión del sub-bloque es de 6×6 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 4×4 del subespacio degenerado anterior, mientras que el sub-bloque de 6×6 genera una nueva estructura. Para el caso del primer sub-bloque solo dos estados mantienen la degeneración, mientras que en el segundo bloque la ecuación asociada al determinante secular se factoriza de tal forma que el polinomio original de sexto grado se reduce a uno de segundo grado, obteniendo así solo dos estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en cuatro distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.27 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

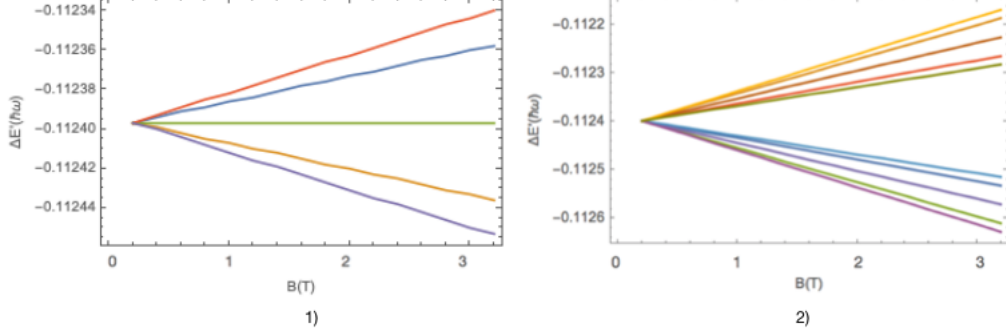


Figura 4.27: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al séptimo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

Para el caso de esta configuración de confinamiento de $\phi_0 = \frac{\pi}{4}$, a diferencia del primer caso se observa que los bloques degenerados se desfasan 3 bloques con respecto a la configuración de confinamiento de $\phi_0 = \pi$. Además de que para esta configuración de confinamiento se presentan una menor número de bloques para analizar, respecto a los confinamientos anteriores.

A diferencia del primer caso, en esta configuración no se obtiene ningún bloque en el que todos sus estados se logren desdoblar completamente. Esto se debe principalmente a que la estructura de cada bloque esta en función del ángulo de confinamiento de acuerdo con la ecuación (2.12). Pero un hecho que si es importante al resaltar es la forma en que se generan los bloques de acuerdo a sus sub-bloques. De acuerdo con las reglas de selección definidas en la sección 3.4 y de los resultados que se presentaron en las secciones anteriores, obtenemos que cada bloque se conecta con el anterior y con el siguiente, esto por que para el sub-bloque con $n_{\theta'}$ y n_{θ} par hereda la misma estructura del sub-bloque con $n_{\theta'}$ y n_{θ} non del subespacio anterior y a su vez el nuevo sub-bloque generado con $n_{\theta'}$ y n_{θ} impar heredara la estructura para el sub-bloque del siguiente subespacio con $n_{\theta'}$ y n_{θ} par. Para este caso en particular, dicho .anidamiento" de bloques se ve desfasado en cada bloque, de modo que en el número de bloque no se presenta dicho .anidamiento", mientras que si el número de bloque es par el .anidamiento" se estaciona de tal forma que para estos bloques sus propios sub-bloques comparten la misma estructura, heredada del sub-bloque con $n_{\theta'}$ y n_{θ} impares del subespacio anterior. Aunque dicho efecto solo se logra apreciar en un bloque.

4.5. Ángulo de Confinamiento $\frac{3\pi}{2}$

Considerando el ángulo de confinamiento $\phi_0 = \frac{3\pi}{2}$, este genera ocho distintos bloques degenerados que contienen distintas etiquetas cuánticas en n_{ϕ} , de acuerdo con la tabla 2.4 en la sección de $\frac{3\pi}{2}$.

4.5.1. Sexto nivel energético, etiquetado por $\nu = 11/3$

Comenzando con el sexto bloque de degeneraciones de la tabla 2.4 en la sección de $\frac{3\pi}{2}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 4 \times 4$, se obtiene un sub-bloque de 3×3 en el cual solo se distinguen 4 elementos de matriz distintos de cero. Para este caso al momento de diagonalizar, al analizar el determinante secular se obtiene un polinomio de cuarto grado, el cual se reduce a un polinomio de segundo grado, por tanto solo se obtienen dos estados que rompen la degeneración al obtener dos raíces para este polinomio se observa que todos los elementos de la matriz se combinan, por lo que no se puede asegurar que estados son los que se desdoblaron a través del campo magnético. El desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en dos distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.28 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

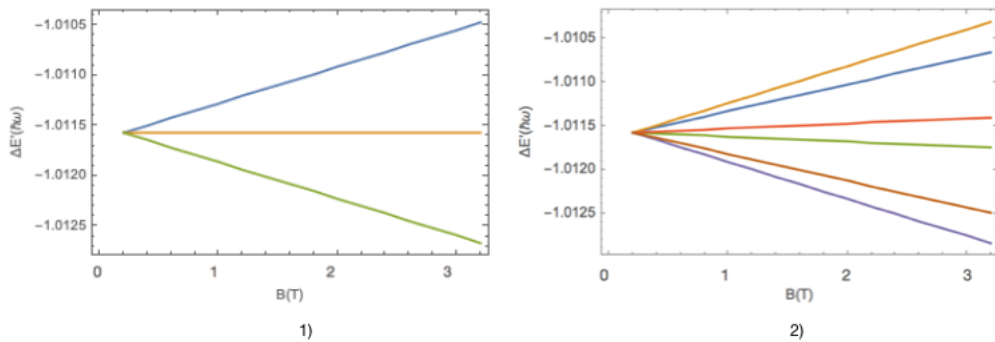


Figura 4.28: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al sexto nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

Al considerar el bloque de 4×4 , se observa que este se divide en dos sub-bloques: uno de 1×1 y otro de 3×3 . Para el caso del primer sub-bloque de 1×1 la energía de este bloque queda asociada a la energía inicial de todos los estados degenerados. Para el caso del bloque de 3×3 se observa que al aplicar el método descrito en la sección 3.2, al momento de obtener el determinante secular de la matriz asociada al bloque degenerado se reduce de un polinomio de grado, a un polinomio de segundo grado. Por lo que en este bloque se observa que la degeneración persiste. Pero al momento de obtener los eigenvectores asociados a los eigenvalores previamente obtenidos, reescribiendo cada eigenvector en términos de la base de funciones, se obtiene una nueva base de eigenfunciones etiquetada por las nuevas eigenenergías. Para el caso del sub-bloque de 3×3 para diferenciar a los nuevos estados etiquetados por las nuevas eigenenergías, se analizan los dos nuevos estados que se encuentran etiquetados por la misma eigenenergía pero con diferentes signos. En las figuras 4.29 y 4.30 se presentan las Eigenfunciones para dichos estados, en coordenadas esféricas y a un radio fijo.

