



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

ASPECTOS TEÓRICOS Y SIMULACIÓN DE
INTERACCIONES ELÉCTRICAS Y MAGNÉTICAS
EN LA ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER:
ISÓTOPO ^{57}Fe

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
F Í S I C O

PRESENTA:

EDUARDO WEHNER MARDUEÑO

28/11/98

DIRECTOR: SERGIO ABURTO DUFFAU



1998





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.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

M. en C. Virginia Abrín Batule
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis:

"Aspectos Teóricos y Simulación de Interacciones Eléctricas y Magnéticas en la Espectroscopía Mössbauer: Isótopo ^{57}Fe "

realizado por WEHNER MARDUEÑO EDUARDO

con número de cuenta 9057192-7 , pasante de la carrera de Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis

Propietario

FIS. SERGIO ABURTO DUFFAU

Propietario

DR. EUGENIO LEY KOO

Propietario

DR. RAUL VALENZUELA MONJARAS

Suplente

DR. ALIPIO GUSTAVO CALLES MARTINEZ

Suplente

DR. DARIO MORENO OSORIO

Consejo Departamental de Física



DR. ROBERTO ALEJANDRO RUELAS MAYORGA
Coordinador de Licenciatura de Física

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**Aspectos Teóricos y Simulación de
Interacciones Eléctricas y Magnéticas
en la Espectroscopía Mössbauer:
Isótopo ^{57}Fe**

A mi madre, por todo lo que una madre hace por su hijo
A Sergio, por todo lo que un maestro hace por su alumno

Contenido

	Introducción.....	1
Capítulo I	Consideraciones preliminares	5
	A. Aspectos nucleares.....	7
	B. Teoría de perturbación de Rayleigh-Schrödinger (A primer orden e independiente del tiempo)	13
Capítulo II	Interacción Dipolar Magnética (DM).....	15
	A. Aplicación de la teoría de perturbación.....	17
	B. Cálculo de valores y vectores propios	21
Capítulo III	Interacción Cuadripolar Eléctrica (CE).....	37
	A. Aplicación de la teoría de perturbación.....	39
	B. Cálculo de valores y vectores propios	41
Capítulo IV	Interacción Dipolar Magnética fuerte y Cuadripolar Eléctrica débil (DM/ce).....	47
	A. Aplicación de la teoría de perturbación.....	49
	B. Cálculo de valores y vectores propios	51
Capítulo V	Interacción Cuadripolar Eléctrica fuerte y Dipolar Magnética débil (CE/dm)	57
	A. Aplicación de la teoría de perturbación.....	59
	B. Cálculo de valores y vectores propios	62
Capítulo VI	Simulación computacional	69
	A. Consideraciones físicas y numéricas	71
	B. Posibles extensiones	79
	C. Conclusión.....	81
Apéndice	Datos de consulta	83
	BIBLIOGRAFÍA.....	87

Esta tesis incluye un disco de 3 $\frac{1}{2}$ " con el programa *Eigengenerador* y una copia de la Guía Rápida del programa.

Introducción

Introducción

Las interacciones eléctricas y magnéticas en la espectroscopía Mössbauer están ampliamente documentadas en la literatura. Sin embargo, sólo se presentan las energías y los vectores de estado de los casos más simples y, aun para éstos, es común que no se presenten detalladamente los cálculos correspondientes. Aunado a esto, la literatura presenta diagramas de energías que no pueden mostrar de manera dinámica el comportamiento de energías, vectores de estado y otros parámetros de la espectroscopía Mössbauer.

OBJETIVO DE ESTA TESIS

El objetivo de esta tesis es desarrollar con detalle los cálculos de energías y vectores de estado de las cuatro interacciones eléctricas y magnéticas más comunes en la espectroscopía Mössbauer y emplear los resultados para diseñar un simulador computacional de dichas interacciones.

Las cuatro interacciones son:

- Dipolar Magnética (DM)
- Cuadripolar Eléctrica (CE)
- Dipolar Magnética fuerte y Cuadripolar Eléctrica débil (DM/ce)
- Cuadripolar Eléctrica fuerte y Dipolar Magnética débil (CE/dm)

Los cálculos se hacen aplicando la teoría de perturbación de Rayleigh-Schrödinger (a primer orden e independiente del tiempo). Las constantes empleadas son del isótopo ^{57}Fe , pero los cálculos son totalmente análogos para los demás isótopos Mössbauer.

El simulador computacional es un programa llamado *Eigenerador*, que es un laboratorio virtual y una herramienta didáctica de las interacciones DM, CE, DM/ce y CE/dm para el isótopo ^{57}Fe . El programa *Eigenerador* incluye pantallas de ayuda y una Guía Rápida para el usuario y contempla la incorporación de posibles extensiones que abarcan la mayoría de los isótopos Mössbauer.

ORGANIZACIÓN DE ESTA TESIS

Esta tesis está dividida en seis capítulos. El Capítulo I presenta las consideraciones preliminares en que se fundamentan los capítulos posteriores. Los Capítulos II-V están dedicados al cálculo detallado de las correcciones de energías (valores propios) y de los vectores de estado (vectores propios) de las interacciones DM, CE, DM/ce y CE/dm. El Capítulo VI describe las consideraciones fundamentales físicas y numéricas de la simulación computacional de las interacciones DM, CE, DM/ce y CE/dm basada en los cálculos de los capítulos anteriores y propone posibles extensiones de la simulación.

Esta tesis incluye un disco de $3\frac{1}{2}$ " con el programa *Eigenerador* y una copia de la Guía Rápida del programa.

Agradecimientos

Deseo agradecer al Profesor Sergio Aburto Duffau todos los conocimientos que me ha impartido, su apoyo irrestricto y su paciencia. Ha sido un verdadero maestro y guía. Agradezco también a los Profesores Eugenio Ley Koo, Raúl Valenzuela Monjaras, Alipio G. Calles Martínez y Darío Moreno Osorio, cuyos comentarios y observaciones enriquecieron el contenido de esta tesis.

Consideraciones Preliminares

CAPÍTULO I

A. ASPECTOS NUCLEARES

1. El efecto Mössbauer
2. El espín nuclear I y el número cuántico magnético m_I
3. Interacciones del núcleo
 - a. Interacción magnética
 - b. Interacción eléctrica
 - c. Interacciones magnéticas y eléctricas simultáneas
4. Reglas de selección

B. TEORÍA DE PERTURBACIÓN DE RAYLEIGH-SCHRÖDINGER (A primer orden e independiente del tiempo)

1. Casos degenerados
 2. Casos no degenerados
-

En este capítulo se describen las consideraciones preliminares para los cálculos y las simulaciones de esta tesis. En particular, se presentan las interacciones eléctricas y magnéticas del núcleo y la teoría de perturbación de Rayleigh-Schrödinger (a primer orden e independiente del tiempo).

A. ASPECTOS NUCLEARES

1. Efecto Mössbauer¹

El efecto Mössbauer consiste básicamente en la emisión y absorción resonante de fotones de rayos γ entre un núcleo emisor y un núcleo absorbedor sin que los núcleos reculen, esto es, sin pérdida de energía.

El isótopo ^{57}Fe es el isótopo Mössbauer² más común. En este isótopo, el fenómeno de resonancia ocurre entre un núcleo emisor en su primer estado excitado de energía E_2 y un núcleo absorbedor en su estado base de energía E_1 . La energía de esta transición es:

$$E_2 - E_1 = 14.4 \text{ keV} (= 3 \times 10^{11} \text{ mm/s})^3 \quad (\text{A-1})$$

2. El espín nuclear I y el número cuántico magnético m_I

El momento angular total del núcleo I es la suma de los momentos angulares totales j de los A nucleones (protones y neutrones) que componen el núcleo:

$$\mathbf{I} = \sum_{n=1}^A \mathbf{j}_n \quad \text{e} \quad I_z = \sum_{n=1}^A j_{nz} \quad (\text{A-2})$$

Al momento angular total I se le asocia un número cuántico I llamado espín nuclear. A los niveles base (E_1) y primero excitado (E_2) del núcleo del isótopo ^{57}Fe se les asigna espines nucleares $I=\frac{1}{2}$ e $I=\frac{3}{2}$ respectivamente⁴.

El número cuántico magnético m_I cuantifica la dirección de I y toma $2I+1$ valores. Por lo tanto, en el isótopo ^{57}Fe , los núcleos de espín nuclear $I=\frac{1}{2}$ tienen una degeneración de orden dos con los estados propios $|I, m_I\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ y $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$, y los núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ tienen una degeneración de orden cuatro con los estados propios $|I, m_I\rangle = |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$, $|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$, $|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ y $|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$. (NOTA: Para facilitar la escritura, si el valor del espín nuclear I se ha establecido previamente, los vectores de los estados propios se especifican únicamente con el número cuántico magnético m_I . Por ejemplo, si ya se ha establecido que $I=\frac{1}{2}$, el vector del estado propio $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ se escribe simplemente $|-\frac{1}{2}\rangle$.)

¹ May (1.1), Adloff (1.2); Janot (1.3); Wertheim (1.6); Greenwood y Gibb (1.7); Frauenfelder (1.8); y artículos de Kündig (1.9) y (1.10).

² Stevens y Stevens (1.4), p. 74.

³ Apéndice, §§2b y 3b.

⁴ Roy y Nigam (2.1), §§7.3 y 7.4; Blatt y Weisskopf (2.3), cap XIV, §2

3. Interacciones del núcleo

El núcleo está sujeto a interacciones magnéticas y eléctricas, las cuales producen un desdoblamiento hiperfino de sus niveles de energía E_1 y E_2 .

a. INTERACCIONES MAGNÉTICAS¹

El núcleo puede estar en un campo magnético \mathbf{B} externo o interno. El campo interno² es resultado de la interacción entre momentos magnéticos de los electrones del mismo átomo y de átomos vecinos. Además, el movimiento orbital y de rotación de los nucleones hace que el núcleo también tenga un momento magnético:

$$\mu = g\mu_N \mathbf{I} \quad (\text{A-3})$$

donde

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} \quad (\text{A-4})$$

es el magnetón nuclear, g es la razón giromagnética, e es la carga del protón, \hbar es la constante de Planck y m_p es la masa del protón³.

La interacción entre el campo magnético \mathbf{B} y el momento magnético μ hace que el núcleo se comporte como un dipolo magnético con una energía potencial⁴:

$$V = -\mu \cdot \mathbf{B} \quad (\text{A-5})$$

Si el campo magnético \mathbf{B} apunta en una dirección arbitraria designada por el vector unitario \mathbf{u} , en coordenadas esféricas se tiene:

$$\mathbf{B} = B\mathbf{u} = B(x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}) = B(\sin\theta \cos\phi \mathbf{i} + \sin\theta \sin\phi \mathbf{j} + \cos\theta \mathbf{k}) \quad (\text{A-6})$$

Combinando (A-3), (A-5) y (A-6), el hamiltoniano que representa esta interacción Dipolar Magnética (DM) es:

$$\mathcal{H}_{DM} = -g\mu_N B (\sin\theta \cos\phi I_x + \sin\theta \sin\phi I_y + \cos\theta I_z) \quad (\text{A-7})$$

¹ Janot (1.3), cap. 2

² Janot (1.3), §II.2.2.

³ Los valores de estas constantes se encuentran en el §2 del Apéndice.

⁴ Eisberg (4.1), cap. 11, §§1 y 2; artículo de Griffiths (4.2).

b. INTERACCIONES ELÉCTRICAS¹

El núcleo está sujeto a un campo eléctrico debido a los electrones de su átomo y a las cargas electrónicas y nucleares de los átomos vecinos. La energía total que resulta de la interacción entre la densidad de carga nuclear $\rho(\mathbf{r})$ en un punto definido por el vector \mathbf{r} y el potencial exterior $V(\mathbf{r})$ que existe en dicho punto debido a las cargas que rodean al núcleo, está dada por la expresión clásica:

$$E = \int \rho(\mathbf{r})V(\mathbf{r})d\tau \quad (\text{A-8})$$

El potencial exterior se puede desarrollar en serie de Taylor alrededor del origen (tomado como el centro de masa del núcleo):

$$V(\mathbf{r}) = V(0) + \sum_{\alpha=1}^3 x_{\alpha} \left(\frac{\partial V}{\partial x_{\alpha}} \right)_{r=0} + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha,\beta=1}^3 x_{\alpha} x_{\beta} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\beta}} \right)_{r=0} + \dots \quad (\text{A-9})$$

donde x_{α} ($\alpha = 1, 2, 3$) son las coordenadas x , y o z respectivamente del punto de interacción en el núcleo. Definiendo:

$$V_{\alpha} \equiv \left(\frac{\partial V}{\partial x_{\alpha}} \right)_{r=0} ; V_{\alpha,\beta} \equiv \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\beta}} \right)_{r=0} \quad (\text{A-10})$$

la energía de interacción (A-8) se puede escribir:

$$E = V(0) \int \rho(\mathbf{r}) d\tau + \sum_{\alpha} V_{\alpha} \int x_{\alpha} \rho(\mathbf{r}) d\tau + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha,\beta} V_{\alpha,\beta} \int x_{\alpha} x_{\beta} \rho(\mathbf{r}) d\tau + \dots \quad (\text{A-11})$$

El primer término del desarrollo (A-11) corresponde a una interacción entre el núcleo puntual y el potencial exterior. Esta energía es $V(0)Ze$, donde Ze es la carga del núcleo. Este término se puede ignorar, pues no depende del estado del núcleo y desplaza por igual todos los niveles de energía, lo que equivale a hacer un cambio de origen.

El segundo término del desarrollo (A-11) corresponde a una interacción de momento dipolar eléctrico. Considerando que:

$$\rho(\mathbf{r}) = -e|\varphi(\mathbf{r})|^2 \quad (\text{A-12})$$

se tiene que si el núcleo está en un estado de paridad definida, esto es, $\varphi(-\mathbf{r}) = \pm \varphi(\mathbf{r})$, el momento dipolar eléctrico del núcleo desaparece, pues haciendo la transformación $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ en el segundo término de (A-11), se tiene:

$$\sum_{\alpha} V_{\alpha} \int x_{\alpha} \rho(\mathbf{r}) d\tau = - \sum_{\alpha} V_{\alpha} \int x_{\alpha} \rho(\mathbf{r}) d\tau = 0 \quad (\text{A-13})$$

¹ May (1.1), cap. 4; Roy (2.1), cap. 2, §2.4; Slichter (5.1), cap. 6.

El tercer término del desarrollo (A-11) corresponde a una interacción Cuadripolar Eléctrica (CE). La integral de este término se puede reescribir en términos de un operador cuadripolar definido como:

$$Q_{\alpha\beta}^{(op)} = e \sum_{\text{protones}} (3x_{\alpha k} x_{\beta k} - \delta_{\alpha\beta} r_k^2) \quad (\text{A-14})$$

donde la suma es sobre las protones del núcleo 1, 2, ... k ... N, obteniéndose el hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{CE} = \frac{1}{6} \sum_{\alpha, \beta} V_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta}^{(op)} \quad (\text{A-15})$$

Como los estados propios del núcleo están caracterizados por el momento angular total, I , de cada estado, $2I + 1$ valores de una componente del momento angular, I_z , por ejemplo, y un juego de otros números cuánticos η , sólo es necesario calcular los elementos de matriz del tipo:

$$\left(\text{Im } \eta \left| Q_{\alpha\beta}^{(op)} \right| \text{Im}' \eta \right) = C \left(\text{Im} \left| \frac{3}{2} (I_\alpha I_\beta + I_\beta I_\alpha) - \delta_{\alpha\beta} I^2 \right| \text{Im}' \right) \quad (\text{A-16})$$

donde C es una constante, distinta para cada pareja de números cuánticos I y η .