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

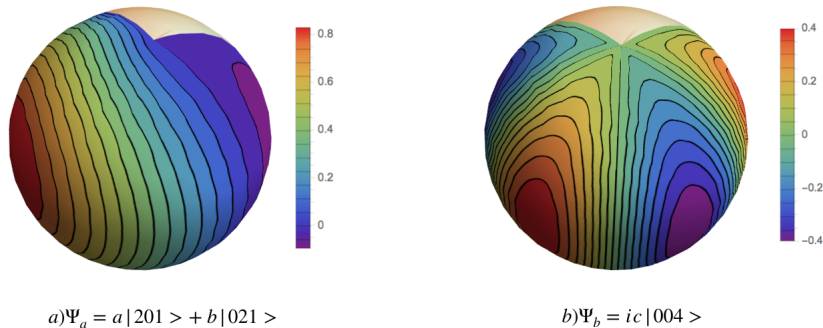


Figura 4.29: Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.

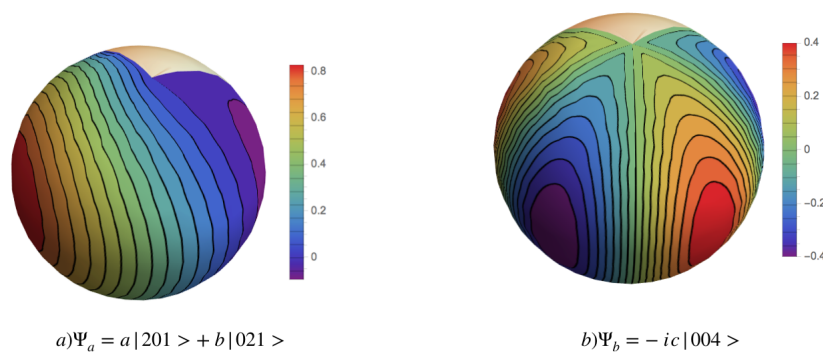


Figura 4.30: Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo negativo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.

Los valores de expresados en cada función son los siguientes: $a = 0.693801$, $b = -0.312122$ y $c = 0.649015$, esto para ambas funciones mostradas. Para el caso de esta configuración de confinamiento de $\phi_0 = \frac{3\pi}{2}$.

4.5.2. Octavo Bloque nivel energético, etiquetado por $\nu = 13/3$

De manera análoga al sexto bloque, la dimensión del octavo es de $D = 4 \times 4$, se obtiene un sub-bloque de 3×3 en el cual solo se distinguen 4 elementos de matriz distintos de cero. Para este caso al momento de diagonalizar, al analizar el determinante secular se obtiene un polinomio de cuarto grado, el cual se reduce a un polinomio de

segundo grado, por tanto solo se obtienen dos estados que rompen la degeneración al obtener dos raíces para este polinomio se observa que todos los elementos de la matriz se combinan, por lo que no se puede asegurar que estados son lo que se desdoblán a través del campo magnético. El desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en dos distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.31 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

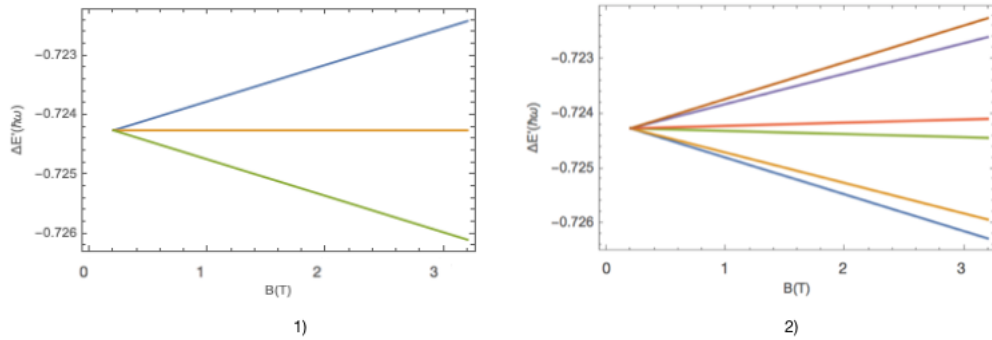


Figura 4.31: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al octavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.5.3. Noveno nivel energético, etiquetado por $\nu = 14/3$

Para el noveno bloque de degeneraciones de la tabla 2.4 en la sección de $\frac{3\pi}{2}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 6 \times 6$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 3×3 para el caso en el que n_θ y n_ϕ son impares y para el otro caso el sub-bloque es de 4×4 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 3×3 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de dicho sub-bloque este hereda la misma estructura de degeneración, conservando dos estados sin degenerar. Mientras que el caso del sub-bloque de paridad non conserva también la misma estructura del bloque anterior. Al heredar la misma estructura, también heredan el mismo número de estados que se desdoblán. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en cuatro distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.26 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

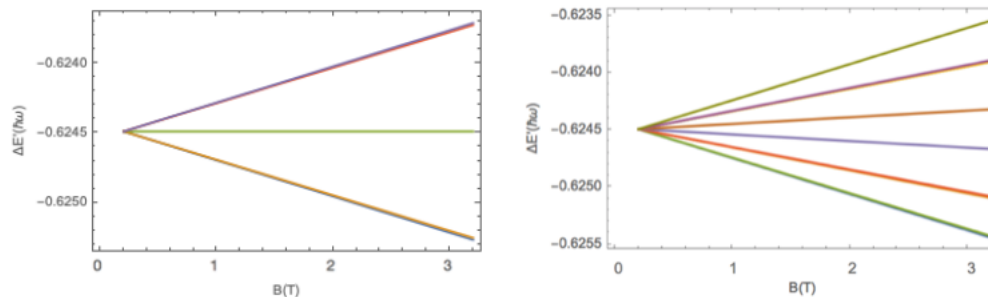


Figura 4.32: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al noveno nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.5.4. Décimo nivel energético, etiquetado por $\nu = 5$

De manera análoga al sexto bloque, la dimensión del décimo es de $D = 4 \times 4$, se obtiene un sub-bloque de 3×3 en el cual solo se distinguen 4 elementos de matriz distintos de cero. Para este caso al momento de diagonalizar, al analizar el determinante secular se obtiene un polinomio de cuarto grado, el cual se reduce a un polinomio de segundo grado, por tanto solo se obtienen dos estados que rompen la degeneración al obtener dos raíces para este polinomio se observa que todos los elementos de la matriz se combinan, por lo que no se puede asegurar que estados son los que se desdoblan a través del campo magnético. El desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en dos distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.33 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

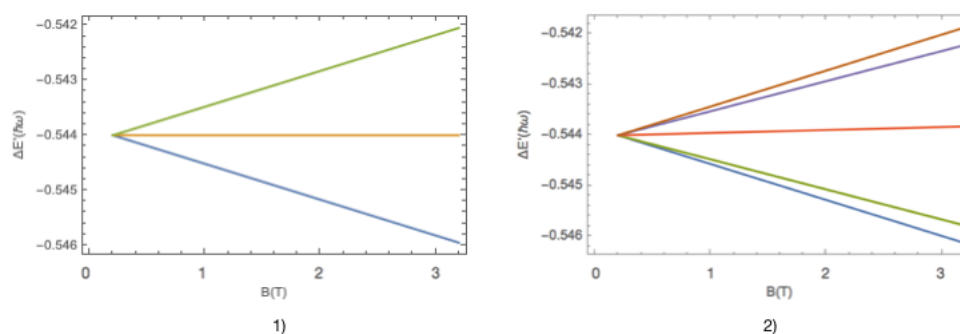


Figura 4.33: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al décimo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.5.5. Onceavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 16/3$

Para el onceavo bloque de degeneraciones de la tabla 2.4 en la sección de $\frac{3\pi}{2}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 6 \times 6$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 3×3 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso el sub-bloque es de 4×4 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 3×3 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de dicho sub-bloque este hereda la misma estructura de degeneración, conservando dos estados sin degenerar. Mientras que el caso del sub-bloque de paridad non conserva también la misma estructura del bloque anterior. Al heredar la misma estructura, también heredan el mismo numero de estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en cuatro distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.34 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

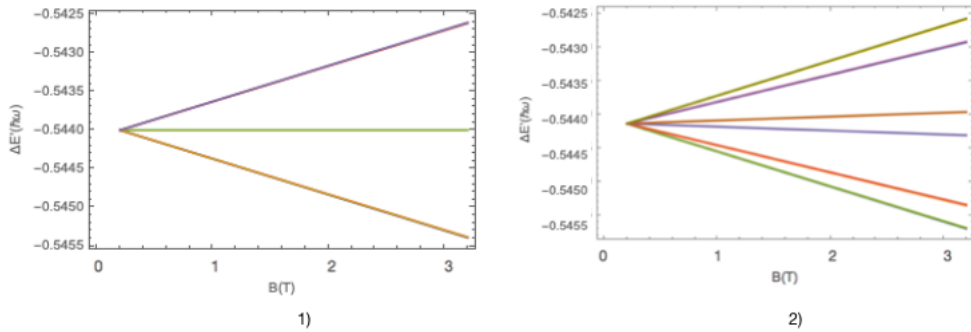


Figura 4.34: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al onceavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.5.6. Doceavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 17/3$

En el doceavo bloque de degeneraciones de la tabla 2.4 en la sección de $\frac{3\pi}{2}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 9 \times 9$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 3×3 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso la dimensión del sub-bloque es de 6×6 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 3×3 del subespacio degenerado anterior, mientras que el sub-bloque de 6×6 genera una nueva estructura. Para el caso del primer sub-bloque solo un estado mantiene la degeneración, mientras que en el segundo bloque la ecuación asociada al determinante secular se factoriza de tal forma que el polinomio original de sexto grado se reduce a uno de cuarto grado, obteniendo así solo cuatro estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en cuatro distintos niveles de energía dentro del

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

espacio degenerado. En la figura 4.35 se muestran dichos desdoblamientos , incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

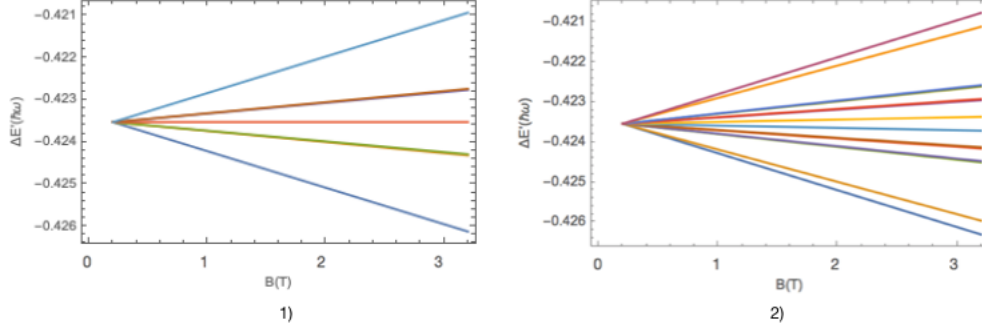


Figura 4.35: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al doceavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.5.7. Treceavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 6$

Para el onceavo bloque de degeneraciones de la tabla 2.4 en la sección de $\frac{3\pi}{2}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 6 \times 6$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 3×3 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso el sub-bloque es de 4×4 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 3×3 del subespacio degenerado anterior, de modo que para el caso de dicho sub-bloque este hereda la misma estructura de degeneración, conservando dos estados sin degenerar. Mientras que el caso del sub-bloque de paridad non conserva también la misma estructura del bloque anterior. Al heredar la misma estructura, también heredan el mismo numero de estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en cuatro distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.36 se muestran dichos desdoblamientos , incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

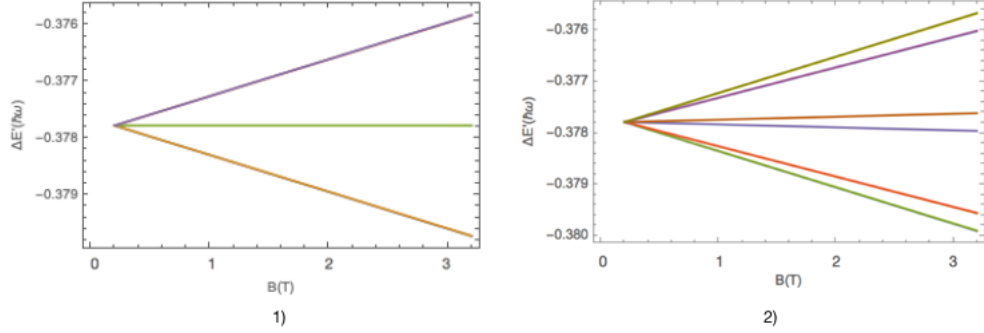


Figura 4.36: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al treceavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.5.8. Catorceavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 19/3$

En el catorceavo bloque de degeneraciones de la tabla 2.4 en la sección de $\frac{3\pi}{2}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 9 \times 9$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 3×3 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso la dimensión del sub-bloque es de 6×6 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 3×3 del subespacio degenerado anterior, mientras que el sub-bloque de 6×6 genera una nueva estructura. Para el caso del primer sub-bloque solo un estado mantiene la degeneración, mientras que en el segundo bloque hereda la estructura del sub-bloque del doceavo bloque obteniendo así solo cuatro estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en cuatro distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.37 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

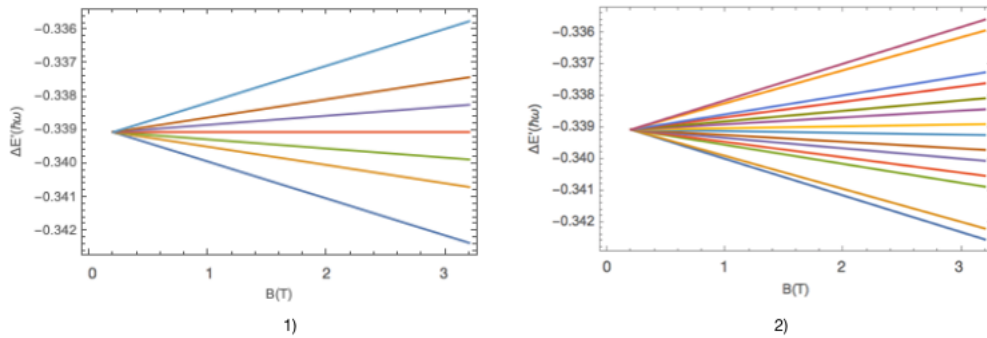


Figura 4.37: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al catorceavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

En el caso de esta configuración de confinamiento de $\phi_0 = \frac{3\pi}{2}$, a diferencia de los primeros cuatro casos se observa que los bloques degenerados, esta configuración de confinamiento presenta una mayor cantidad de bloques degenerados con distintos valores en $n_{\phi'}$ y n_{ϕ} . Pero de estos ocho bloques degenerados solo se obtienen tres estructuras distintas, de modo que para los bloques que comparten la misma dimensión se tiene que también comparten la misma estructura, además de que los bloques de dimensión menor heredan la estructura de sus sub-bloques a los siguientes bloques. De modo que cuando la dimensión del bloque es de 4, solo se desdoblan dos estados, cuando es seis solo se desdoblan cuatro estados y cuando a dimensión del bloque es nueve solo se desdoblan seis.