Para un elemento de matriz con $m = m' = I$ y $\alpha = \beta = z$, se puede definir una cantidad eQ :

$$eQ = \left(\text{Im} \eta \left| e \sum_k^{\text{protones}} (3z_k^2 - r_k^2) \right| \text{Im} \eta \right) = C \left(\text{Im} \eta \left| 3I_z^2 - I^2 \right| \text{Im} \eta \right) = CI(2I - 1) \quad (\text{A-17})$$

de manera que:

$$C = \frac{eQ}{I(2I - 1)} \quad (\text{A-18})$$

donde Q se denomina el momento cuadripolar eléctrico del núcleo.

Seleccionando unos ejes principales tales que $V_{\alpha\beta} = 0$ si $\alpha \neq \beta$, y definiendo dos cantidades q y η , denominadas gradiente de campo eléctrico y parámetro de asimetría:

$$eq = V_{zz} \quad (\text{A-19})$$

$$\eta = \frac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}}; \quad 0 \leq \eta \leq 1 \quad (\text{A-20})$$

el hamiltoniano que representa la interacción Cuadripolar Eléctrica (CE) se puede escribir en términos de los operadores escalón I_\pm como:

$$\mathcal{H}_{CE} = \frac{eQV_{zz}}{4I(2I - 1)} \left[3I_z^2 - I^2 + \frac{\eta}{2} (I_+^2 + I_-^2) \right] \quad (\text{A-21})$$

c. INTERACCIONES MAGNÉTICAS Y ELÉCTRICAS SIMULTÁNEAS

Cuando el núcleo está en una estructura cristalina o molecular puede estar sujeto simultáneamente a interacciones magnéticas y eléctricas. Las interacciones pueden o no ser de magnitudes semejantes. En esta tesis se consideran las dos interacciones simultáneas más comunes en la espectroscopía Mössbauer, esto es, Dipolar Magnética fuerte y Cuadripolar Eléctrica débil (DM/ce), y Cuadripolar Eléctrica fuerte y Dipolar Magnética débil (CE/dm). Las interacciones “fuertes” son de unos 10 a 15 órdenes de magnitud mayores que las interacciones “débiles”.

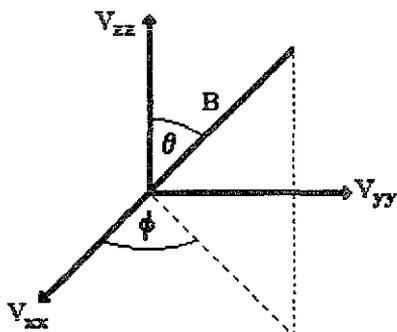


Fig. 1 Orientación de B en las interacciones DM/ce y CE/dm

Los hamiltonianos de las interacciones DM/ce y CE/dm son la suma de los hamiltonianos (A-7) y (A-21). Los cálculos de esta tesis suponen que la dirección de z se toma como la dirección del gradiente del campo eléctrico V_{zz} , de manera que los ángulos θ y ϕ especifican la orientación del campo magnético B con respecto al gradiente del campo eléctrico (fig. 1). El caso particular en que $\theta = 0^\circ$, se denomina Caso Paralelo, y el caso en que $\theta = 90^\circ$, se denomina Caso Perpendicular.

4. Reglas de selección

Al desdoblarse los niveles de energía E_1 y E_2 del núcleo a causa de las interacciones magnéticas y eléctricas descritas en el §A3, si se conoce el número cuántico magnético m_I correspondiente a los niveles de energía desdoblados, se pueden aplicar reglas de selección¹ que definen las transiciones permitidas entre estos niveles. Para un núcleo como el del isótopo ^{57}Fe sujeto a transiciones radiativas de rayos γ , estas reglas son:

$$\Delta m_I = 0, \pm 1 \quad (\text{A-22})$$

¹ Blatt y Weisskopf (2.3), cap. XII, §2.

Aplicando (A-22) a los estados propios descritos en el §A2, se tiene que, de ocho posibles transiciones, sólo están permitidas seis:

		Δm_l				
		-2	-1	0	1	2
$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \rightarrow$	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$		
$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \rightarrow$		$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	

Transición permitida

Transición prohibida

(A-23)

B. TEORÍA DE PERTURBACIÓN DE RAYLEIGH-SCHRÖDINGER¹ (A primer orden e independiente del tiempo)

Las correcciones a primer orden por el desdoblamiento de las energías E_1 y E_2 a causa de las interacciones DM, CE, DM/ce o CE/dm, y los correspondientes vectores de estado, se calculan aplicando la teoría de perturbación de Rayleigh-Schrödinger (a primer orden e independiente del tiempo). Esto es posible dado que:

- i) Para el isótopo ^{57}Fe , el desdoblamiento de las energías E_1 y E_2 por las interacciones DM, CE, DM/ce o CE/dm es un efecto hiperfino, de manera que las correcciones a estas energías son varios órdenes de magnitud menores que la energía $E_2 - E_1 = 14.4 \text{ keV}$ [cf. (A-1)].
- ii) El hamiltoniano H de un núcleo sujeto a una de las interacciones DM, CE, DM/ce o CE/dm, se puede escribir:

$$H = H_0 + W \quad (\text{B-1})$$

donde H_0 es el hamiltoniano del núcleo en ausencia de la interacción y W es el operador perturbador asociado a alguno de los hamiltonianos (A-7) o (A-21), o la suma de éstos, según el tipo de interacción.

- iii) Los valores y vectores propios del hamiltoniano no perturbado H_0 son conocidos. En el caso de las interacciones DM y CE, son las energías E_1 y E_2 y los vectores $|I, m_I\rangle$ descritos en el §A2. En el caso de las interacciones DM/ce y CE/dm, son las energías corregidas y los correspondientes vectores propios calculados para las interacciones DM y CE (Capítulos II y III).

1. Casos degenerados

Cuando las energías del hamiltoniano no perturbado H_0 son degeneradas, como en el caso de las energías E_1 y E_2 (§A2), la aplicación de la teoría de perturbación implica resolver la ecuación de valores propios:

$$W|\psi_n^{(0)}\rangle = \Delta E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle \quad (\text{B-2})$$

donde los valores propios $\Delta E_n^{(1)}$ son las correcciones a primer orden a las energías del hamiltoniano H_0 , y $|\psi_n^{(0)}\rangle$ son los correspondientes vectores propios a orden cero, los cuales son combinaciones lineales de los k vectores de estado $|\psi_{n1}^{(0)}\rangle, \dots, |\psi_{nk}^{(0)}\rangle$ [cf. los vectores $|I, m_I\rangle$ descritos en el §A2] asociados a las energías degeneradas del hamiltoniano H_0 , esto es:

$$|\psi_n^{(0)}\rangle = \sum_k c_k |\psi_{nk}^{(0)}\rangle \quad (\text{B-3})$$

¹ Cohen-Tannoudji (3.1), cap. XI; Merzbacher (3.2), cap. 17, §§1-3, 5.

Si el operador W se expresa como una matriz, la ecuación (B-2) es el sistema:

$$\begin{pmatrix} w_{11} & \cdots & w_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{k1} & \cdots & w_{kk} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_k \end{pmatrix} = \Delta E_n^{(1)} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_k \end{pmatrix} \tag{B-4}$$

donde la matriz W está en la base $\{|\psi_{n1}^{(0)}\rangle, \dots, |\psi_{nk}^{(0)}\rangle\}$. Por lo tanto, el cálculo de valores y vectores propios implica la diagonalización de una matriz cuya dimensión k es igual al orden de degeneración de la energía correspondiente al hamiltoniano no perturbado H_0 .

2. Casos no degenerados

Cuando las energías del hamiltoniano H_0 no son degeneradas, las correcciones a primer orden $\Delta E_n^{(1)}$ a estas energías son el valor medio del operador perturbativo W en el correspondiente estado no perturbado:

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | W | \psi_n^{(0)} \rangle \tag{B-5}$$

La teoría de perturbación para casos no degenerados supone que las funciones de onda¹ se pueden expandir en potencias de un parámetro de perturbación λ tal que:

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots \tag{B-6}$$

Haciendo $\lambda \ll 1$, se puede suponer:

$$\psi_n \cong \psi_n^{(0)} \tag{B-7}$$

Por lo tanto, los vectores de estado $|\psi_n\rangle$ correspondientes a la energía $E_n^{(0)} + \Delta E_n^{(1)}$ se pueden suponer aproximadamente iguales a los vectores de estado no perturbados $|\psi_n^{(0)}\rangle$.

¹ La relación entre funciones de onda y vectores de estado (vectores "ket" en notación de Dirac) se describe en Cohen-Tannoudji (3.1), cap. II, §B, y en Merzbacher (3.2), p. 327.

Interacción Dipolar Magnética (DM)

CAPÍTULO II

A. APLICACIÓN DE LA TEORÍA DE PERTURBACIÓN

1. Núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$ ($n=1$)
 2. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)
-

B. CÁLCULO DE VALORES Y VECTORES PROPIOS

1. Núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$ ($n=1$)
 - a. CASO GENERAL
 - b. DOS CASOS PARTICULARES
 - i. Caso Paralelo
 - ii. Caso Perpendicular
 2. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)
 - a. CASO GENERAL
 - b. DOS CASOS PARTICULARES
 - i. Caso Paralelo
 - ii. Caso Perpendicular
-

En este capítulo se aplica la teoría de perturbación para calcular las correcciones a las energías del núcleo del isótopo ^{57}Fe y sus correspondientes vectores de estado, cuando el núcleo está sujeto a una interacción Dipolar Magnética (DM).

A. APLICACIÓN DE LA TEORÍA DE PERTURBACIÓN

El hamiltoniano asociado al núcleo sujeto a una interacción DM es [cf. cap. I, (B-1)]:

$$H = H_0 + W_{\text{DM}} \quad (\text{A-1})$$

donde el operador perturbador que representa la interacción DM es [cf. cap. I, (A-7)]:

$$W_{\text{DM}} = -g\mu_N B (\sin\theta \cos\phi I_x + \sin\theta \sin\phi I_y + \cos\theta I_z) \quad (\text{A-2})$$

En el §A2 del Capítulo I se estableció que las energías E_1 y E_2 son degeneradas, de manera que se aplica la teoría de perturbación para casos degenerados descrita en el §B1 del Capítulo I. Esto implica resolver la ecuación de valores propios [cf. cap. I, (B-2)]:

$$W_{\text{DM}} |\psi_n^{(0)}\rangle = \Delta E_{n[\text{DM}]}^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (\text{A-3})$$

donde los valores propios $\Delta E_{n[\text{DM}]}^{(1)}$ son las correcciones a primer orden a las energías E_1 y E_2 debido a la interacción Dipolar Magnética (DM), y los vectores propios $|\psi_n^{(0)}\rangle$ son los correspondientes vectores de estado a orden cero.

1. Núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$ ($n=1$)

Del §A2 del Capítulo I se tiene que los núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$ tienen una degeneración con los estados propios $|\frac{1}{2}\rangle$ y $|\frac{-1}{2}\rangle$, de manera que es necesario expresar la matriz W_{DM} y el vector de estado $|\psi_1^{(0)}\rangle$ en la base de vectores $\{|\frac{1}{2}\rangle, |\frac{-1}{2}\rangle\}$.

El vector de estado es [cf. cap. I, (B-3)]:

$$|\psi_1^{(0)}\rangle = c_1 |\frac{1}{2}\rangle + c_2 |\frac{-1}{2}\rangle \quad (\text{A-4})$$

donde $|\frac{1}{2}\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $|\frac{-1}{2}\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

En la base $\{|\frac{1}{2}\rangle, |\frac{-1}{2}\rangle\}$ y en las unidades de \hbar , las representaciones matriciales de los operadores de espín I_x , I_y e I_z son¹:

$$I_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad I_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad I_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A-5})$$

¹ Cohen-Tannoudji (3.1), cap. VI, pp. 658-659.

Sustituyendo (A-5) en (A-2):

$$\begin{aligned}
 W_{DM} &= -g_1 u_n B \left\{ \text{sen}\theta \cos\phi \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] + \text{sen}\theta \text{sen}\phi \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] + \cos\theta \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \right\} \\
 &= -\frac{g_1 u_n B}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \text{sen}\theta \cos\phi - i \text{sen}\theta \text{sen}\phi \\ \text{sen}\theta \cos\phi + i \text{sen}\theta \text{sen}\phi & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{A-6}
 \end{aligned}$$

Haciendo $a = \cos\theta$, $b = \text{sen}\theta$ y $\beta = \frac{g_1 u_n B}{2}$, la matriz del operador W_{DM} en la base $\left\{ \left| \frac{1}{2} \right\rangle, \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \right\}$ es¹:

$$W_{DM}^{(XII)} = \begin{matrix} \left| \frac{1}{2} \right\rangle & \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2} \right\rangle & \left[-\beta \begin{pmatrix} a & b e^{-i\phi} \\ b e^{i\phi} & -a \end{pmatrix} \right] \\ \left| -\frac{1}{2} \right\rangle & \end{matrix} \tag{A-7}$$

¹ Los números romanos entre paréntesis se refieren a identidades y desarrollos listados en el §5 del Apéndice.

2. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)

Del §A2 del Capítulo I se tiene que los núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ tienen una degeneración con los estados propios $|\frac{3}{2}\rangle$, $|\frac{1}{2}\rangle$, $|\frac{-1}{2}\rangle$ y $|\frac{-3}{2}\rangle$, de manera que es necesario expresar la matriz \mathbb{W}_{DM} y el vector de estado $|\psi_2^{(0)}\rangle$ en la base de vectores $\{|\frac{3}{2}\rangle, |\frac{1}{2}\rangle, |\frac{-1}{2}\rangle, |\frac{-3}{2}\rangle\}$.

El vector de estado es [cf. cap. I, (B-3)]:

$$|\psi_2^{(0)}\rangle = c_1|\frac{3}{2}\rangle + c_2|\frac{1}{2}\rangle + c_3|\frac{-1}{2}\rangle + c_4|\frac{-3}{2}\rangle \quad (\text{A-8})$$

donde $|\frac{3}{2}\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|\frac{1}{2}\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|\frac{-1}{2}\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $|\frac{-3}{2}\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

En la base $\{|\frac{3}{2}\rangle, |\frac{1}{2}\rangle, |\frac{-1}{2}\rangle, |\frac{-3}{2}\rangle\}$ y en las unidades de \hbar , las representaciones matriciales de los operadores de espín I_X , I_Y e I_Z son¹:

$$\mathbb{I}_X = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbb{I}_Y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{3} & 0 & 0 \\ i\sqrt{3} & 0 & -2i & 0 \\ 0 & 2i & 0 & -i\sqrt{3} \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbb{I}_Z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} \quad (\text{A-9})$$

¹ Cohen-Tannoudji (3.1), cap. VI, pp. 658-659.