4.6. Ángulo de Confinamiento $\frac{5\pi}{3}$

Considerando el ángulo de confinamiento $\phi_0 = \frac{5\pi}{3}$, este genera cinco distintos bloques degenerados que contienen distintas etiquetas cuánticas en n_{ϕ} , de acuerdo con la tabla 2.4 en la sección de $\frac{5\pi}{3}$.

4.6.1. Doceavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 23/5$

Comenzando con el doceavo bloque de degeneraciones de la tabla 2.4 en la sección de $\frac{5\pi}{3}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 5 \times 5$, de este bloque se obtiene un sub-bloque de 3×3 . Para este caso al momento de diagonalizar, al analizar el determinante secular se obtiene un polinomio de tercer grado, el cual se reduce a un polinomio de segundo grado, por tanto solo se obtienen dos estados que rompen la degeneración al obtener dos raíces para este polinomio se observa que todos los elementos de la matriz se combinan, por lo que no se puede asegurar que estados son lo que se desdoblan a través del campo magnético. El desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en dos distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura ?? se muestran dichos desdoblamientos desdoblamientos incluido para el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

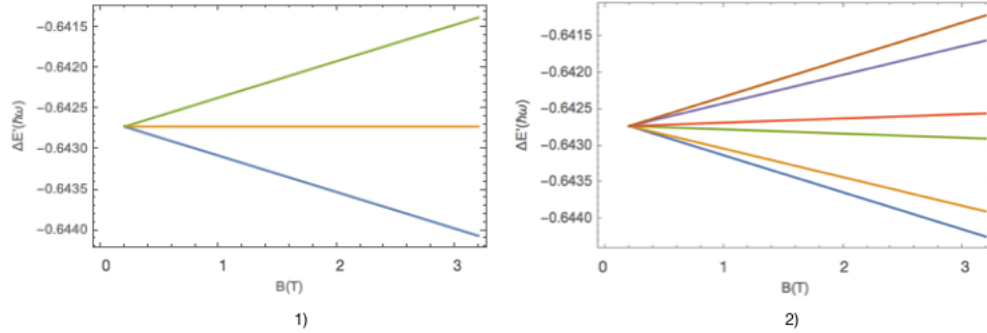


Figura 4.38: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al doceavo bloque degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

Al considerar el bloque de 5×5 , se observa que este se divide en dos sub-bloques: uno de 2×2 y otro de 3×3 . Para el caso del primer sub-bloque de 2×2 la energía de este bloque queda asociada a la energía inicial de todos los estados degenerados. Para el caso del bloque de 3×3 se observa que al aplicar el método descrito en la sección 3.2, al momento de obtener el determinante secular de la matriz asociada al bloque degenerado se reduce de un polinomio de tercer grado, a un polinomio de segundo grado. Por lo que en este bloque se observa que la degeneración persiste. Pero al momento de obtener los eigenvectores asociados a los eigenvalores previamente obtenidos, reescribiendo cada eigenvector en términos de la base de funciones, se obtiene una nueva base de eigenfunciones etiquetada por las nuevas eigenenergías. Para el caso del sub-bloque de 3×3 para diferenciar a los nuevos estados etiquetados por las nuevas eigenenergías, se analizan los dos nuevos estados que se encuentran etiquetados por la misma eigenenergía pero con diferente signos. En las figuras ?? y ?? se presentan las Eigenfunciones para dichos estados, en coordenadas esféricas y a un radio fijo.

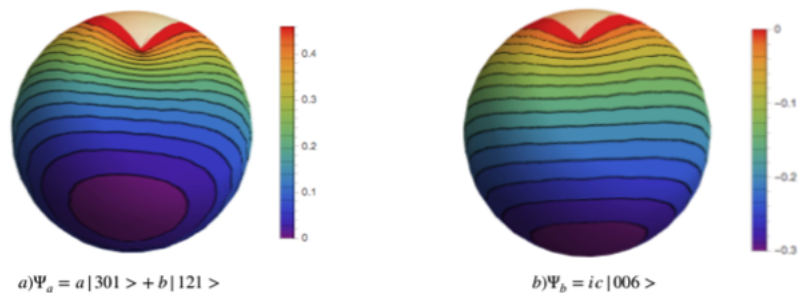


Figura 4.39: Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTOS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

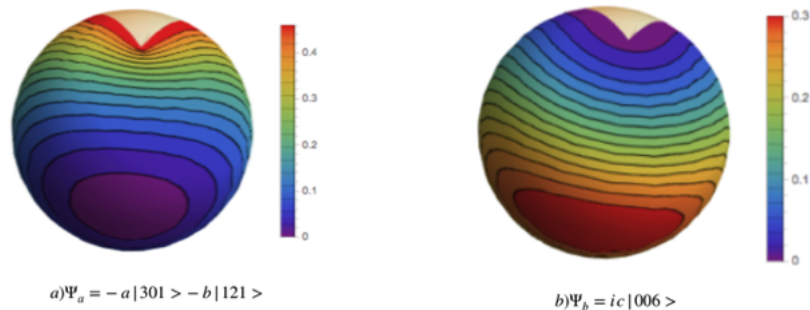


Figura 4.40: Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo negativo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.

Los valores de expresados en cada función son los siguientes: $a = -0.627293$, $b = 0.326349$ y $c = 0.707107$ y esto para ambas funciones mostradas.

4.6.2. Quinceavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 26/5$

Para el quinceavo bloque de degeneraciones de la tabla 2.4 en la sección de $\frac{5\pi}{3}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 5 \times 5$, de este bloque se obtiene un sub-bloque de 3×3 , de manera analoga al caso anterior. Para este caso al momento de diagonalizar, al analizar el determinante secular se obtiene un polinomio de tercer grado, el cual se reduce a un polinomio de segundo grado, por tanto solo se obtienen dos estados que rompen la degeneración al obtener dos raíces para este polinomio se observa que todos los elementos de la matriz se combinan, por lo que no se puede asegurar que estados son lo que se desdoblan a través del campo magnético. El desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en dos distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.41 se muestran dichos desdoblamientos desdoblamientos incluido para el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