Sustituyendo (A-9) en (A-2):

$$\begin{aligned}
 W_{DM} &= -g_{\frac{1}{2}} u_n B \left\{ \sin\theta \cos\phi \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} \right] + \sin\theta \sin\phi \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{3} & 0 & 0 \\ i\sqrt{3} & 0 & -2i & 0 \\ 0 & 2i & 0 & -i\sqrt{3} \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} \right] + \cos\theta \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} \right] \right\} \\
 &= -\frac{g_{\frac{1}{2}} u_n B}{2} \begin{pmatrix} 3\cos\theta & \sqrt{3}\sin\theta\cos\phi - i\sqrt{3}\sin\theta\sin\phi & 0 & 0 \\ \sqrt{3}\sin\theta\cos\phi + i\sqrt{3}\sin\theta\sin\phi & \cos\theta & 2\sin\theta\cos\phi - 2i\sin\theta\sin\phi & 0 \\ 0 & 2\sin\theta\cos\phi + 2i\sin\theta\sin\phi & -\cos\theta & \sqrt{3}\sin\theta\cos\phi - i\sqrt{3}\sin\theta\sin\phi \\ 0 & 0 & \sqrt{3}\sin\theta\cos\phi + i\sqrt{3}\sin\theta\sin\phi & -3\cos\theta \end{pmatrix} \quad (A-10)
 \end{aligned}$$

Haciendo $a = \cos\theta$, $b = \sin\theta$ y $\alpha = \frac{g_{\frac{1}{2}} u_n B}{2}$, la matriz del operador W_{DM} en la base $\{|\frac{3}{2}\rangle, |\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{3}{2}\rangle\}$ es:

$$W_{DM}^{(XII)} = \begin{matrix} |\frac{3}{2}\rangle \\ |\frac{1}{2}\rangle \\ |-\frac{1}{2}\rangle \\ |-\frac{3}{2}\rangle \end{matrix} \begin{matrix} \begin{matrix} |\frac{3}{2}\rangle & |\frac{1}{2}\rangle & |-\frac{1}{2}\rangle & |-\frac{3}{2}\rangle \end{matrix} \\ -\alpha \begin{pmatrix} 3a & \sqrt{3}be^{-i\phi} & 0 & 0 \\ \sqrt{3}be^{i\phi} & a & 2be^{-i\phi} & 0 \\ 0 & 2be^{i\phi} & -a & \sqrt{3}be^{-i\phi} \\ 0 & 0 & \sqrt{3}be^{i\phi} & -3a \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (A-11)$$

B. CÁLCULO DE VALORES Y VECTORES PROPIOS

1. Núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$ ($n=1$)

a. CASO GENERAL

Sustituyendo (A-4, 7) en (A-3), [cf. cap. I, (B-4)]¹:

$$\begin{pmatrix} a & be^{-i\phi} \\ be^{i\phi} & -a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \Delta E_1^{(1)} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (\text{B-1})$$

donde $\Delta E_1^{(1)} = -\frac{\Delta E_1^{(1)}}{\beta}$.

El sistema (B-1) tiene solución no trivial si su determinante es igual a cero, esto es, si:

$$\begin{aligned} & \begin{vmatrix} |\frac{1}{2}\rangle & |-\frac{1}{2}\rangle \\ |\frac{1}{2}\rangle & a - \Delta E_1^{(1)} & be^{-i\phi} \\ |-\frac{1}{2}\rangle & be^{i\phi} & -a - \Delta E_1^{(1)} \end{vmatrix} \\ & = -(a - \Delta E_1^{(1)})(a + \Delta E_1^{(1)}) - b^2 = (\Delta E_1^{(1)})^2 - (a^2 + b^2) \stackrel{(IV)}{=} (\Delta E_1^{(1)})^2 - 1 = (\Delta E_1^{(1)} + 1)(\Delta E_1^{(1)} - 1) \\ & = 0 \end{aligned}$$

Las raíces de esta última ecuación son²:

$$\Delta E_{1\{\pm\frac{1}{2}\}}^{(1)} = -\frac{\Delta E_1^{(1)}}{\beta} = \pm 1$$

Por lo tanto, los valores propios que representan las correcciones a primer orden a la energía E_1 del núcleo debido a una interacción DM son:

$$\Delta E_{1\{\frac{1}{2}\}DM}^{(1)} = -\beta \quad (\text{B-2})$$

$$\Delta E_{1\{-\frac{1}{2}\}DM}^{(1)} = \beta \quad (\text{B-3})$$

La existencia de dos valores propios distintos (B-2) y (B-3) significa que la interacción DM levanta totalmente la degeneración de orden dos de la energía E_1 del núcleo.

¹ Para facilitar la lectura, se omite el subíndice “DM” en $\Delta E_1^{(1)}$ y $|\psi_1^{(0)}\rangle$ hasta llegar a resultados finales.

² El subíndice entre llaves $\{\}$ se refiere al número m_I del correspondiente estado propio en el Caso Paralelo (p. 24).

El sistema (B-1) representa las ecuaciones:

$$(a - \Delta E_1^{(1)})c_1 + be^{-i\phi}c_2 = 0 \tag{B-4-a}$$

$$be^{i\phi}c_1 - (a + \Delta E_1^{(1)})c_2 = 0 \tag{B-4-b}$$

Sustituyendo $\Delta E_{1\{\frac{1}{2}\}}^{(1)} = 1$ en (B-4-a):

$$c_2 = \frac{1-a}{b} e^{i\phi} c_1 \stackrel{(I,III)}{=} \frac{2 \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2}}{2 \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}} e^{i\phi} c_1 = \frac{\operatorname{sen} \frac{\theta}{2}}{\cos \frac{\theta}{2}} e^{i\phi} c_1$$

de donde:

$$|\Psi_{1\{\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\operatorname{sen} \frac{\theta}{2}}{\cos \frac{\theta}{2}} e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

Normalizando a la unidad, esto es, haciendo:

$$\left| |\Psi_{1\{\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle \right|^2 = |c_1|^2 \left(1 + \frac{\operatorname{sen} \frac{\theta}{2}}{\cos \frac{\theta}{2}} e^{-i\phi} \right) \left(\frac{\operatorname{sen} \frac{\theta}{2}}{\cos \frac{\theta}{2}} e^{i\phi} \right) = |c_1|^2 \left(1 + \frac{\operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2}}{\cos^2 \frac{\theta}{2}} \right) = |c_1|^2 \left(\frac{\cos^2 \frac{\theta}{2} + \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2}}{\cos^2 \frac{\theta}{2}} \right) = |c_1|^2 \frac{1}{\cos^2 \frac{\theta}{2}} = 1$$

de la última igualdad de esta expresión se obtiene el factor de normalización:

$$c_1 = \cos \frac{\theta}{2}$$

Por lo tanto, se obtiene el vector propio:

$$|\Psi_{1\{\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle = \cos \frac{\theta}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\operatorname{sen} \frac{\theta}{2}}{\cos \frac{\theta}{2}} e^{i\phi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = e^{i\frac{\phi}{2}} \left(\cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \right)$$

Eliminando el factor global de fase $e^{i\frac{\phi}{2}}$, este vector propio, que es el vector de estado a orden cero correspondiente al valor propio (B-2), se puede escribir¹:

$$\boxed{|\Psi_{1\{\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle_{DM} = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle} \tag{B-5}$$

¹ El factor de fase $e^{i\frac{\phi}{2}}$ no tiene ningún significado físico. Cohen-Tannoudji (3.1), cap. IV, p. 398.

Sustituyendo $\Delta E_{1\{-\frac{1}{2}\}}^{(1)} = -1$ en (B-4-b):

$$c_1 = \frac{a-1}{b} e^{-i\phi} c_2 \stackrel{(I,III)}{=} \frac{-2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}{2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}} e^{-i\phi} c_2 = -\frac{\sin \frac{\theta}{2}}{\cos \frac{\theta}{2}} e^{-i\phi} c_2$$

de donde:

$$|\Psi_{1\{-\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_2 \begin{pmatrix} -\frac{\sin \frac{\theta}{2}}{\cos \frac{\theta}{2}} e^{-i\phi} \\ 1 \end{pmatrix}$$

Nuevamente, haciendo $|\Psi_{1\{-\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle^2 = 1$, se obtiene el factor de normalización:

$$c_2 = \cos \frac{\theta}{2}$$

Por lo tanto, se obtiene el vector propio:

$$|\Psi_{1\{-\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle = \cos \frac{\theta}{2} \left[-\frac{\sin \frac{\theta}{2}}{\cos \frac{\theta}{2}} e^{-i\phi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = e^{-i\frac{\phi}{2}} \left(-\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \right)$$

Eliminando el factor global de fase $e^{-i\frac{\phi}{2}}$, este vector propio, que es el vector de estado a orden cero correspondiente al valor propio (B-3), se puede escribir:

$$\boxed{|\Psi_{1\{-\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle_{DM} = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle} \quad (B-6)$$

b. DOS CASOS PARTICULARES

Por inspección de los valores propios (B-2, 3) y los correspondientes vectores propios (B-5, 6) obtenidos en el Caso General, se tienen los siguientes dos casos particulares:

i. Caso Paralelo

$(\theta = 0^\circ ; \phi = 0^\circ)$

$\Delta E_1^{(1)}$	$ \Psi_1^{(0)}\rangle$
$\Delta E_{1\{\frac{1}{2}\}DM}^{(1)} = -\beta$	$ \Psi_{1\{\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \left \frac{1}{2} \right\rangle$
$\Delta E_{1\{-\frac{1}{2}\}DM}^{(1)} = \beta$	$ \Psi_{1\{-\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \left -\frac{1}{2} \right\rangle$

(B-7-a,b)

(B-8-a,b)

ii. Caso Perpendicular

$(\theta = 90^\circ ; \phi = 0^\circ)$

$\Delta E_1^{(1)}$	$ \Psi_1^{(0)}\rangle$
$\Delta E_{1\{\frac{1}{2}\}DM}^{(1)} = -\beta$	$ \Psi_{1\{\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left \frac{1}{2} \right\rangle + \left -\frac{1}{2} \right\rangle \right)$
$\Delta E_{1\{-\frac{1}{2}\}DM}^{(1)} = \beta$	$ \Psi_{1\{-\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left -\frac{1}{2} \right\rangle - \left \frac{1}{2} \right\rangle \right)$

(B-9-a,b)

(B-10-a,b)

2. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)

a. CASO GENERAL

Sustituyendo (A-8, 11) en (A-3), [cf. cap. I, (B-4)]¹:

$$\begin{pmatrix} 3a & \sqrt{3}be^{-i\phi} & 0 & 0 \\ \sqrt{3}be^{i\phi} & a & 2be^{-i\phi} & 0 \\ 0 & 2be^{i\phi} & -a & \sqrt{3}be^{-i\phi} \\ 0 & 0 & \sqrt{3}be^{i\phi} & -3a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = \Delta E_2^{(1)} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} \quad (\text{B-11})$$

donde $\Delta E_2^{(1)} = -\frac{\Delta E_2^{(1)}}{\alpha}$.

El sistema (B-11) tiene solución no trivial si su determinante es igual a cero, esto es, si:

$$\begin{aligned} & \begin{matrix} |\frac{3}{2}\rangle & |\frac{1}{2}\rangle & |-\frac{1}{2}\rangle & |-\frac{3}{2}\rangle \\ |\frac{3}{2}\rangle & |\frac{1}{2}\rangle & |-\frac{1}{2}\rangle & |-\frac{3}{2}\rangle \\ |-\frac{1}{2}\rangle & |-\frac{3}{2}\rangle & & \\ |-\frac{3}{2}\rangle & & & \end{matrix} \begin{vmatrix} 3a - \Delta E_2^{(1)} & \sqrt{3}be^{-i\phi} & 0 & 0 \\ \sqrt{3}be^{i\phi} & a - \Delta E_2^{(1)} & 2be^{-i\phi} & 0 \\ 0 & 2be^{i\phi} & -a - \Delta E_2^{(1)} & \sqrt{3}be^{-i\phi} \\ 0 & 0 & \sqrt{3}be^{i\phi} & -3a - \Delta E_2^{(1)} \end{vmatrix} \\ &= 3a - \Delta E_2^{(1)} \begin{vmatrix} a - \Delta E_2^{(1)} & 2be^{-i\phi} & 0 \\ 2be^{i\phi} & -a - \Delta E_2^{(1)} & \sqrt{3}be^{-i\phi} \\ 0 & \sqrt{3}be^{i\phi} & -3a - \Delta E_2^{(1)} \end{vmatrix} - \sqrt{3}be^{-i\phi} \begin{vmatrix} \sqrt{3}be^{i\phi} & 2be^{-i\phi} & 0 \\ 0 & -a - \Delta E_2^{(1)} & \sqrt{3}be^{-i\phi} \\ 0 & \sqrt{3}be^{i\phi} & -3a - \Delta E_2^{(1)} \end{vmatrix} \\ &= (3a - \Delta E_2^{(1)}) \{ a - \Delta E_2^{(1)} [(-a - \Delta E_2^{(1)}) \chi - 3a - \Delta E_2^{(1)}] - 3b^2 \} - 2be^{-i\phi} (2be^{i\phi} \chi - 3a - \Delta E_2^{(1)}) \} - \sqrt{3}be^{-i\phi} \{ \sqrt{3}be^{i\phi} [(-a - \Delta E_2^{(1)}) \chi - 3a - \Delta E_2^{(1)}] - 3b^2 \} \\ &= (\Delta E_2^{(1)})^4 - 10(a^2 + b^2)(\Delta E_2^{(1)})^2 + 9(a^2 + b^2)^2 \stackrel{(IV)}{=} (\Delta E_2^{(1)})^4 - 10(\Delta E_2^{(1)})^2 + 9 = \left[(\Delta E_2^{(1)})^2 - 9 \right] \left[(\Delta E_2^{(1)})^2 - 1 \right] \\ &= 0 \end{aligned}$$

¹ Para facilitar la lectura, se omite el subíndice "DM" en $\Delta E_2^{(1)}$ y $|\psi_2^{(0)}\rangle$ hasta llegar a resultados finales.

Las raíces de esta última ecuación son¹:

$$\Delta E_{2\{\pm\frac{3}{2}\}}^{(1)} = -\frac{\Delta E_{2\{\pm\frac{3}{2}\}}^{(1)}}{\alpha} = \pm 3$$

$$\Delta E_{2\{\pm\frac{1}{2}\}}^{(1)} = -\frac{\Delta E_{2\{\pm\frac{1}{2}\}}^{(1)}}{\alpha} = \pm 1$$

Por lo tanto, los valores propios que representan las correcciones a primer orden a la energía E_2 del núcleo debido a una interacción DM son:

$\Delta E_{2\{\frac{3}{2}\}}^{(1)}_{DM} = -3\alpha$	(B-12)
---	--------

$\Delta E_{2\{\frac{1}{2}\}}^{(1)}_{DM} = -\alpha$	(B-13)
--	--------

$\Delta E_{2\{-\frac{1}{2}\}}^{(1)}_{DM} = \alpha$	(B-14)
--	--------

$\Delta E_{2\{-\frac{3}{2}\}}^{(1)}_{DM} = 3\alpha$	(B-15)
---	--------

La existencia de cuatro valores propios distintos (B-12, 13, 14, 15) significa que la interacción DM levanta totalmente la degeneración de orden cuatro de la energía E_2 del núcleo.

¹ El subíndice entre llaves { } se refiere al número m_l del correspondiente estado propio en el Caso Paralelo (p. 35).

El sistema (B-11) representa las ecuaciones:

$$(3a - \Delta E_2^{(1)})c_1 + \sqrt{3}be^{-i\phi}c_2 = 0 \quad (\text{B-16-a})$$

$$\sqrt{3}be^{i\phi}c_1 + (a - \Delta E_2^{(1)})c_2 + 2be^{-i\phi}c_3 = 0 \quad (\text{B-16-b})$$

$$2be^{i\phi}c_2 - (a + \Delta E_2^{(1)})c_3 + \sqrt{3}be^{-i\phi}c_4 = 0 \quad (\text{B-16-c})$$

$$\sqrt{3}be^{i\phi}c_3 - (3a + \Delta E_2^{(1)})c_4 = 0 \quad (\text{B-16-d})$$

Sustituyendo $\Delta E_2^{(1)} = 3$ en (B-16), se obtiene, de (B-16-a):

$$c_2 = \sqrt{3} \left(\frac{1-a}{b} \right) e^{i\phi} c_1 \stackrel{(I,III)}{=} \sqrt{3} \left(\frac{2 \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2}}{2 \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}} \right) e^{i\phi} c_1 = \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{i\phi} c_1 \quad (\text{B-17})$$

de (B-16-b):

$$c_3 = \left[\frac{-\sqrt{3}be^{i\phi}c_1 - (a-3)c_2}{2b} \right] e^{i\phi} \stackrel{(B-17, \text{Paso1})}{=} -\sqrt{3} \left[\frac{(a-3)(1-a) + b^2}{2b^2} \right] e^{2i\phi} c_1 \stackrel{(I, VIII)}{=} -\sqrt{3} \left(\frac{-8 \operatorname{sen}^4 \frac{\theta}{2}}{8 \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}} \right) e^{2i\phi} c_1 = \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} c_1 \quad (\text{B-18})$$

y de (B-16-d):

$$c_4 = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{b}{1+a} \right) e^{i\phi} c_3 \stackrel{(B-18, \text{Paso2})}{=} \left[\frac{(a-3)(1-a) + b^2}{2b(1+a)} \right] e^{3i\phi} c_1 \stackrel{(I, II, VIII)}{=} \left[\frac{-8 \operatorname{sen}^4 \frac{\theta}{2}}{2(2 \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2})(2 \cos^2 \frac{\theta}{2})} \right] e^{3i\phi} c_1 = \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{3i\phi} c_1$$

de manera que:

$$|\Psi_{2\{\frac{3}{2}\}}^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \\ \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} \\ \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{3i\phi} \end{pmatrix}$$

Normalizando a la unidad, esto es, haciendo:

$$\left| \langle \psi_{2\frac{3}{2}}^{(0)} \rangle \right|^2 = |c_1|^2 \left(1 - \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} - \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} - \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{-3i\phi} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \\ \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} \\ \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{3i\phi} \end{pmatrix} = |c_1|^2 \left(1 + 3 \tan^2 \frac{\theta}{2} + 3 \tan^4 \frac{\theta}{2} + \tan^6 \frac{\theta}{2} \right) = |c_1|^2 \left(1 + \tan^2 \frac{\theta}{2} \right)^3 \stackrel{(XI)}{=} |c_1|^2 \sec^6 \frac{\theta}{2} \stackrel{(X)}{=} |c_1|^2 \frac{1}{\cos^6 \frac{\theta}{2}} = 1$$

de la última igualdad de esta expresión se obtiene el factor de normalización:

$$c_1 = \cos^3 \frac{\theta}{2}$$

Por lo tanto, se obtiene el vector propio:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{2\frac{3}{2}}^{(0)} \rangle &= \cos^3 \frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \\ \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} \\ \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{3i\phi} \end{pmatrix} \\ &= \cos^3 \frac{\theta}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{3i\phi} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \cos^3 \frac{\theta}{2} \left[e^{-i\phi} \left(e^{i\phi} \left| \frac{3}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{3i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{4i\phi} \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right) \right] \end{aligned}$$

(B-19)

Eliminando el factor global de fase $e^{-i\phi}$, este vector propio, que es el vector de estado a orden cero correspondiente al valor propio (B-12), se puede escribir:

$$\langle \psi_{2\frac{3}{2}}^{(0)} \rangle_{DM} = \cos^3 \frac{\theta}{2} \left(e^{i\phi} \left| \frac{3}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{3i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{4i\phi} \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right)$$

(B-20)

Sustituyendo $\Delta E'_{2\{\frac{1}{2}\}}^{(1)} = 1$ en (B-16), se obtiene, de (B-16-a):

$$c_1 = -\sqrt{3}\left(\frac{b}{3a-1}\right)e^{-i\phi}c_2 = -\sqrt{3}\left(\frac{\text{sen}\theta}{3\cos\theta-1}\right)e^{-i\phi}c_2 \quad (\text{B-21})$$

de (B-16-b):

$$c_3 = \left[\frac{(1-a)c_2 - \sqrt{3}bc_1}{2b}\right]e^{i\phi} \stackrel{(\text{B-21, Paso 1})}{=} \left[\frac{3(b^2 - a^2) + 4a - 1}{2b(3a-1)}\right]e^{i\phi}c_2 \stackrel{(\text{I, IX})}{=} \left(\frac{4\text{sen}^2\frac{\theta}{2}(3\cos\theta+1)}{4\text{sen}\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}(3\cos\theta-1)}\right)e^{i\phi}c_2 = \tan\frac{\theta}{2}\left(\frac{3\cos\theta+1}{3\cos\theta-1}\right)e^{i\phi}c_2 \quad (\text{B-22})$$

y de (B-16-d):

$$c_4 = \sqrt{3}\left(\frac{b}{3a+1}\right)e^{i\phi}c_3 = \sqrt{3}\left(\frac{\text{sen}\theta}{3\cos\theta+1}\right)e^{i\phi}c_3 \stackrel{(\text{B-22, Paso 4})}{=} \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\left(\frac{\text{sen}\theta}{3\cos\theta-1}\right)e^{2i\phi}c_2$$

de manera que:

$$|\psi_{2\{\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = c_2 \begin{pmatrix} -\sqrt{3}\left(\frac{\text{sen}\theta}{3\cos\theta-1}\right)e^{-i\phi} \\ 1 \\ \tan\frac{\theta}{2}\left(\frac{3\cos\theta+1}{3\cos\theta-1}\right)e^{i\phi} \\ \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\left(\frac{\text{sen}\theta}{3\cos\theta-1}\right)e^{2i\phi} \end{pmatrix}$$

Normalizando a la unidad, esto es, haciendo:

$$\begin{aligned} \left| |\psi_{2\{\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle \right|^2 &= |c_2|^2 \left(-\sqrt{3}\left(\frac{\text{sen}\theta}{3\cos\theta-1}\right)e^{-i\phi} \quad 1 \quad \tan\frac{\theta}{2}\left(\frac{3\cos\theta+1}{3\cos\theta-1}\right)e^{i\phi} \quad \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\left(\frac{\text{sen}\theta}{3\cos\theta-1}\right)e^{2i\phi} \right) \begin{pmatrix} -\sqrt{3}\left(\frac{\text{sen}\theta}{3\cos\theta-1}\right)e^{-i\phi} \\ 1 \\ \tan\frac{\theta}{2}\left(\frac{3\cos\theta+1}{3\cos\theta-1}\right)e^{i\phi} \\ \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\left(\frac{\text{sen}\theta}{3\cos\theta-1}\right)e^{2i\phi} \end{pmatrix} \\ &= |c_2|^2 \left[\frac{3\text{sen}^2\theta}{(3\cos\theta-1)^2} + 1 + \tan^2\frac{\theta}{2}\left(\frac{3\cos\theta+1}{3\cos\theta-1}\right)^2 + \tan^2\frac{\theta}{2}\frac{3\text{sen}^2\theta}{(3\cos\theta-1)^2} \right] \\ &= 1 \end{aligned}$$

De la última igualdad de esta expresión se obtiene el factor de normalización:

$$c_2 = \frac{3\cos\theta - 1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}}$$

Por lo tanto, se obtiene el vector propio:

$$\begin{aligned} |\Psi_{2\frac{1}{2}}^{(0)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}} \begin{pmatrix} -\sqrt{3}\sin\theta e^{-i\phi} \\ 3\cos\theta - 1 \\ \tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{i\phi} \\ \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta e^{2i\phi} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}} \left[-\sqrt{3}\sin\theta e^{-i\phi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + (3\cos\theta - 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{i\phi} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta e^{2i\phi} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}} e^{-2i\phi} \left[-\sqrt{3}\sin\theta e^{i\phi} \left| \frac{3}{2} \right\rangle + (3\cos\theta - 1)e^{2i\phi} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{3i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta e^{4i\phi} \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{B-23})$$

Eliminando el factor global de fase $e^{-2i\phi}$, este vector propio, que es el vector de estado a orden cero correspondiente al valor propio (B-13), se puede escribir:

$$\boxed{|\Psi_{2\frac{1}{2}}^{(0)}\rangle_{DM} = \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}} \left[-\sqrt{3}\sin\theta e^{i\phi} \left| \frac{3}{2} \right\rangle + (3\cos\theta - 1)e^{2i\phi} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{3i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta e^{4i\phi} \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right]} \quad (\text{B-24})$$

Sustituyendo $\Delta E_{2\{-\frac{1}{2}\}}^{(1)} = -1$ en (B-16), se obtiene, de (B-16-d):

$$c_4 = \sqrt{3} \left(\frac{b}{3a-1} \right) e^{i\phi} c_3 = \sqrt{3} \left(\frac{\text{sen } \theta}{3\cos\theta - 1} \right) e^{i\phi} c_3 \quad (\text{B-25})$$

de (B-16-c):

$$c_2 = \left[\frac{(a-1)c_3 - \sqrt{3}bc_4}{2b} \right] e^{-i\phi} \stackrel{(\text{B-25, Paso 1})}{=} - \left[\frac{3(b^2 - a^2) + 4a - 1}{2b(3a-1)} \right] e^{-i\phi} c_3 \stackrel{(\text{B-22, Pasos 2 y 4})}{=} - \tan \frac{\theta}{2} \left(\frac{3\cos\theta + 1}{3\cos\theta - 1} \right) e^{-i\phi} c_3 \quad (\text{B-26})$$

y de (B-16-a):

$$c_1 = -\sqrt{3} \left(\frac{b}{3a+1} \right) e^{-i\phi} c_2 = -\sqrt{3} \left(\frac{\text{sen } \theta}{3\cos\theta + 1} \right) e^{-i\phi} c_2 \stackrel{(\text{B-26, Paso 3})}{=} \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} \left(\frac{\text{sen } \theta}{3\cos\theta - 1} \right) e^{-2i\phi} c_3$$

de manera que:

$$|\Psi_{2\{-\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = c_3 \begin{pmatrix} \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} \left(\frac{\text{sen } \theta}{3\cos\theta - 1} \right) e^{-2i\phi} \\ -\tan \frac{\theta}{2} \left(\frac{3\cos\theta + 1}{3\cos\theta - 1} \right) e^{-i\phi} \\ 1 \\ \sqrt{3} \left(\frac{\text{sen } \theta}{3\cos\theta - 1} \right) e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

Nuevamente, haciendo $\left| \Psi_{2\{-\frac{1}{2}\}}^{(0)} \right|^2 = 1$, se obtiene el factor de normalización:

$$c_3 = \frac{3\cos\theta - 1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2 \frac{\theta}{2} [3\text{sen}^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}}$$

Por lo tanto, se obtiene el vector propio:

$$\begin{aligned}
 |\psi_{2\{-\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}} \begin{pmatrix} \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta e^{-2i\phi} \\ -\tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{-i\phi} \\ 3\cos\theta - 1 \\ \sqrt{3}\sin\theta e^{i\phi} \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}} \left[\sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta e^{-2i\phi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{-i\phi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + (3\cos\theta - 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{3}\sin\theta e^{i\phi} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \\
 &= \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}} e^{2i\phi} \left[\sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta e^{-4i\phi} \left| \frac{3}{2} \right\rangle - \tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{-3i\phi} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + (3\cos\theta - 1)e^{-2i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{3}\sin\theta e^{-i\phi} \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right]
 \end{aligned} \tag{B-27}$$

Eliminando el factor global de fase $e^{2i\phi}$, este vector propio, que es el vector de estado a orden cero correspondiente al valor propio (B-14), se puede escribir:

$$\boxed{|\psi_{2\{-\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle_{DM} = \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}} \left[\sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta e^{-4i\phi} \left| \frac{3}{2} \right\rangle - \tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{-3i\phi} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + (3\cos\theta - 1)e^{-2i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{3}\sin\theta e^{-i\phi} \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right]} \tag{B-28}$$

Sustituyendo $\Delta E'_{2\{\frac{1}{2}\}} = -3$ en (B-16), se obtiene, de (B-16-a):

$$c_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{b}{1+a} \right) e^{-i\phi} c_2 \quad (\text{B-29})$$

de (B-16-d):

$$c_3 = -\sqrt{3} \left(\frac{1-a}{b} \right) e^{-i\phi} c_4 \stackrel{(I,III)}{=} -\sqrt{3} \left(\frac{2 \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2}}{2 \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}} \right) e^{-i\phi} c_4 = -\sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} c_4 \quad (\text{B-30})$$

de (B-16-b):

$$c_2 = \frac{-\sqrt{3} b e^{i\phi} c_1 - 2 b e^{-i\phi} c_3}{a+3} \stackrel{(\text{B-29}, \text{B-30}, \text{Paso 1})}{=} 2\sqrt{3} \left[\frac{(1+a)(1-a)}{(3+a)(1+a) - b^2} \right] e^{-2i\phi} c_4 \stackrel{(VI, VII)}{=} 2\sqrt{3} \left(\frac{4 \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}}{8 \cos^4 \frac{\theta}{2}} \right) e^{-2i\phi} c_4 = \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} c_4 \quad (\text{B-31})$$

y de (B-29) y (B-31, Paso 2):

$$c_1 = -\left[\frac{2b(1-a)}{(3+a)(1+a) - b^2} \right] e^{-3i\phi} c_4 \stackrel{(I, III, VII)}{=} -\left(\frac{2(2 \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2})(2 \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2})}{8 \cos^4 \frac{\theta}{2}} \right) e^{-3i\phi} c_4 = -\tan^3 \frac{\theta}{2} e^{-3i\phi} c_4$$

de manera que:

$$|\Psi_{2\{\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = c_4 \begin{pmatrix} -\tan^3 \frac{\theta}{2} e^{-3i\phi} \\ \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} \\ -\sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ 1 \end{pmatrix}$$

Nuevamente, haciendo $|\langle \Psi_{2\{-\frac{3}{2}\}}^{(0)} | \Psi_{2\{-\frac{3}{2}\}}^{(0)} \rangle|^2 = 1$, se obtiene el factor de normalización:

$$c_4 = \cos^3 \frac{\theta}{2}$$

Por lo tanto, se obtiene el vector propio:

$$\begin{aligned} |\Psi_{2\{-\frac{3}{2}\}}^{(0)}\rangle &= \cos^3 \frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} -\tan^3 \frac{\theta}{2} e^{-3i\phi} \\ \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} \\ -\sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \cos^3 \frac{\theta}{2} \left[-\tan^3 \frac{\theta}{2} e^{-3i\phi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \cos^3 \frac{\theta}{2} \left[e^{i\phi} \left(-\tan^3 \frac{\theta}{2} e^{-4i\phi} \left| \frac{3}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-3i\phi} \left| \frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + e^{-i\phi} \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{B-32})$$

Eliminando el factor global de fase $e^{i\phi}$, este vector propio, que es el vector de estado a orden cero correspondiente al valor propio (B-15) se puede escribir:

$$|\Psi_{2\{-\frac{3}{2}\}}^{(0)}\rangle_{\text{DM}} = \cos^3 \frac{\theta}{2} \left(-\tan^3 \frac{\theta}{2} e^{-4i\phi} \left| \frac{3}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-3i\phi} \left| \frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + e^{-i\phi} \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right) \quad (\text{B-33})$$

b. DOS CASOS PARTICULARES

Por inspección de los valores propios (B-12, 13, 14, 15) y los correspondientes vectores propios (B-20, 24, 28, 33) obtenidos en el Caso General, se tienen los siguientes dos casos particulares:

i. Caso Paralelo

($\theta = 0^\circ$; $\phi = 0^\circ$)

$\Delta E_2^{(1)}$	$ \psi_2^{(0)}\rangle$	
$\Delta E_{2\{\frac{3}{2}\}DM}^{(1)} = -3\alpha$	$ \psi_{2\{\frac{3}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \left \frac{3}{2} \right\rangle$	(B-34-a,b)
$\Delta E_{2\{\frac{1}{2}\}DM}^{(1)} = -\alpha$	$ \psi_{2\{\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \left \frac{1}{2} \right\rangle$	(B-35-a,b)
$\Delta E_{2\{-\frac{1}{2}\}DM}^{(1)} = \alpha$	$ \psi_{2\{-\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \left -\frac{1}{2} \right\rangle$	(B-36-a,b)
$\Delta E_{2\{-\frac{3}{2}\}DM}^{(1)} = 3\alpha$	$ \psi_{2\{-\frac{3}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \left -\frac{3}{2} \right\rangle$	(B-37-a,b)

ii. Caso Perpendicular

($\theta = 90^\circ$; $\phi = 0^\circ$)

$\Delta E_2^{(1)}$	$ \psi_2^{(0)}\rangle$	
$\Delta E_{2\{\frac{3}{2}\}DM}^{(1)} = -3\alpha$	$ \psi_{2\{\frac{3}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\left \frac{3}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \left(\left \frac{1}{2} \right\rangle + \left -\frac{1}{2} \right\rangle \right) + \left -\frac{3}{2} \right\rangle \right]$	(B-38-a,b)
$\Delta E_{2\{\frac{1}{2}\}DM}^{(1)} = -\alpha$	$ \psi_{2\{\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[-\sqrt{3} \left(\left \frac{3}{2} \right\rangle - \left -\frac{3}{2} \right\rangle \right) - \left \frac{1}{2} \right\rangle + \left -\frac{1}{2} \right\rangle \right]$	(B-39-a,b)
$\Delta E_{2\{-\frac{1}{2}\}DM}^{(1)} = \alpha$	$ \psi_{2\{-\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\sqrt{3} \left(\left \frac{3}{2} \right\rangle + \left -\frac{3}{2} \right\rangle \right) - \left \frac{1}{2} \right\rangle - \left -\frac{1}{2} \right\rangle \right]$	(B-40-a,b)
$\Delta E_{2\{-\frac{3}{2}\}DM}^{(1)} = 3\alpha$	$ \psi_{2\{-\frac{3}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[-\left \frac{3}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \left(\left \frac{1}{2} \right\rangle - \left -\frac{1}{2} \right\rangle \right) + \left -\frac{3}{2} \right\rangle \right]$	(B-41-a,b)

Interacción Cuadripolar Eléctrica (CE)

CAPÍTULO III

A. APLICACIÓN DE LA TEORÍA DE PERTURBACIÓN

1. Núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$ ($n=1$)
 2. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)
-

B. CÁLCULO DE VALORES Y VECTORES PROPIOS

1. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)
 - a. CASO GENERAL
 - b. CASO PARTICULAR
 - i. Caso Simétrico
-

En este capítulo se aplica la teoría de perturbación para calcular las correcciones a las energías del núcleo del isótopo ^{57}Fe y sus correspondientes vectores de estado, cuando el núcleo está sujeto a una interacción Cuadripolar Eléctrica (CE).