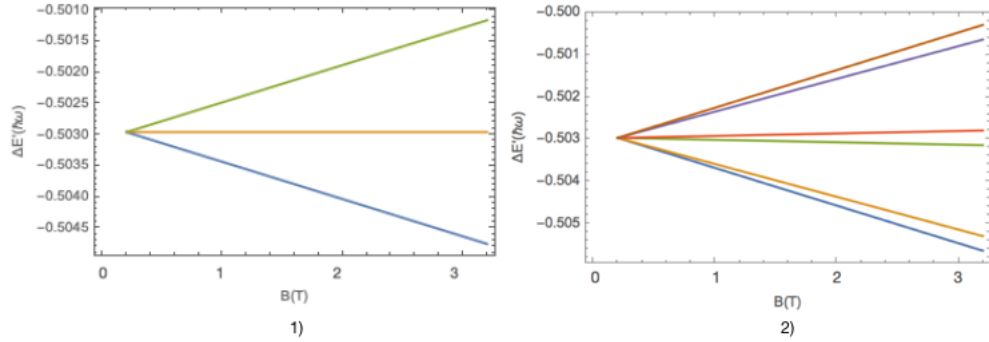


Figura 4.41: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al quinceavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.6.3. Diecisieteavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 28/5$

En el diecisieteavo bloque de degeneraciones de la tabla 2.4 en la sección de $\frac{5\pi}{3}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 7 \times 7$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 3×3 para el caso en el que n_{θ} y n_{ϕ} son impares y para el otro caso la dimensión del sub-bloque es de 4×4 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 3×3 del subespacio degenerado anterior, mientras que el sub-bloque de 4×4 genera una nueva estructura. Para el caso del primer sub-bloque solo un estado mantiene la degeneración, mientras que en el segundo bloque la ecuación asociada al determinante secular se factoriza de tal forma que el polinomio original de cuarto grado se reduce a uno de cuarto grado, obteniendo así solo cuatro estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en cuatro distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.42 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

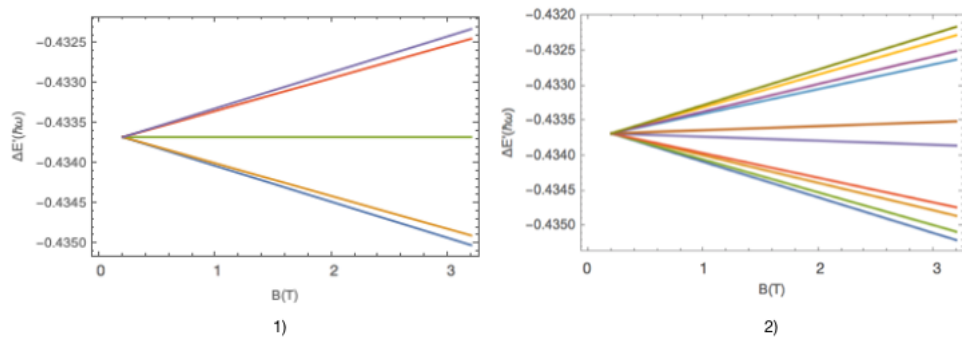


Figura 4.42: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al diecisieteavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTAS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

4.6.4. Dieciochoavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 29/5$

Para el dieciochoavo bloque de degeneraciones de la tabla 2.4 en la sección de $\frac{5\pi}{3}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 5 \times 5$, de este bloque se obtiene un sub-bloque de 3×3 , de manera analoga al caso anterior. Para este caso al momento de diagonalizar, al analizar el determinante secular se obtiene un polinomio de tercer grado, el cual se reduce a un polinomio de segundo grado, por tanto solo se obtienen dos estados que rompen la degeneración al obtener dos raíces para este polinomio se observa que todos los elementos de la matriz se combinan, por lo que no se puede asegurar que estados son lo que se desdoblan a través del campo magnético. El desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en dos distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.43 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

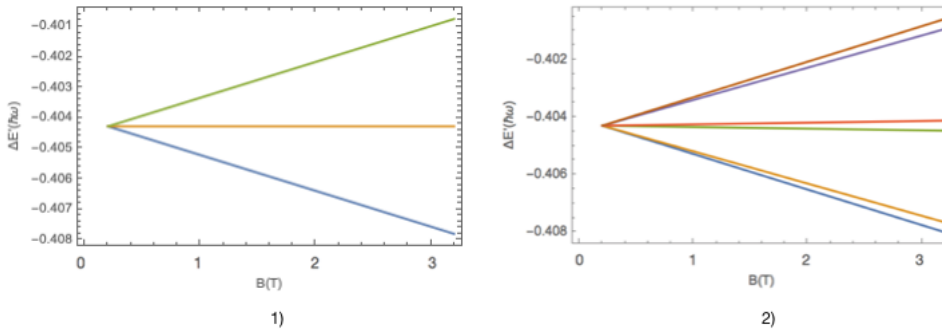


Figura 4.43: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al dieciochoavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

4.6.5. Veinteavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 31/5$

De manera analoga al diecisieteavo bloque de degeneraciones, el veinteavo bloque de degeneraciones de la tabla 2.4 en la sección de $\frac{5\pi}{3}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 7 \times 7$, para este caso el bloque queda dividido en un sub-bloque de dimensión 3×3 para el caso en el que $n_{\theta'}$ y n_{θ} son impares y para el otro caso la dimensión del sub-bloque es de 4×4 . El primer sub-bloque con paridad par hereda la estructura del sub-bloque de 3×3 del subespacio degenerado anterior, mientras que el sub-bloque de 4×4 genera una nueva estructura. Para el caso del primer sub-bloque solo un estado mantiene la degeneración, mientras que en el segundo bloque la ecuación asociada al determinante secular se factoriza de tal forma que el polinomio original de cuarto grado se reduce a uno de cuarto grado, obteniendo así solo cuatro estados que se desdoblan. De este modo el desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en cuatro distintos niveles de energía dentro del espacio degenerado. En la figura 4.44 se muestran dichos desdoblamientos, incluido el espín con respecto a la variación de un

campo magnético de 0 a 3 teslas.

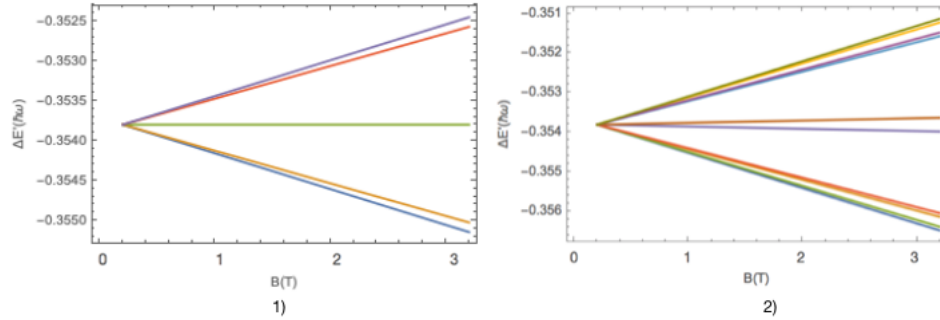


Figura 4.44: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al veinteavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

Para el caso de esta configuración de confinamiento de $\phi_0 = \frac{5\pi}{3}$, de manera análoga al caso anterior esta configuración de confinamiento repite las mismas dos estructuras para los cinco bloques degenerados. Pero de estos cinco bloques degenerados solo se obtienen dos estructuras distintas, de modo que para los bloques que comparten la misma dimensión se tiene que también comparten la misma estructura, además de que los bloques de dimensión menor heredan la estructura de sus sub-bloques a los siguientes bloques. De modo que cuando la dimensión del bloque es de cinco solo se desdoblamos dos estados y cuando la dimensión del bloque es siete solo se desdoblamos cuatro estados.