A. APLICACIÓN DE LA TEORÍA DE PERTURBACIÓN

El hamiltoniano asociado al núcleo sujeto a una interacción CE es [cf. cap. I, (B-1)]:

$$H = H_0 + W_{\text{CE}} \quad (\text{A-1})$$

donde el operador perturbador que representa la interacción CE es [cf. cap. I, (A-21)]:

$$W_{\text{CE}} = \frac{eQV_{zz}}{4I(2I-1)} \left[3I_z^2 - I^2 + \frac{\eta}{2} (I_+^2 + I_-^2) \right] \quad (\text{A-2})$$

En el §A2 del Capítulo I se estableció que las energías E_1 y E_2 son degeneradas, de manera que se aplica la teoría de perturbación para casos degenerados descrita en el §B1 del Capítulo I. Esto implica resolver la ecuación de valores propios [cf. cap. I, (B-2)]:

$$W_{\text{CE}} |\psi_n^{(0)}\rangle = \Delta E_{n[\text{CE}]}^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (\text{A-3})$$

donde los valores propios $\Delta E_{n[\text{CE}]}^{(1)}$ son las correcciones a primer orden debido a la interacción Cuadripolar Eléctrica (CE), y los vectores propios $|\psi_n^{(0)}\rangle$ son los correspondientes vectores de estado a orden cero.

1. Núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$ ($n=1$)

Los núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$ no tienen momento cuadripolar eléctrico ($eQ = 0$)¹ [cf. cap. I (A-17)], por lo que es nulo el operador (A-2) y no se desdobra la energía no perturbada E_1 .

2. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)

Del §A2 del Capítulo I se tiene que los núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ tienen una degeneración con los estados propios $|\frac{3}{2}\rangle$, $|\frac{1}{2}\rangle$, $|\frac{1}{2}\rangle$ y $|\frac{3}{2}\rangle$, de manera que es necesario expresar la matriz W_{CE} y el vector de estado $|\psi_2^{(0)}\rangle$ en la base de vectores $\left\{ |\frac{3}{2}\rangle, |\frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}\rangle \right\}$.

El vector de estado es [cf. cap. I, (B-3)]:

$$|\psi_2^{(0)}\rangle = c_1 |\frac{3}{2}\rangle + c_2 |\frac{1}{2}\rangle + c_3 |\frac{1}{2}\rangle + c_4 |\frac{3}{2}\rangle \quad (\text{A-4})$$

donde $|\frac{3}{2}\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|\frac{1}{2}\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|\frac{1}{2}\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $|\frac{3}{2}\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

¹ Cohen-Tannoudji (3.1), cap. XI, p. 1314; cap. X, pp. 1046-1047

En la base $\{|\frac{3}{2}\rangle, |\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{3}{2}\rangle\}$ y en las unidades de \hbar , las representaciones matriciales de los cuadrados de los operadores de espín I , I_z , I_+ e I_- son¹:

$$I^2 = \frac{15}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad (I_z)^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \end{pmatrix}; \quad (I_+)^2 = 2\sqrt{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (I_-)^2 = 2\sqrt{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (A-5)$$

Sustituyendo (A-5) en (A-2):

$$W_{CE} = \frac{eQV_{zz}}{4I(2I-1)} \left\{ \begin{matrix} 3 \\ 4 \end{matrix} \begin{pmatrix} 9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \end{pmatrix} - \frac{15}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\eta}{2} \left[2\sqrt{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + 2\sqrt{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \right\} \quad (A-6)$$

Haciendo $A = \frac{eQV_{zz}}{4I(2I-1)}$, la matriz del operador W_{CE} en la base $\{|\frac{3}{2}\rangle, |\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{3}{2}\rangle\}$ es:

$$W_{CE} = \begin{matrix} & |\frac{3}{2}\rangle & |\frac{1}{2}\rangle & |-\frac{1}{2}\rangle & |-\frac{3}{2}\rangle \\ \begin{matrix} |\frac{3}{2}\rangle \\ |\frac{1}{2}\rangle \\ |-\frac{1}{2}\rangle \\ |-\frac{3}{2}\rangle \end{matrix} & \left[\begin{matrix} 1 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} \\ \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & 1 \end{matrix} \right] \end{matrix} \quad (A-7)$$

¹ Cohen-Tannoudji (3.1), cap. VI, pp. 658-659.

B. CÁLCULO DE VALORES Y VECTORES PROPIOS

1. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)

a. CASO GENERAL

Sustituyendo (A-4, 7) en (A-3), [cf. cap. I, (B-4)]¹:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} \\ \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = \Delta E_2^{(1)} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} \quad (\text{B-1})$$

donde $\Delta E_2^{(1)} = \frac{\Delta E_2^{(1)}}{3A}$.

El sistema (B-1) tiene solución no trivial si su determinante es igual a cero, esto es, si:

$$\begin{aligned} & \begin{vmatrix} | \frac{3}{2} \rangle & | \frac{1}{2} \rangle & | -\frac{1}{2} \rangle & | -\frac{3}{2} \rangle \\ | \frac{3}{2} \rangle & 1 - \Delta E_2^{(1)} & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 \\ | \frac{1}{2} \rangle & 0 & -1 - \Delta E_2^{(1)} & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} \\ | -\frac{1}{2} \rangle & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & -1 - \Delta E_2^{(1)} & 0 \\ | -\frac{3}{2} \rangle & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & 1 - \Delta E_2^{(1)} \end{vmatrix} \\ =_{C_2 \leftrightarrow C_3} & \begin{vmatrix} | \frac{3}{2} \rangle & | -\frac{1}{2} \rangle & | \frac{1}{2} \rangle & | -\frac{3}{2} \rangle \\ | \frac{3}{2} \rangle & 1 - \Delta E_2^{(1)} & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & 0 \\ | \frac{1}{2} \rangle & 0 & 0 & -1 - \Delta E_2^{(1)} & \frac{\eta}{\sqrt{3}} \\ | -\frac{1}{2} \rangle & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & -1 - \Delta E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ | -\frac{3}{2} \rangle & 0 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 1 - \Delta E_2^{(1)} \end{vmatrix} \\ =_{R_2 \leftrightarrow R_3} & \begin{vmatrix} | \frac{3}{2} \rangle & | -\frac{1}{2} \rangle & | \frac{1}{2} \rangle & | -\frac{3}{2} \rangle \\ | \frac{3}{2} \rangle & 1 - \Delta E_2^{(1)} & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & 0 \\ | -\frac{1}{2} \rangle & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & -1 - \Delta E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ | \frac{1}{2} \rangle & 0 & 0 & -1 - \Delta E_2^{(1)} & \frac{\eta}{\sqrt{3}} \\ | -\frac{3}{2} \rangle & 0 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 1 - \Delta E_2^{(1)} \end{vmatrix} \\ =_{C_3 \leftrightarrow C_4} & \begin{vmatrix} | \frac{3}{2} \rangle & | -\frac{1}{2} \rangle & | -\frac{3}{2} \rangle & | \frac{1}{2} \rangle \\ | \frac{3}{2} \rangle & 1 - \Delta E_2^{(1)} & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & 0 \\ | -\frac{1}{2} \rangle & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & -1 - \Delta E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ | \frac{1}{2} \rangle & 0 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & -1 - \Delta E_2^{(1)} \\ | -\frac{3}{2} \rangle & 0 & 0 & 1 - \Delta E_2^{(1)} & \frac{\eta}{\sqrt{3}} \end{vmatrix} \dots \end{aligned}$$

¹ Para facilitar la lectura, se omite el subíndice “CE” en $\Delta E_2^{(1)}$ y $|\psi_2^{(0)}\rangle$ hasta llegar a resultados finales.

$$\begin{aligned}
 & \dots \\
 & \begin{matrix} | \frac{3}{2} \rangle \\ | \frac{1}{2} \rangle \\ | \frac{3}{2} \rangle \\ | \frac{1}{2} \rangle \end{matrix} \begin{matrix} | \frac{3}{2} \rangle \\ | -\frac{1}{2} \rangle \\ | -\frac{3}{2} \rangle \\ | \frac{1}{2} \rangle \end{matrix} \\
 & \begin{matrix} \\ \\ \\ \end{matrix} \left| \begin{matrix} 1 - \Delta E_2^{(1)} & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & 0 \\ \frac{\eta}{\sqrt{3}} & -1 - \Delta E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \Delta E_2^{(1)} & \frac{\eta}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & -1 - \Delta E_2^{(1)} \end{matrix} \right| \\
 & = 0
 \end{aligned}$$

(B-2)

Del subdeterminante superior de (B-2), se obtiene la ecuación:

$$\begin{matrix} | \frac{3}{2} \rangle \\ | -\frac{1}{2} \rangle \end{matrix} \left| \begin{matrix} | \frac{3}{2} \rangle & | -\frac{1}{2} \rangle \\ 1 - \Delta E_2^{(1)} & \frac{\eta}{\sqrt{3}} \\ \frac{\eta}{\sqrt{3}} & -1 - \Delta E_2^{(1)} \end{matrix} \right| = -(1 - \Delta E_2^{(1)})(1 + \Delta E_2^{(1)}) - \frac{\eta^2}{3} = (\Delta E_2^{(1)})^2 - 1 - \frac{\eta^2}{3} = 0$$

cuyas raíces son¹:

$$\Delta E_{2\{\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\}}^{(1)} = \frac{\Delta E_{2\{\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\}}^{(1)}}{3A} = \pm \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}}$$

Por lo tanto, los valores propios que representan el primer par de correcciones a primer orden a la energía E₂ del núcleo debido a una interacción CE son:

$$\Delta E_{2\{\frac{3}{2}\}}^{(1)} = 3A \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \tag{B-3}$$

$$\Delta E_{2\{-\frac{1}{2}\}}^{(1)} = -3A \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \tag{B-4}$$

Como la submatriz inferior de (B-2) es igual a la submatriz superior, de manera totalmente análoga a la anterior:

$$\Delta E_{2\{-\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\}}^{(1)} = \frac{\Delta E_{2\{-\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\}}^{(1)}}{3A} = \pm \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}}$$

con lo que los valores propios que representan el segundo par de correcciones a primer orden a la energía E₂ del núcleo debido a una interacción CE son:

$$\Delta E_{2\{-\frac{3}{2}\}}^{(1)} = 3A \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \tag{B-5}$$

$$\Delta E_{2\{\frac{1}{2}\}}^{(1)} = -3A \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \tag{B-6}$$

¹ El subíndice entre llaves {} se refiere al número m_i del correspondiente estado propio en el Caso Simétrico (p. 46).

Por inspección de (B-3, 4) y (B-5, 6) se puede escribir:

$$\Delta E_{2\left\{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\}CE}^{(1)} = 3A\sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \quad (\text{B-7})$$

$$\Delta E_{2\left\{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\}CE}^{(1)} = -3A\sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \quad (\text{B-8})$$

Esto es, la energía E_2 se desdoble en dos energías, cada una con una degeneración de orden dos. Por lo tanto, la interacción CE sólo levanta parcialmente la degeneración de orden cuatro de la energía E_2 del núcleo.

El sistema asociado al subdeterminante superior de (B-2) es:

$$\begin{matrix} |\frac{3}{2}\rangle \\ |\frac{3}{2}\rangle \\ |-\frac{1}{2}\rangle \end{matrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} \\ \frac{\eta}{\sqrt{3}} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_3 \end{pmatrix} = \Delta E_{\frac{3}{2}}^{(1)} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

el cual representa las ecuaciones:

$$(1 - \Delta E_{\frac{3}{2}}^{(1)})c_1 + \frac{\eta}{\sqrt{3}}c_3 = 0 \tag{B-9-a}$$

$$\frac{\eta}{\sqrt{3}}c_1 + (-1 - \Delta E_{\frac{3}{2}}^{(1)})c_3 = 0 \tag{B-9-b}$$

Sustituyendo $\Delta E_{\frac{3}{2}}^{(1)} = \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}}$ en (B-9-b) se obtiene:

$$c_1 = \frac{\sqrt{3}}{\eta} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right) c_3$$

de manera que:

$$|\Psi_{2\{\frac{3}{2}\}}^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_3 \end{pmatrix} = c_3 \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{\eta} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right) \\ 1 \end{pmatrix}$$

Normalizando a la unidad, esto es, haciendo:

$$\left| \Psi_{2\{\frac{3}{2}\}}^{(0)} \right|^2 = |c_3|^2 \left[\left(\frac{\sqrt{3}}{\eta} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right) \right)^2 + 1 \right] = |c_3|^2 \left[1 + \frac{3}{\eta^2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right)^2 \right] = 1$$

de la última igualdad de esta expresión se obtiene el factor de normalización:

$$c_3 = \frac{\eta}{\sqrt{\eta^2 + 3 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right)^2}}$$

Por lo tanto, el vector propio que es el vector de estado a orden cero correspondiente al valor propio (B-3) es:

$$|\Psi_{2\{\frac{3}{2}\}}^{(0)}\rangle = \frac{\eta}{\sqrt{\eta^2 + 3 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right)^2}} \left[\frac{\sqrt{3}}{\eta} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right]$$

esto es:

$$\boxed{|\Psi_{2\{\frac{3}{2}\}}^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\eta^2 + 3 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right)^2}} \left[\sqrt{3} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right) \left| \frac{3}{2} \right\rangle + \eta \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \right]} \tag{B-10}$$

Sustituyendo $\Delta E'_{2\{-\frac{1}{2}\}}^{(1)} = -\sqrt{1+\frac{\eta^2}{3}}$ en (B-9-a), se obtiene:

$$c_3 = -\frac{\sqrt{3}}{\eta} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right) c_1$$

de manera que:

$$|\psi_{2\{-\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_3 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{\sqrt{3}}{\eta} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right) \end{pmatrix}$$

Nuevamente, haciendo $|\psi_{2\{-\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle^2 = 1$, se obtiene el factor de normalización:

$$c_1 = \frac{\eta}{\sqrt{\eta^2 + 3 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right)^2}}$$