4.7. Ángulo de Confinamiento $\frac{7\pi}{4}$

Considerando el ángulo de confinamiento $\phi_0 = \frac{7\pi}{4}$, este genera un bloque degenerado que con distintas etiquetas cuánticas en n_ϕ , de acuerdo con la tabla 2.4 en la sección de $\frac{7\pi}{4}$.

4.7.1. Veinteavo nivel energético, etiquetado por $\nu = 39/7$

Comenzando con el veinteavo y único nivel energético degenerado de la tabla 2.4 en la sección de $\frac{7\pi}{4}$, se observa que la dimensión del subespacio degenerado es $D = 6 \times 6$, de este bloque se obtiene un sub-bloque de 4×4 . Para este caso al momento de diagonalizar, al analizar el determinante secular se obtiene un polinomio de cuarto grado, el cual se reduce a un polinomio de segundo grado, por tanto solo se obtienen dos estados que rompen la degeneración al obtener dos raíces para este polinomio se observa que todos los elementos de la matriz se combinan, por lo que no se puede asegurar que estados son los que se desdoblamos a través del campo magnético. El desdoblamiento de las líneas espectrales se presenta en dos distintos niveles de energía dentro del espacio

4. RESULTADOS: DESDOBLAMIENTOS DE NIVELES DE ENERGÍA Y EIGENFUNCIONES PARA LAS DISTINTOS CONFIGURACIONES DE CONFINAMIENTO

degenerado. En la figura 4.45 se muestran dichos desdoblamientos incluido para el espín con respecto a la variación de un campo magnético de 0 a 3 teslas.

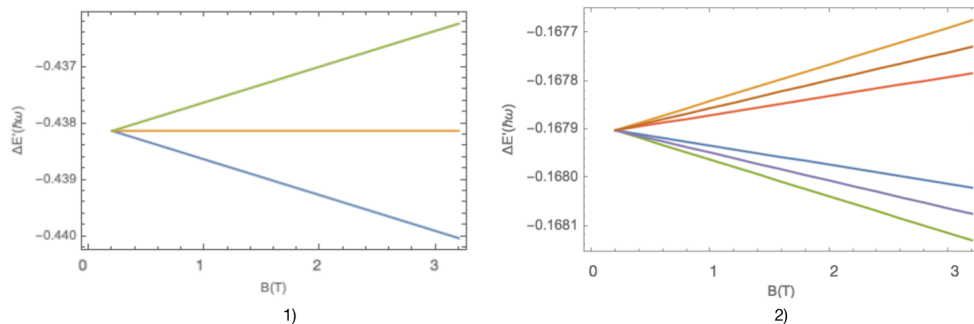


Figura 4.45: Desdoblamiento Zeeman para la energía asociada al veinteavo nivel degenerado, considerando la parte orbital 1) y con espín 2).

Al considerar el bloque de 6×6 , se observa que este se divide en dos sub-bloques: uno de 2×2 y otro de 4×4 . Para el caso del primer sub-bloque de 2×2 la energía de este bloque queda asociada a la energía inicial de todos los estados degenerados. Para el caso del bloque de 4×4 se observa que al aplicar el método descrito en la sección 3.2, al momento de obtener el determinante secular de la matriz asociada al bloque degenerado se reduce de un polinomio de cuarto grado, a un polinomio de segundo grado. Por lo que en este bloque se observa que la degeneración persiste. Pero al momento de obtener los eigenvectores asociados a los eigenvalores previamente obtenidos, reescribiendo cada eigenvector en términos de la base de funciones, se obtiene una nueva base de eigenfunciones etiquetada por las nuevas eigenenergías. Para el caso del sub-bloque de 4×4 para diferenciar a los nuevos estados etiquetados por las nuevas eigenenergías, se analizan los dos nuevos estados que se encuentran etiquetados por la misma eigenenergía pero con diferente signos. En las figuras 4.46 y 4.47 se presentan las Eigenfunciones para dichos estados, en coordenadas esféricas y a un radio fijo.

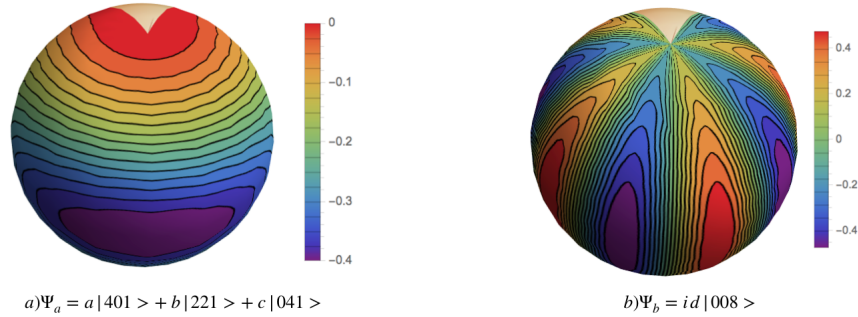


Figura 4.46: Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo positivo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.

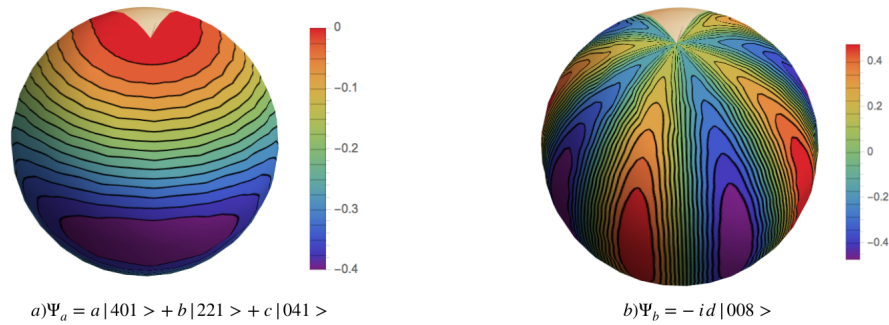


Figura 4.47: Eigenfunción (asociada al eigenvalor distinto de cero con signo negativo). La sección a) muestra la componente real de la función, mientras que la sección b) muestra la componente imaginaria.

Los valores de expresados en cada función son los siguientes: $a = -0.60901$, $b = 0.349637$, $c = -0.0828321$ y $d = 0.707107$, esto para ambas funciones mostradas. Para el caso de esta configuración de confinamiento de $\phi_0 = \frac{7\pi}{4}$, a diferencia de todos los casos anteriores, para esta configuración de confinamiento solo se genera un bloque degenerado.

Conclusiones

Al imponer condiciones de frontera al átomo de Hidrógeno por medio de planos meridianos situados en las coordenadas $\phi_0 = 0$ y $\phi = \phi_0$, se reconoce un rompimiento de simetría $SO(2)$. A consecuencia de esto l_z cesa de ser cantidad conservada y las eigenfunciones del cuadrado de la componente axial del momento angular se ven afectadas, viéndose remplazadas por funciones $\sin(\mu\phi)$, las cuales cumplen la condición de anularse en las caras del ángulo diedro. El eigenvalor asociado, queda en función del ángulo de confinamiento ϕ_0 y los números cuánticos orbital y principal l y n se convierten en $\lambda = n_\theta + \mu$ y $\nu = n_r + n_\theta + \mu + 1$.