Por lo tanto, el vector propio que es el vector de estado a orden cero correspondiente al valor propio (B-4) es:

$$|\psi_{2\{-\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle = \frac{\eta}{\sqrt{\eta^2 + 3 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right)^2}} \begin{bmatrix} \left(1 - \frac{\sqrt{3}}{\eta} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right) \right) \langle 0 | \\ \langle 1 | \end{bmatrix}$$

esto es:

$$|\psi_{2\{-\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle_{CE} = \frac{1}{\sqrt{\eta^2 + 3 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right)^2}} \left[\eta \left| \frac{3}{2} \right\rangle - \sqrt{3} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right) \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \right] \quad (B-11)$$

Como la submatriz inferior de (B-2) es igual a la submatriz superior, de manera totalmente análoga a la anterior, sustituyendo $\Delta E'_{2\{-\frac{3}{2}\}}^{(1)} = \sqrt{1+\frac{\eta^2}{3}}$ en (B-10) y $\Delta E'_{2\{\frac{1}{2}\}}^{(1)} = -\sqrt{1+\frac{\eta^2}{3}}$ en (B-9-a), se obtienen los vectores propios:

$$|\psi_{2\{-\frac{3}{2}\}}^{(0)}\rangle_{CE} = \frac{1}{\sqrt{\eta^2 + 3 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right)^2}} \left[\sqrt{3} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right) \left| -\frac{3}{2} \right\rangle + \eta \left| \frac{1}{2} \right\rangle \right] \quad (B-12)$$

$$|\psi_{2\{\frac{1}{2}\}}^{(0)}\rangle_{CE} = \frac{1}{\sqrt{\eta^2 + 3 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right)^2}} \left[\eta \left| -\frac{3}{2} \right\rangle - \sqrt{3} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \right) \left| \frac{1}{2} \right\rangle \right] \quad (B-13)$$

que son los vectores de estado a orden cero correspondientes a los valores propios (B-5) y (B-6) respectivamente.

b. CASO PARTICULAR

Por inspección de los valores propios (B-7, 8) y los vectores propios (B-10, 11, 12, 13) obtenidos en el Caso General, se tiene el siguiente caso particular:

i. Caso Simétrico

($\eta = 0$)

$\Delta E_2^{(1)}$	$ \psi_2^{(0)}\rangle$
$\Delta E_{2\{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\}CE}^{(1)} = 3A$	$ \psi_{2\{\frac{3}{2}\}CE}^{(0)}\rangle = \begin{vmatrix} 3 \\ 2 \end{vmatrix}$ $ \psi_{2\{-\frac{3}{2}\}CE}^{(0)}\rangle = \begin{vmatrix} -3 \\ 2 \end{vmatrix}$
$\Delta E_{2\{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}CE}^{(1)} = -3A$	$ \psi_{2\{\frac{1}{2}\}CE}^{(0)}\rangle = \begin{vmatrix} 1 \\ 2 \end{vmatrix}$ $ \psi_{2\{-\frac{1}{2}\}CE}^{(0)}\rangle = \begin{vmatrix} -1 \\ 2 \end{vmatrix}$

(B-14-a,b,c)

(B-15-a,b,c)

**Interacción Dipolar Magnética fuerte y
Cuadripolar Eléctrica débil (DM/ce)**

CAPÍTULO IV

A. APLICACIÓN DE LA TEORÍA DE PERTURBACIÓN

1. Núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$ ($n=1$)
 2. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)
-

B. CÁLCULO DE VALORES Y VECTORES PROPIOS

1. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)
 - a. CASO GENERAL
 - b. DOS CASOS PARTICULARES
 - i. Caso Paralelo
 - ii. Caso Perpendicular y Simétrico
-

En este capítulo se aplica la teoría de perturbación para calcular las correcciones a las energías del núcleo del isótopo ^{57}Fe y se aproximan sus correspondientes vectores de estado, cuando el núcleo está sujeto a una interacción Dipolar Magnética fuerte y Cuadripolar Eléctrica débil (DM/ce).

A. APLICACIÓN DE LA TEORÍA DE PERTURBACIÓN

El hamiltoniano asociado al núcleo sujeto a una interacción DM/ce es [cf. cap. I, (B-1)]:

$$H = H'_0 + W_{\text{CE}} \quad (\text{A-1})$$

donde [cf. cap. II, (A-1)]:

$$H'_0 = H_0 + W_{\text{DM}} \quad (\text{A-2})$$

es el hamiltoniano cuyos valores propios a primer orden $E_n + \Delta E_{n[\text{DM}]}^{(1)}$ y vectores propios a orden cero $|\psi_{n[\text{DM}]}^{(0)}\rangle$ son conocidos por los cálculos del Capítulo II. El operador perturbador que representa la interacción CE es [cf. cap. I, (A-21)]:

$$W_{\text{CE}} = \frac{eQV_{zz}}{4I(2I-1)} \left[3I_z^2 - I^2 + \frac{n}{2}(I_+^2 + I_-^2) \right] \quad (\text{A-3})$$

De los cálculos del Capítulo II, se conoce que la interacción DM levanta totalmente las degeneraciones de las energías E_1 y E_2 , esto es, las energías $E_n + \Delta E_{n[\text{DM}]}^{(1)}$ no son degeneradas. Por lo tanto, se aplica la teoría de perturbación para casos no degenerados descrita en el §B2 del Capítulo I, de manera que los elementos de matriz [cf. cap. I, (B-5)]:

$$\Delta E_{n[\text{ce}]}^{(1)} = \langle \psi_{n[\text{DM}]}^{(0)} | W_{\text{CE}} | \psi_{n[\text{DM}]}^{(0)} \rangle \quad (\text{A-4})$$

son las correcciones a primer orden debido a la interacción Cuadripolar Eléctrica débil (ce).

Las correcciones a primer orden debido a la interacción Dipolar Magnética fuerte y Cuadripolar Eléctrica débil (CE/dm) son:

$$\Delta E_{n[\text{DM/ce}]}^{(1)} = \Delta E_{n[\text{DM}]}^{(1)} + \Delta E_{n[\text{ce}]}^{(1)} \quad (\text{A-5})$$

I. Núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$ ($n=1$)

Los núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$ no tienen momento cuadripolar eléctrico ($eQ = 0$)¹ [cf. cap. I (A-17)], de manera que es nulo el operador (A-3). Por lo tanto, para una interacción DM/ce, los valores y vectores propios de un núcleo de espín $I=\frac{1}{2}$ sólo dependen de la interacción DM y son aquéllos calculados en el §B1 del Capítulo II.

¹ Cohen-Tannoudji (3.1), cap. XI, p. 1314; cap. X, pp. 1046-1047

2. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)

Para núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$, la matriz del operador perturbador W_{CE} es [cf. cap. III, (A-7)]:

$$W_{CE} = \begin{matrix} | \frac{3}{2} \rangle \\ | \frac{1}{2} \rangle \\ | -\frac{1}{2} \rangle \\ | -\frac{3}{2} \rangle \end{matrix} 3A \begin{pmatrix} | \frac{3}{2} \rangle & | \frac{1}{2} \rangle & | -\frac{1}{2} \rangle & | -\frac{3}{2} \rangle \\ \left(\begin{array}{cccc} 1 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} \\ \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & 1 \end{array} \right) \end{pmatrix} \quad (\text{A-6})$$

Por otro lado, para núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ sujetos a una interacción DM, los valores propios a primer orden son [cf. cap. II, (B-12, 13, 14, 15)]:

$$\Delta E_{2\{\frac{3}{2}\}DM}^{(1)} = -3\alpha \quad (\text{A-7-a})$$

$$\Delta E_{2\{\frac{1}{2}\}DM}^{(1)} = -\alpha \quad (\text{A-7-b})$$

$$\Delta E_{2\{-\frac{1}{2}\}DM}^{(1)} = \alpha \quad (\text{A-7-c})$$

$$\Delta E_{2\{-\frac{3}{2}\}DM}^{(1)} = 3\alpha \quad (\text{A-7-d})$$

y los correspondientes vectores propios son: [cf. cap. II, (B-19, 23, 27, 32)]:

$$|\psi_{2\{\frac{3}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \cos^3 \frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \\ \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} \\ \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{3i\phi} \end{pmatrix} \quad (\text{A-8-a})$$

$$|\psi_{2\{\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2 \frac{\theta}{2} [3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \sin\theta e^{-i\phi} \\ 3\cos\theta - 1 \\ \tan \frac{\theta}{2} (3\cos\theta + 1) e^{i\phi} \\ \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} \sin\theta e^{2i\phi} \end{pmatrix} \quad (\text{A-8-b})$$

$$|\psi_{2\{-\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2 \frac{\theta}{2} [3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} \sin\theta e^{-2i\phi} \\ -\tan \frac{\theta}{2} (3\cos\theta + 1) e^{-i\phi} \\ 3\cos\theta - 1 \\ \sqrt{3} \sin\theta e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (\text{A-8-c})$$

$$|\psi_{2\{-\frac{3}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \cos^3 \frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} -\tan^3 \frac{\theta}{2} e^{-3i\phi} \\ \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} \\ -\sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A-8-d})$$

B. CÁLCULO DE VALORES Y VECTORES PROPIOS

 1. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)

a. CASO GENERAL

Sustituyendo (A-6) y (A-8-a) en (A-4)¹:

$$\begin{aligned}
 \Delta E_{2\{\frac{3}{2}\}ce}^{(1)} &= \langle \Psi_{2\{\frac{3}{2}\}DM}^{(0)} | W_{CE} | \Psi_{2\{\frac{3}{2}\}DM}^{(0)} \rangle \\
 &= \cos^3 \frac{\theta}{2} \left(1 \quad \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \quad \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} \quad \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{-3i\phi} \right) 3A \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} \\ \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & 1 \end{pmatrix} \cos^3 \frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \\ \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} \\ \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{3i\phi} \end{pmatrix} \\
 &= 3A \left(\cos^6 \frac{\theta}{2} \right) \left(1 \quad \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \quad \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} \quad \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{-3i\phi} \right) \begin{pmatrix} 1 + \eta \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} \\ -\sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{i\phi} + \frac{\eta}{\sqrt{3}} \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{3i\phi} \\ \frac{\eta}{\sqrt{3}} - \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} \\ \eta \tan \frac{\theta}{2} e^{i\phi} + \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{3i\phi} \end{pmatrix} \\
 &= 3A \left(\cos^6 \frac{\theta}{2} \right) \left(1 + \eta \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} - 3 \tan^2 \frac{\theta}{2} + \eta \tan^4 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} + \eta \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} - 3 \tan^4 \frac{\theta}{2} + \eta \tan^4 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} + \tan^6 \frac{\theta}{2} \right) \\
 &= 3A \left\{ \cos^6 \frac{\theta}{2} \left[1 - 3 \tan^2 \frac{\theta}{2} - 3 \tan^4 \frac{\theta}{2} + \tan^6 \frac{\theta}{2} + \eta \tan^2 \frac{\theta}{2} (1 + \tan^2 \frac{\theta}{2}) (e^{2i\phi} + e^{-2i\phi}) \right] \right\} \\
 &\stackrel{XIII}{=} 3A \left(\cos^6 \frac{\theta}{2} \left\{ 1 - \tan^2 \frac{\theta}{2} \left[3 + 3 \tan^2 \frac{\theta}{2} - \tan^4 \frac{\theta}{2} - 2\eta (1 + \tan^2 \frac{\theta}{2}) \cos 2\phi \right] \right\} \right)
 \end{aligned} \tag{B-1}$$

¹ Los números romanos entre paréntesis se refieren a identidades y desarrollos listados en el §5 del Apéndice.

Sustituyendo (A-6) y (A-8-b) en (A-4):

$$\begin{aligned}
 \Delta E_{2\{\frac{1}{2}\}ce}^{(1)} &= \langle \Psi_{2\{\frac{1}{2}\}DM}^{(0)} | W_{CE} | \Psi_{2\{\frac{1}{2}\}DM}^{(0)} \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}} \left(-\sqrt{3}\sin\theta e^{i\phi} \quad 3\cos\theta - 1 \quad \tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{-i\phi} \quad \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta e^{-2i\phi} \right) X \\
 X \quad 3A \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} \\ \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & 1 \end{pmatrix} & \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}} \begin{pmatrix} -\sqrt{3}\sin\theta e^{-i\phi} \\ 3\cos\theta - 1 \\ \tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{i\phi} \\ \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta e^{2i\phi} \end{pmatrix} \\
 &= \frac{3A}{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]} \left(-\sqrt{3}\sin\theta e^{i\phi} \quad 3\cos\theta - 1 \quad \tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{-i\phi} \quad \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta e^{-2i\phi} \right) \begin{pmatrix} -\sqrt{3}\sin\theta e^{-i\phi} + \frac{\eta}{\sqrt{3}}\tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{i\phi} \\ -(3\cos\theta - 1) + \eta\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta e^{2i\phi} \\ -\eta\sin\theta e^{-i\phi} - \tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{i\phi} \\ \frac{\eta}{\sqrt{3}}(3\cos\theta - 1) + \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta e^{2i\phi} \end{pmatrix} \\
 &= \frac{3A}{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]} \left\{ \begin{aligned} &3\sin^2\theta - \eta\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta(3\cos\theta + 1)e^{2i\phi} - (3\cos\theta - 1)^2 + \eta\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta(3\cos\theta - 1)e^{2i\phi} - \eta\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta(3\cos\theta + 1)e^{-2i\phi} - \\ &-\tan^2\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)^2 + \eta\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta(3\cos\theta - 1)e^{-2i\phi} + 3\tan^2\frac{\theta}{2}\sin^2\theta \end{aligned} \right\} \\
 &= 3A \left\{ \frac{-(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta - (3\cos\theta + 1)^2] + \eta\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta[(3\cos\theta - 1) - (3\cos\theta + 1)]e^{2i\phi} + \eta\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta[(3\cos\theta - 1) - (3\cos\theta + 1)]e^{-2i\phi}}{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]} \right\} \\
 &= 3A \left\{ \frac{-(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta - (3\cos\theta + 1)^2] - 2\eta\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta(e^{2i\phi} + e^{-2i\phi})}{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]} \right\} \\
 &\stackrel{(XIII)}{=} 3A \left\{ \frac{-(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta - (3\cos\theta + 1)^2] - 4\eta\tan\frac{\theta}{2}\sin\theta\cos 2\phi}{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\sin^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\sin^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]} \right\}
 \end{aligned} \tag{B-2}$$

Sustituyendo (A-6) y (A-8-c) en (A-4):

$$\begin{aligned}
 \Delta E_{2\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{(1)ce} &= \langle \Psi_{2\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{(0)} | W_{(CE)} | \Psi_{2\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{(0)} \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\text{sen}^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}} \left(\sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\text{sen}\theta e^{2i\phi} \quad -\tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{i\phi} \quad 3\cos\theta - 1 \quad \sqrt{3}\text{sen}\theta e^{-i\phi} \right) X \\
 X &= 3A \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} \\ \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\text{sen}^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]}} \begin{pmatrix} \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\text{sen}\theta e^{-2i\phi} \\ -\tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{-i\phi} \\ 3\cos\theta - 1 \\ \sqrt{3}\text{sen}\theta e^{i\phi} \end{pmatrix} \\
 &= \frac{3A}{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\text{sen}^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]} \left(\sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\text{sen}\theta e^{2i\phi} \quad -\tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{i\phi} \quad 3\cos\theta - 1 \quad \sqrt{3}\text{sen}\theta e^{-i\phi} \right) \begin{pmatrix} \sqrt{3}\tan\frac{\theta}{2}\text{sen}\theta e^{-2i\phi} + \frac{\eta}{\sqrt{3}}(3\cos\theta - 1) \\ \tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{-i\phi} + \eta\text{sen}\theta e^{i\phi} \\ \eta\tan\frac{\theta}{2}\text{sen}\theta e^{-2i\phi} - (3\cos\theta - 1) \\ -\frac{\eta}{\sqrt{3}}\tan\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)e^{-i\phi} + \sqrt{3}\text{sen}\theta e^{i\phi} \end{pmatrix} \\
 &= \frac{3A}{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\text{sen}^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]} \left\{ 3\tan^2\frac{\theta}{2}\text{sen}^2\theta + \eta\tan\frac{\theta}{2}\text{sen}\theta(3\cos\theta - 1)e^{2i\phi} - \tan^2\frac{\theta}{2}(3\cos\theta + 1)^2 - \eta\tan\frac{\theta}{2}\text{sen}\theta(3\cos\theta + 1)e^{2i\phi} + \right. \\
 &\quad \left. + \eta\tan\frac{\theta}{2}\text{sen}\theta(3\cos\theta - 1)e^{-2i\phi} - (3\cos\theta - 1)^2 - \eta\tan\frac{\theta}{2}\text{sen}\theta(3\cos\theta + 1)e^{-2i\phi} + 3\text{sen}^2\theta \right\} \\
 &= 3A \left\{ \frac{-(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\text{sen}^2\theta - (3\cos\theta + 1)^2] + \eta\tan\frac{\theta}{2}\text{sen}\theta[(3\cos\theta - 1) - (3\cos\theta + 1)]e^{2i\phi} + \eta\tan\frac{\theta}{2}\text{sen}\theta[(3\cos\theta - 1) - (3\cos\theta + 1)]e^{-2i\phi}}{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\text{sen}^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]} \right\} \\
 &= 3A \left\{ \frac{-(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\text{sen}^2\theta - (3\cos\theta + 1)^2] - 2\eta\tan\frac{\theta}{2}\text{sen}\theta(e^{2i\phi} + e^{-2i\phi})}{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\text{sen}^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]} \right\} \\
 &\stackrel{(XIII)}{=} 3A \left\{ \frac{-(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\text{sen}^2\theta - (3\cos\theta + 1)^2] - 4\eta\tan\frac{\theta}{2}\text{sen}\theta\cos 2\phi}{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2\frac{\theta}{2}[3\text{sen}^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2]} \right\}
 \end{aligned}$$

(B-3)

Sustituyendo (A-6) y (A-8-d) en (A-4):

$$\begin{aligned}
 \Delta E_{2\{-\frac{3}{2}\}ce}^{(1)} &= \langle \Psi_{2\{-\frac{3}{2}\}DM}^{(0)} | W_{CE} | \Psi_{2\{-\frac{3}{2}\}DM}^{(0)} \rangle \\
 &= \cos^3 \frac{\theta}{2} \left(-\tan^3 \frac{\theta}{2} e^{3i\phi} \quad \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} \quad -\sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \quad 1 \right) 3A \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} \\ \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \frac{\eta}{\sqrt{3}} & 0 & 1 \end{pmatrix} \cos^3 \frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} -\tan^3 \frac{\theta}{2} e^{-3i\phi} \\ \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} \\ -\sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ 1 \end{pmatrix} \\
 &= 3A \left(\cos^6 \frac{\theta}{2} \right) \left(-\tan^3 \frac{\theta}{2} e^{3i\phi} \quad \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} \quad -\sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \quad 1 \right) \begin{pmatrix} -\tan^3 \frac{\theta}{2} e^{-3i\phi} - \eta \tan \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ -\sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} + \frac{\eta}{\sqrt{3}} \\ -\frac{\eta}{\sqrt{3}} \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{-3i\phi} + \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \eta \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} + 1 \end{pmatrix} \\
 &= 3A \left(\cos^6 \frac{\theta}{2} \right) \left(1 + \eta \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} - 3 \tan^2 \frac{\theta}{2} + \eta \tan^4 \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} + \eta \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} - 3 \tan^4 \frac{\theta}{2} + \eta \tan^4 \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} + \tan^6 \frac{\theta}{2} \right) \\
 &= 3A \left\{ \cos^6 \frac{\theta}{2} \left[1 - 3 \tan^2 \frac{\theta}{2} - 3 \tan^4 \frac{\theta}{2} + \tan^6 \frac{\theta}{2} + \eta \tan^2 \frac{\theta}{2} (1 + \tan^2 \frac{\theta}{2}) (e^{2i\phi} + e^{-2i\phi}) \right] \right\} \\
 &\stackrel{(XIII)}{=} 3A \left(\cos^6 \frac{\theta}{2} \left[1 - \tan^2 \frac{\theta}{2} \left[3 + 3 \tan^2 \frac{\theta}{2} - \tan^4 \frac{\theta}{2} - 2\eta (1 + \tan^2 \frac{\theta}{2}) \cos 2\phi \right] \right] \right)
 \end{aligned}$$

(B-4)

Sustituyendo (A-7) y (B-1, 2, 3, 4) en (A-5), las correcciones a primer orden a la energía E_2 del núcleo debido a una interacción Dipolar Magnética fuerte y Cuadripolar Eléctrica débil (DM/ce) son:

$$\Delta E_{2\{\frac{3}{2}\}DM/ce}^{(1)} = 3 \left[-\alpha + A \left(\cos^6 \frac{\theta}{2} \left\{ 1 - \tan^2 \frac{\theta}{2} \left[3 + 3 \tan^2 \frac{\theta}{2} - \tan^4 \frac{\theta}{2} - 2\eta(1 + \tan^2 \frac{\theta}{2}) \cos 2\phi \right] \right\} \right) \right] \quad (B-5)$$

$$\Delta E_{2\{\frac{1}{2}\}DM/ce}^{(1)} = -\alpha + 3A \left\{ \frac{-(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2 \frac{\theta}{2} \left[3\text{sen}^2\theta - (3\cos\theta + 1)^2 \right] - 4\eta \tan \frac{\theta}{2} \text{sen}\theta \cos 2\phi}{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2 \frac{\theta}{2} \left[3\text{sen}^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2 \right]} \right\} \quad (B-6)$$

$$\Delta E_{2\{-\frac{1}{2}\}DM/ce}^{(1)} = \alpha + 3A \left\{ \frac{-(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2 \frac{\theta}{2} \left[3\text{sen}^2\theta - (3\cos\theta + 1)^2 \right] - 4\eta \tan \frac{\theta}{2} \text{sen}\theta \cos 2\phi}{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2 \frac{\theta}{2} \left[3\text{sen}^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2 \right]} \right\} \quad (B-7)$$

$$\Delta E_{2\{-\frac{3}{2}\}DM/ce}^{(1)} = 3 \left[\alpha + A \left(\cos^6 \frac{\theta}{2} \left\{ 1 - \tan^2 \frac{\theta}{2} \left[3 + 3 \tan^2 \frac{\theta}{2} - \tan^4 \frac{\theta}{2} - 2\eta(1 + \tan^2 \frac{\theta}{2}) \cos 2\phi \right] \right\} \right) \right] \quad (B-8)$$

Aplicando la aproximación (B-7) del Capítulo I, los vectores de estado correspondientes a estos valores propios son los mismos de (A-8), los cuales se pueden escribir [cf. cap. II, (B-20, 24, 28, 33)]:

$$|\Psi_{2\{\frac{3}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \cos^3 \frac{\theta}{2} \left(e^{i\phi} \left| \frac{3}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{2i\phi} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{3i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + \tan^3 \frac{\theta}{2} e^{4i\phi} \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right) \quad (B-9)$$

$$|\Psi_{2\{\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2 \frac{\theta}{2} \left[3\text{sen}^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2 \right]}} \left[-\sqrt{3} \text{sen}\theta e^{i\phi} \left| \frac{3}{2} \right\rangle + (3\cos\theta - 1) e^{2i\phi} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \tan \frac{\theta}{2} (3\cos\theta + 1) e^{3i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} \text{sen}\theta e^{4i\phi} \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right] \quad (B-10)$$

$$|\Psi_{2\{-\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(3\cos\theta - 1)^2 + 3\text{sen}^2\theta + \tan^2 \frac{\theta}{2} \left[3\text{sen}^2\theta + (3\cos\theta + 1)^2 \right]}} \left[\sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} \text{sen}\theta e^{-4i\phi} \left| \frac{3}{2} \right\rangle - \tan \frac{\theta}{2} (3\cos\theta + 1) e^{-3i\phi} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + (3\cos\theta - 1) e^{-2i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \text{sen}\theta e^{-i\phi} \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right] \quad (B-11)$$

$$|\Psi_{2\{-\frac{3}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \cos^3 \frac{\theta}{2} \left(-\tan^3 \frac{\theta}{2} e^{-4i\phi} \left| \frac{3}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \tan^2 \frac{\theta}{2} e^{-3i\phi} \left| \frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{3} \tan \frac{\theta}{2} e^{-2i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + e^{-i\phi} \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right) \quad (B-12)$$

b. DOS CASOS PARTICULARES

Por inspección de los valores propios (B-5, 6, 7, 8) y los correspondientes vectores de estado (B-9, 10, 11, 12) del Caso General, se tienen los siguientes dos casos particulares:

i. Caso Paralelo

$(\theta = 0^\circ; \phi = 0^\circ)$

$\Delta E_1^{(1)}$	$ \Psi_1^{(0)}\rangle$	
$\Delta E_{2\{\frac{3}{2}\}DM/ce}^{(1)} = 3(-\alpha + A)$	$ \Psi_{2\{\frac{3}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \left \frac{3}{2} \right\rangle$	(B-13-a,b)
$\Delta E_{2\{\frac{1}{2}\}DM/ce}^{(1)} = -\alpha - 3A$	$ \Psi_{2\{\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \left \frac{1}{2} \right\rangle$	(B-14-a,b)
$\Delta E_{2\{-\frac{1}{2}\}DM/ce}^{(1)} = \alpha - 3A$	$ \Psi_{2\{-\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \left -\frac{1}{2} \right\rangle$	(B-15-a,b)
$\Delta E_{2\{-\frac{3}{2}\}DM/ce}^{(1)} = 3(\alpha + A)$	$ \Psi_{2\{-\frac{3}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \left -\frac{3}{2} \right\rangle$	(B-16-a,b)

ii. Caso Perpendicular y Simétrico

$(\theta = 90^\circ; \phi = 0^\circ; \eta = 0)$

$\Delta E_1^{(1)}$	$ \Psi_1^{(0)}\rangle$	
$\Delta E_{2\{\frac{3}{2}\}DM/ce}^{(1)} = -3\left(\alpha + \frac{1}{2}A\right)$	$ \Psi_{2\{\frac{3}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\left \frac{3}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \left(\left \frac{1}{2} \right\rangle + \left -\frac{1}{2} \right\rangle \right) + \left -\frac{3}{2} \right\rangle \right]$	(B-17-a,b)
$\Delta E_{2\{\frac{1}{2}\}DM/ce}^{(1)} = -\alpha + \frac{3}{2}A$	$ \Psi_{2\{\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[-\sqrt{3} \left(\left \frac{3}{2} \right\rangle - \left -\frac{3}{2} \right\rangle \right) - \left \frac{1}{2} \right\rangle + \left -\frac{1}{2} \right\rangle \right]$	(B-18-a,b)
$\Delta E_{2\{-\frac{1}{2}\}DM/ce}^{(1)} = \alpha + \frac{3}{2}A$	$ \Psi_{2\{-\frac{1}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\sqrt{3} \left(\left \frac{3}{2} \right\rangle + \left -\frac{3}{2} \right\rangle \right) - \left \frac{1}{2} \right\rangle - \left -\frac{1}{2} \right\rangle \right]$	(B-19-a,b)
$\Delta E_{2\{-\frac{3}{2}\}DM/ce}^{(1)} = 3\left(\alpha - \frac{1}{2}A\right)$	$ \Psi_{2\{-\frac{3}{2}\}DM}^{(0)}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[-\left \frac{3}{2} \right\rangle + \sqrt{3} \left(\left \frac{1}{2} \right\rangle - \left -\frac{1}{2} \right\rangle \right) + \left -\frac{3}{2} \right\rangle \right]$	(B-20-a,b)

**Interacción Cuadripolar Eléctrica fuerte y
Dipolar Magnética débil (CE/dm)**

CAPÍTULO V

A. APLICACIÓN DE LA TEORÍA DE PERTURBACIÓN

1. Núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$ ($n=1$)
 2. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)
-

B. CÁLCULO DE VALORES Y VECTORES PROPIOS

1. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)
 - a. CASO GENERAL
 - b. DOS CASOS PARTICULARES
 - i. Caso Paralelo
 - ii. Caso Perpendicular
-

En este capítulo se aplica la teoría de perturbación para calcular las correcciones a las energías del núcleo del isótopo ^{57}Fe y sus correspondientes vectores de estado, cuando el núcleo está sujeto a una interacción Cuadripolar Eléctrica fuerte y Dipolar Magnética débil (CE/dm).

A. APLICACIÓN DE LA TEORÍA DE PERTURBACIÓN

El hamiltoniano asociado al núcleo sujeto a una interacción CE/dm es [cf. cap. I, (B-1)]:

$$H = H'_0 + W_{DM} \quad (A-1)$$

donde [cf. cap. III, (A-1)]:

$$H'_0 = H_0 + W_{CE} \quad (A-2)$$

es el hamiltoniano cuyos valores propios a primer orden $E_n + \Delta E_{n[CE]}^{(1)}$ y vectores propios a orden cero $|\psi_{n[CE]}^{(0)}\rangle$ son conocidos por los cálculos del Capítulo III. El operador perturbador que representa la interacción DM es [cf. cap. I, (A-7)]:

$$W_{DM} = -g\mu_N B(\text{sen}\theta \text{cos}\phi I_x + \text{sen}\theta \text{sen}\phi I_y + \text{cos}\theta I_z) \quad (A-3)$$

En el §B1 del Capítulo III, se estableció que la interacción CE sólo levanta parcialmente las degeneraciones de la energía E_2 , produciendo dos degeneraciones de orden dos de las energías $E_n + \Delta E_{n[CE]}^{(1)}$. Por lo tanto, se aplica la teoría de perturbación para casos degenerados descrita en el §B1 del Capítulo I. Esto implica resolver para cada degeneración la ecuación de valores propios [cf. cap. I, (B-2)]:

$$W_{DM} |\psi_{n[CE]}^{(0)}\rangle = \Delta E_{n[dm]}^{(1)} |\psi_{n[CE]}^{(0)}\rangle \quad (A-4)$$

donde los valores propios $\Delta E_{n[dm]}^{(1)}$ son las correcciones a primer orden debido a la interacción Dipolar Magnética débil (dm), y los vectores propios $|\psi_{n[CE]}^{(0)}\rangle$ son los correspondientes vectores de estado a orden cero.

Las correcciones a primer orden debido a la interacción Cuadripolar Eléctrica fuerte y Dipolar Magnética débil (CE/dm) son:

$$\Delta E_{n[CE/dm]}^{(1)} = \Delta E_{n[CE]}^{(1)} + \Delta E_{n[dm]}^{(1)} \quad (A-5)$$

1. Núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$ ($n=1$)

Los núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$ no tienen momento cuadrupolar eléctrico ($eQ = 0$)¹ [cf. cap. I (A-17)], de manera que es nulo el operador que representa la interacción CE [cap. I, (A-21)]:

$$W_{CE} = \frac{eQV_{zz}}{4I(2I-1)} \left[3I_z^2 - I^2 + \frac{\eta}{2}(I_+^2 + I_-^2) \right] \quad (\text{A-6})$$

Por lo tanto, para una interacción CE/dm, los valores y vectores propios de un núcleo de espín $I=\frac{1}{2}$ sólo dependen de la interacción Dipolar Magnética débil (dm) y son aquéllos calculados en el §B1 del Capítulo II.

2. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)

De (B-7, 8) del Capítulo III, para núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$, los valores propios de la interacción CE son:

$$\Delta E_{2\{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\}CE}^{(1)} = 3A \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \quad (\text{A-7-a})$$

$$\Delta E_{2\{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}CE}^{(1)} = -3A \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}} \quad (\text{A-7-b})$$

Puesto que [cf. cap. I, (A-20)]:

$$0 \leq \eta \leq 1 \quad (\text{A-8})$$

los valores (A-7) sólo difieren por un factor de $\frac{2}{\sqrt{3}} \cong 1.16$ entre los casos extremos de $\eta = 0$ y $\eta = 1$. Por lo tanto, los cálculos de la interacción CE/dm se pueden hacer de manera aproximada, suponiendo $\eta = 0$, esto es, empleando los resultados (B-14,15) del Caso Simétrico del Capítulo III, en lugar de los resultados del Caso General del mismo capítulo, cuyos vectores propios son más complicados.