A raíz del rompimiento de simetría, los eigenvalores de la energía (2.12) y sus degeneraciones quedan en función del ángulo de confinamiento, además de que se observa una reducción de orden en la degeneración de los niveles de energía con respecto al átomo libre. Partiendo de la condición de estados degenerados $\nu' = \nu$, junto con la Ec.2.13, se definen 8 distintas configuraciones de estados degenerados en términos de los ángulos mostrados en la Fig. 2.1. Para efectos prácticos se ilustran y emplean una serie finita de niveles degenerados de acuerdo con las Tablas 2.3 y 2.4.

El análisis para el efecto Zeeman en el átomo de Hidrógeno confinado por medio ángulo diedro, se inicia construyendo la matriz asociada al operador $H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ en la base de estados degenerados. La evaluación de los elementos de matriz de la componente \hat{z} es factorizable de acuerdo con la ecuación 3.3. De modo que la construcción de los elementos es por medio del cálculo del operador l_z actuando sobre la función de onda y calculando los traslapes (3.5) y (3.6). A partir de esto se definen las reglas de selección en los respectivos números cuánticos, $n'_\phi - n_\phi$ nones, $n'_\theta - n_\theta$ pares, n_r y n'_r compatibles con las condiciones anteriores y la degeneración. La regla de selección de paridad para las funciones polares separa la matriz $D \times D$ en dos bloques $D_+ \times D_+$ y $D_- \times D_-$ con $D_+ + D_- = D$. Esta última regla de permite la identificación de encajes estructurales sobre los niveles energéticos consecutivos. Esto reduce los trabajos de cálculo, mejora la precisión de los resultados y facilita su interpretación.

El análisis para cada una las distintas configuraciones de confinamiento se divide en dos casos, cuando μ es entero las configuraciones a analizar son con $\phi_0 = \pi/4, \pi/3, \pi/2, \pi$. A su vez el primer caso se divide en dos subcasos, el primero es

5. CONCLUSIONES

cuando el eigenvalor μ es impar y el segundo cuando el eigenvalor μ es par. Las configuraciones que pertenecen al primer subcaso con μ impar son $\phi_0 = \pi$ y $\phi_0 = \pi/3$. Para ambos casos se obtienen cinco distintos niveles degenerados con distintos valores en el número cuántico n_ϕ , donde cada nivel degenerado, a excepción del primero, se conecta con el siguiente y a su vez con el anterior. Para el bloque degenerado con distintos valores de n_ϕ , por la regla de paridad se tiene que cada nivel se divide en dos submatrices. El primero para el caso en que $n_{\theta'}$ y n_θ son pares y el segundo cuando $n_{\theta'}$ y n_θ son impares. Para el segundo sub-caso las configuraciones de confinamiento pertenecientes a este son $\phi_0 = \pi/2$ y $\phi_0 = \pi/4$, en ambos casos se aprecia que para estos casos el eigenvalor μ es par. Para el caso en que $\phi_0 = \pi/2$ se presentan seis niveles degenerados, cada uno con distintos valores para n_ϕ . Mientras que para el caso en el que $\phi_0 = \pi/4$ solo se presentan tres niveles degenerados.

Para el siguiente caso los ángulos de confinamiento correspondientes a este son $\phi_0 = 3\pi/2$, $\phi_0 = 5\pi/3$ y $\phi_0 = 7\pi/4$. A diferencia del caso anterior estas configuraciones no tienen una secuencia específica, ya que para estos casos los bloques para los estados que son etiquetados por la misma energía se generan módulo el numerador del ángulo de confinamiento. De esta forma para cada configuración de confinamiento dada en función del ángulo que se obtiene un número distinto de niveles con distintos valores en n_ϕ . De tal forma que para el ángulo de confinamiento $\phi_0 = 3\pi/2$ se obtienen nueve niveles degenerados, donde solo se logran diferenciar tres distintas estructuras de los nueve niveles degenerados. Para el ángulo de confinamiento $\phi_0 = 5\pi/3$ se analizan cinco niveles degenerados, donde solo se logran diferenciar dos distintas estructuras de los cinco niveles degenerados y para el ángulo de confinamiento $\phi_0 = 7\pi/4$ se obtienen un nivel degenerado. Partiendo de este análisis se aprecia que cuando $\nu \rightarrow \infty$, por que $\mu = n_\phi\pi/\phi_0 \rightarrow 0$ para $\phi_0 \rightarrow 0$ todos los estados se vuelven degenerados en el límite del umbral de ionización $E \rightarrow 0$.

Al analizar el caso cuando el ángulo de confinamiento $\phi_0 = 2\pi$, no se recupera el caso libre por que la condición de frontera impone una singularidad en un punto. Debido a la estructura de $\mu = n_\phi\pi/2\pi = n_\phi/2$, por la primera regla de selección el efecto Zeeman se suprime y para este caso considerar un método perturbativo a primer orden no es suficiente para remover la degeneración sobre los distintos niveles energéticos.

Posteriormente, una vez que se obtienen los desdoblamientos Zeeman para cada uno de los bloques degenerados con distintos valores en n_ϕ , para los primeros bloques de cada configuración de confinamiento se desarrollan la representación gráfica de las eigenfunciones para los estados que están etiquetados por la misma energía pero con signo distinto. A cada una de las nuevas etiquetas de la energía le corresponde una eigenfunción distinta, donde después de obtener los eigenvectores asociados a las eigenenergías, se reescribe cada eigenvector como combinación lineal de elementos de la base de funciones para cada bloque degenerado. Graficando cada eigenfunción como cortes a un radio fijo, se obtienen las gráficas para las eigenfunciones correspondientes a los primeros bloques degenerados, se hizo un análisis de estas gráficas en función de color, con el fin de que para cada estado graficado sea posible ubicar los mínimos, máximos y nodos de cada eigenfunción. Mostrando de manera gráfica mediante este análisis la

ortogonalidad de estas eigenfunciones.

Para el trabajo a futuro se propone continuar este mismo estudio pero incorporando las coordenadas paraboloidales y esferoidales prolatas mostradas en [3]. Además de identificar a fondo los encajes estructurales que se presentan en cada conjunto de niveles energéticos correspondiente a cada distinto ángulo de confinamiento. De igual forma se continúa la investigación con respecto al rompimiento y restauración de la simetría en este sistema confinado, incluyendo el estudio para otros ángulos de confinamiento.

A.1. Apéndice 1: Teoría de Perturbaciones para Estados Degenerados

Teoría de Perturbaciones independiente del tiempo es un método de aproximación el cual se aplica bajo el siguiente contexto: al conocer la solución al problema de eigenvalores del Hamiltoniano H^0 , lo que se busca es una solución de la forma $H = H^0 + H'$, donde H' es una perturbación al problema y $H' \ll H^0$ [6], [8]. Al considerar H^0 como el Hamiltoniano de interacción del electrón y el protón, mientras que H' representa la interacción del sistema con un campo externo.

Al considerar un nivel de energía E_n^0 , al cual corresponde un conjunto de distintos eigenestados $|\phi_n\rangle$ los cuales poseen la misma energía y pertenecen al subespacio de dimensión D , se tiene

$$H^0|\phi_i\rangle = E_n^0|\phi_i\rangle, \quad (\text{A.1})$$

con $i = (1, 2, 3, \dots, d)$ con d la dimensión del subespacio degenerado. Al considerar la aproximación a orden cero es posible escribir la eigenfunción $|\Psi_n\rangle$ como una combinación lineal en términos de $|\phi_n\rangle$:

$$|\Psi_n\rangle = \sum_{a=1}^n c_a |\phi_a\rangle. \quad (\text{A.2})$$

Ya que cada estado es ortonormal con respecto a cada etiqueta i , $i \neq b$ $\langle \phi_a | \phi_b \rangle = \delta_{a,b}$, se asegura que $|\Psi_n\rangle$ sea ortonormal al resultar una combinación lineal en términos de los coeficientes a . Para determinar cual es la corrección a primer orden de la energía, consideramos la corrección al Hamiltoniano de la forma $H = H^0 + H'$ y aplicándoles (A.1), (A.2) y operando con $\langle \phi_b |$ se obtiene la corrección a la energía de la forma

$${}_{ab}E_n = {}_{ab}E_n^0 + \sum_{a=1}^d a \langle \phi_b | H' | \phi_a \rangle, \quad (\text{A.3})$$

al aplicar la propiedad de ortonormalidad $\langle \phi_b | \phi_a \rangle = \delta_{b,a}$ a la ecuación (A.3), esta se puede reescribir como:

$$\sum_{a=1}^d (H'_{ba} - E_n^1 \delta_{b,a}) a = 0. \quad (\text{A.4})$$

Al elegir una base de estados en la cual H' no contenga elementos en la diagonal, tal que la diagonal del operador se vuelvan ceros. Usando las combinaciones lineales de estados degenerados sin perturbar, aplicándoles el operador \hat{H} y diagonalizando la matriz asociada al operador en la base de estados del subespacio abarcado por los estados degenerados sin perturbar de dimensión D . Por lo que al generar la matriz en términos de la ecuación (A.4), esta determina los eigenvalores a primer orden y del d -avo nivel del método de teoría de perturbaciones para estados degenerados. El procedimiento para el siguiente:

1. Para cada nivel con D un numero de estados degenerados, se construye la matriz de perturbación de $D \times D$ con base al operador H' , para este caso concreto del átomo confinado por ángulo diedro es valido $H' = \langle \phi_a | l_z | \phi_b \rangle$.
2. Se prosigue a diagonalizar dicha matriz para encontrar los eigenvalores que representan el cambio a la energía de la forma $E_{n_a}^1$ donde $(n_a = 1, 2, 3, \dots, d =$ y los correspondientes eigenvectores asociados a cada estado

$$v_a = \begin{pmatrix} v_{a1} \\ v_{a2} \\ \cdot \\ \cdot \\ v_{ad} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

3. Finalmente la corrección de la energía a primer orden esta dada como:

$$E_{n_a} = E_n^0 + E_{n_a}^1, \quad (\text{A.6})$$

con los eigenvectores correspondientes asociados a cada estado.

A.2. Apéndice 2: Tablas complementarias

$\phi_0 = \pi/4$			$\phi_0 = \pi/3$			$\phi_0 = \pi/2$		
n_r, n_θ, μ	ν	$D_+ + D_-$	n_r, n_θ, μ	ν	$D_+ + D_-$	n_r, n_θ, μ	ν	$D_+ + D_-$
0 0 1	5	0+1	0 0 3	4	1	0 0 2	3	1
1 0 4	6	1+1	1 0 3	5	1+1	1 0 2	4	1+1
0 1 4			0 1 3			0 1 2		
2 0 4	7	1+2	2 0 3	6	1+2	1 0 2	5	1+3
0 2 4			0 2 3			0 2 2		
1 1 4			1 1 3			0 0 4		
3 0 4	8	2+2	3 0 3	7	2+3	1 1 2	6	3+3
1 2 4			1 2 3			3 0 2		
2 1 4			0 0 6			1 2 2		
0 3 4			2 1 3			1 0 4		
4 0 2			9			2+4		
2 2 4	9	2+4	4 0 3	8	3+4	0 3 2	7	3+6
0 4 4			2 2 3			0 1 4		
0 0 8			0 4 3			4 0 2		
3 1 4			1 0 6			2 2 2		
1 3 4			3 1 3			0 4 2		
5 0 4			10			4+4		
3 2 4	0 1 6	0 2 4						
1 4 4	5 0 3	0 0 6						
1 0 8	1 4 3	3 1 2						
4 1 4	3 2 3	1 3 2						
2 3 4	2 0 6	1 1 2						
0 5 4	0 2 6	5 0 2						
0 1 8	4 1 3	3 2 2						
6 0 4	11	4+6	2 3 3	10	5+7	1 4 2	8	6+6
4 2 4			0 5 3			3 0 4		
2 4 4			1 1 6			1 2 4		
0 6 4			6 0 3	10	6	1 0 6		
2 0 8			4 2 3			4 1 2		
0 2 8			2 4 3			2 3 2		

$\phi_0 = \pi$		
n_r, n_θ, μ	ν	$D_+ + D_-$
0 0 1	2	1
1 0 1 0 1 1 0 0 2	3	1+2
2 0 1 0 2 1 1 0 2 0 0 3 1 1 1 0 1 2	4	2+4
3 0 1 1 2 1 2 0 2 0 2 2 1 0 3 0 0 4 2 1 1 0 3 1 1 1 2 0 1 3	5	4+6
4 0 1 2 2 1 0 4 1 3 0 2 1 2 2 2 0 3 0 2 3 1 0 4 0 0 5 3 1 1	6	6+9
2 1 2 0 3 2		

Bibliografía

- [1] Levine, J. D. (1965). Nodal hydrogenic wave functions of donors on semiconductor surfaces. *Phys. Rev.*, 140:A586–A589. [IX](#), [1](#)
- [2] Ley-Koo, E. (2009). The hydrogen atom confined in semi-infinite spaces limited by conoidal boundaries. *Advances in Quantum Chemistry*, 57:79–122. [1](#)
- [3] Ley-Koo, E. and Sun, G.-H. (2014). *Surface Effects in the Hydrogen Atom Confined by Dihedral Angles*, pages 1–29. Springer International Publishing, Cham. [IX](#), [IX](#), [2](#), [6](#), [63](#)
- [4] Ley-Koo, E. and Mateos-Cortés, S. (1993). The hydrogen atom in a semi-infinite space limited by a conical boundary. *American Journal of Physics*, 61(3):246–249. [1](#)
- [5] Pereyra, P. (2012). *Fundamentals of Quantum Physics: Textbook for Students of Science and Engineering*. Undergraduate Lecture Notes in Physics. Springer, 2012 edition. [13](#)
- [6] Sakurai, J. J. (1994). *Modern quantum mechanics*. Addison-Wesley Pub. Co, rev. ed edition. [5](#), [65](#)
- [7] Shankar, R. (1994). *Principles of Quantum Mechanics*. 2 edition. [5](#)
- [8] Zettili, N. (2009). *Quantum Mechanics: Concepts and Applications, Second Edition*. Wiley, 2 edition. [5](#), [65](#)