Primera degeneración

De (B-14) del Capítulo III, se tiene que la corrección:

$$\Delta E_{2\{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\}CE}^{(1)} = 3A \quad (\text{A-9})$$

corresponde una degeneración de orden dos con los estados propios $|\frac{3}{2}\rangle$ y $|-\frac{3}{2}\rangle$. Por lo tanto, es necesario expresar la matriz del operador W_{DM} y el vector de estado $|\psi_{2\{CE\}}^{(0)}\rangle$ en la base de vectores $\{|\frac{3}{2}\rangle, |-\frac{3}{2}\rangle\}$.

¹ Cohen-Tannoudji (3.1), cap. XI, p. 1314; cap. X, pp. 1046-1047

El vector de estado es [cf. cap. I, (B-3)]:

$$|\Psi_{2[CE]}^{(0)}\rangle = c_1|\frac{3}{2}\rangle + c_4|-\frac{3}{2}\rangle \quad (A-10)$$

donde $|\frac{3}{2}\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $|-\frac{3}{2}\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Para núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$, la matriz del operador perturbador W_{DM} es [cf. cap. II, (A-11)]:

$$W_{DM} \approx \begin{matrix} |\frac{3}{2}\rangle \\ |\frac{1}{2}\rangle \\ |-\frac{1}{2}\rangle \\ |-\frac{3}{2}\rangle \end{matrix} \left[-\alpha \begin{pmatrix} \begin{matrix} |\frac{3}{2}\rangle & |\frac{1}{2}\rangle & |-\frac{1}{2}\rangle & |-\frac{3}{2}\rangle \\ 3a & \sqrt{3}be^{-i\phi} & 0 & 0 \\ \sqrt{3}be^{i\phi} & a & 2be^{-i\phi} & 0 \\ 0 & 2be^{i\phi} & -a & \sqrt{3}be^{-i\phi} \\ 0 & 0 & \sqrt{3}be^{i\phi} & -3a \end{matrix} \end{pmatrix} \right] \quad (A-11)$$

de manera que la matriz del operador W_{DM} en la base $\{|\frac{3}{2}\rangle, |-\frac{3}{2}\rangle\}$ es:

$$W_{DM} = \begin{matrix} |\frac{3}{2}\rangle & |-\frac{3}{2}\rangle \\ |-\frac{3}{2}\rangle \end{matrix} \begin{pmatrix} -3\alpha a & 0 \\ 0 & 3\alpha a \end{pmatrix} \quad (A-12)$$

Segunda degeneración

De (B-15) del Capítulo III, se tiene que la corrección:

$$\Delta E_{2\{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}CE}^{(1)} = -3A \quad (A-13)$$

corresponde una degeneración de orden dos con los estados propios $|\frac{1}{2}\rangle$ y $|-\frac{1}{2}\rangle$. Por lo tanto, es necesario expresar la matriz del operador W_{DM} y el vector de estado $|\Psi_{2[CE]}^{(0)}\rangle$ en la base de vectores $\{|\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}\rangle\}$.

El vector de estado es [cf. cap. I, (B-3)]:

$$|\Psi_{2[CE]}^{(0)}\rangle = c_2|\frac{1}{2}\rangle + c_3|-\frac{1}{2}\rangle \quad (A-14)$$

donde $|\frac{1}{2}\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $|-\frac{1}{2}\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

De (A-11), se tiene que la matriz del operador W_{DM} en la base $\{|\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}\rangle\}$ es:

$$W_{DM} = \begin{matrix} |\frac{1}{2}\rangle & |-\frac{1}{2}\rangle \\ |-\frac{1}{2}\rangle \end{matrix} \begin{pmatrix} -\alpha a & -2\alpha be^{-i\phi} \\ -2\alpha be^{i\phi} & \alpha a \end{pmatrix} \quad (A-15)$$

B. CÁLCULO DE VALORES Y VECTORES PROPIOS

1. Núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$ ($n=2$)

a. CASO GENERAL

Primera degeneración

Sustituyendo (A-10, 12) en (A-4), [cf. cap. I, (B-4)]:

$$\begin{pmatrix} -3\alpha a & 0 \\ 0 & 3\alpha a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_4 \end{pmatrix} = \Delta E_{2\{dm\}}^{(1)} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_4 \end{pmatrix} \tag{B-1}$$

de donde es inmediato que las correcciones a primer orden a la energía E_2 del núcleo debido a la interacción Dipolar Magnética débil (dm) son¹:

$$\Delta E_{2\{\mp\frac{3}{2}\}dm}^{(1)} = \pm 3\alpha a = \pm 3\alpha \cos\theta \tag{B-2, 3}$$

Sustituyendo (A-9, 13) y (B-2, 3) en (A-5), se tiene que el primer par de correcciones a primer orden a la energía E_2 del núcleo debido a la interacción Cuadrupolar Eléctrica fuerte y Dipolar Magnética débil (CE/dm) son:

$$\boxed{\Delta E_{2\{-\frac{3}{2}\}CE/dm}^{(1)} = 3(A + \alpha \cos\theta)} \tag{B-4}$$

$$\boxed{\Delta E_{2\{\frac{3}{2}\}CE/dm}^{(1)} = 3(A - \alpha \cos\theta)} \tag{B-5}$$

De (B-1) también es inmediato que el vector propio o de estado (trivialmente normalizado) correspondiente al valor propio (B-2) es:

$$|\Psi_{2\{-\frac{3}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

esto es:

$$\boxed{|\Psi_{2\{-\frac{3}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \left| -\frac{3}{2} \right\rangle} \tag{B-6}$$

y que el vector propio o de estado (trivialmente normalizado) correspondiente al valor propio (B-3) es:

$$|\Psi_{2\{\frac{3}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

esto es:

$$\boxed{|\Psi_{2\{\frac{3}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \left| \frac{3}{2} \right\rangle} \tag{B-7}$$

¹ El subíndice entre llaves { } se refiere al número m_I del correspondiente estado propio en el Caso Paralelo (p. 67).

Segunda degeneración

Sustituyendo (A-14, 15) en (A-4), [cf. cap. I, (B-4)]:

$$\begin{pmatrix} -\alpha a & -2\alpha b e^{-i\phi} \\ -2\alpha b e^{i\phi} & \alpha a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \Delta E_{2[dm]}^{(1)} \begin{pmatrix} c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} \quad (B-8)$$

Este sistema de ecuaciones tiene solución no trivial si su determinante es igual a cero, esto es, si

$$\begin{vmatrix} -(\alpha a + \Delta E_{2[dm]}^{(1)}) & -2\alpha b e^{-i\phi} \\ -2\alpha b e^{i\phi} & \alpha a - \Delta E_{2[dm]}^{(1)} \end{vmatrix} \\ = -(\alpha a + \Delta E_{2[dm]}^{(1)})(\alpha a - \Delta E_{2[dm]}^{(1)}) - (2\alpha b)^2 = (\Delta E_{2[dm]}^{(1)})^2 - [(\alpha a)^2 + (2\alpha b)^2] \\ = 0$$

Las raíces de esta ecuación son:

$$\Delta E_{2\{\mp\frac{1}{2}\};dm}^{(1)} = \pm \sqrt{(\alpha a)^2 + (2\alpha b)^2} = \pm \alpha \sqrt{\cos^2 \theta + 4 \sin^2 \theta} \stackrel{(IV)}{=} \pm \alpha \sqrt{1 + 3 \sin^2 \theta} \quad (B-9, 10)$$

Sustituyendo (A-9, 13) y (B-9, 10) en (A-5), se tiene que el segundo par de correcciones a primer orden a la energía E_2 del núcleo debido a la interacción Cuadrupolar Eléctrica fuerte y Dipolar Magnética débil (CE/dm) son:

$\Delta E_{2\{-\frac{1}{2}\};CE/dm}^{(1)} = -3A + \alpha \sqrt{1 + 3 \sin^2 \theta}$	(B-11)
$\Delta E_{2\{\frac{1}{2}\};CE/dm}^{(1)} = -3A - \alpha \sqrt{1 + 3 \sin^2 \theta}$	(B-12)

El sistema (B-8) representa las ecuaciones:

$$(-\alpha \cos \theta - \Delta E_{2\{dm\}}^{(1)})c_2 - 2\alpha \operatorname{sen} \theta e^{-i\phi} c_3 = 0 \quad (\text{B-13-a})$$

$$-2\alpha \operatorname{sen} \theta e^{i\phi} c_2 + (\alpha \cos \theta - \Delta E_{2\{dm\}}^{(1)})c_3 = 0 \quad (\text{B-13-b})$$

Sustituyendo el valor propio $\Delta E_{2\{-\frac{1}{2}\}dm}^{(1)} = \alpha\sqrt{1+3\operatorname{sen}^2\theta}$ en (B-13-a):

$$c_3 = -\left(\frac{\sqrt{1+3\operatorname{sen}^2\theta} + \cos\theta}{2\operatorname{sen}\theta}\right)e^{i\phi}c_2$$

de manera que:

$$|\Psi_{2\{-\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -\left(\frac{\sqrt{1+3\operatorname{sen}^2\theta} + \cos\theta}{2\operatorname{sen}\theta}\right)e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

Normalizando a la unidad, esto es, haciendo:

$$\begin{aligned} \left| \Psi_{2\{-\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(0)} \right|^2 &= |c_2|^2 \left(1 - \left(\frac{\sqrt{1+3\operatorname{sen}^2\theta} + \cos\theta}{2\operatorname{sen}\theta} \right) e^{-i\phi} \right) \left(\left(\frac{\sqrt{1+3\operatorname{sen}^2\theta} + \cos\theta}{2\operatorname{sen}\theta} \right) e^{i\phi} \right) \\ &= |c_2|^2 \left(1 + \frac{(\sqrt{1+3\operatorname{sen}^2\theta} + \cos\theta)^2}{4\operatorname{sen}^2\theta} \right) \\ &= 1 \end{aligned}$$

de la última igualdad de esta expresión se obtiene el factor de normalización:

$$c_2 = \frac{2\operatorname{sen}\theta}{\sqrt{4\operatorname{sen}^2\theta + (\sqrt{1+3\operatorname{sen}^2\theta} + \cos\theta)^2}}$$

Por lo tanto, el vector propio que es el vector de estado a orden cero correspondiente al valor propio (B-9) es:

$$|\Psi_{2\{-\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \frac{2\operatorname{sen}\theta}{\sqrt{4\operatorname{sen}^2\theta + (\sqrt{1+3\operatorname{sen}^2\theta} + \cos\theta)^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \left[\frac{\sqrt{1+3\operatorname{sen}^2\theta} + \cos\theta}{\sqrt{4\operatorname{sen}^2\theta + (\sqrt{1+3\operatorname{sen}^2\theta} + \cos\theta)^2}} \right] e^{i\phi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

esto es:

$$|\Psi_{2\{-\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \frac{2\operatorname{sen}\theta}{\sqrt{4\operatorname{sen}^2\theta + (\sqrt{1+3\operatorname{sen}^2\theta} + \cos\theta)^2}} \left| \frac{1}{2} \right\rangle - \left[\frac{\sqrt{1+3\operatorname{sen}^2\theta} + \cos\theta}{\sqrt{4\operatorname{sen}^2\theta + (\sqrt{1+3\operatorname{sen}^2\theta} + \cos\theta)^2}} \right] e^{i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{B-14})$$

Sustituyendo el valor propio $\Delta E_{2\{\frac{1}{2}\}dm}^{(1)} = -\alpha\sqrt{1+3\text{sen}^2\theta}$ en (B-13-b), se tiene:

$$c_2 = \left(\frac{\sqrt{1+3\text{sen}^2\theta} + \cos\theta}{2\text{sen}\theta} \right) e^{-i\phi} c_3$$

de manera que:

$$|\Psi_{2\{\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = c_3 \begin{pmatrix} \left(\frac{\sqrt{1+3\text{sen}^2\theta} + \cos\theta}{2\text{sen}\theta} \right) e^{-i\phi} \\ 1 \end{pmatrix}$$

Nuevamente, haciendo $|\Psi_{2\{\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle^2 = 1$ se obtiene el factor de normalización:

$$c_3 = \frac{2\text{sen}\theta}{\sqrt{4\text{sen}^2\theta + (\sqrt{1+3\text{sen}^2\theta} + \cos\theta)^2}}$$

Por lo tanto, el vector propio que es el vector de estado a orden cero correspondiente al valor propio (B-10) es:

$$|\Psi_{2\{\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \left[\frac{\sqrt{1+3\text{sen}^2\theta} + \cos\theta}{\sqrt{4\text{sen}^2\theta + (\sqrt{1+3\text{sen}^2\theta} + \cos\theta)^2}} \right] e^{-i\phi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{2\text{sen}\theta}{\sqrt{4\text{sen}^2\theta + (\sqrt{1+3\text{sen}^2\theta} + \cos\theta)^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

esto es,

$$|\Psi_{2\{\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \left[\frac{\sqrt{1+3\text{sen}^2\theta} + \cos\theta}{\sqrt{4\text{sen}^2\theta + (\sqrt{1+3\text{sen}^2\theta} + \cos\theta)^2}} \right] e^{-i\phi} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{2\text{sen}\theta}{\sqrt{4\text{sen}^2\theta + (\sqrt{1+3\text{sen}^2\theta} + \cos\theta)^2}} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{B-15})$$

Nota:

Los vectores propios (B-14, 15) se pueden simplificar haciendo:

$$N = \sqrt{1 + 3\text{sen}^2 \theta} \quad (\text{B-16})$$

Sustituyendo (B-16) en [cf. primer coeficiente de (B-14) y segundo coeficiente de (B-15)]¹:

$$\begin{aligned} & \frac{2\text{sen}\theta}{\sqrt{4\text{sen}^2\theta + (\sqrt{1 + 3\text{sen}^2\theta} + \cos\theta)^2}} \\ &= \frac{\sqrt{4\text{sen}^2\theta}}{\sqrt{4\text{sen}^2\theta + (N + \cos\theta)^2}} = \frac{\sqrt{\text{sen}^2\theta + 3\text{sen}^2\theta}}{\sqrt{4\text{sen}^2\theta + N^2 + 2N\cos\theta + \cos^2\theta}} \stackrel{(\text{IV})}{=} \frac{\sqrt{1 + 3\text{sen}^2\theta - \cos^2\theta}}{\sqrt{1 + 3\text{sen}^2\theta + N^2 + 2N\cos\theta}} = \frac{\sqrt{N^2 - \cos^2\theta}}{\sqrt{2N(N + \cos\theta)}} = \frac{\sqrt{N - \cos\theta}\sqrt{N + \cos\theta}}{\sqrt{2N}\sqrt{N + \cos\theta}} = \frac{\sqrt{N - \cos\theta}}{\sqrt{2N}} \end{aligned}$$

y, por pasos similares, sustituyendo (B-16) en [cf. segundo coeficiente de (B-14) y primer coeficiente de (B-15)]:

$$\frac{\sqrt{1 + 3\text{sen}^2\theta} + \cos\theta}{\sqrt{4\text{sen}^2\theta + (\sqrt{1 + 3\text{sen}^2\theta} + \cos\theta)^2}} = \frac{\sqrt{N + \cos\theta}}{\sqrt{2N}}$$

Definiendo:

$$\text{sen}K := \frac{\sqrt{N - \cos\theta}}{\sqrt{2N}} \quad \text{y} \quad \text{cos}K := \frac{\sqrt{N + \cos\theta}}{\sqrt{2N}}$$

los vectores propios (B-14, 15) se pueden escribir:

$$|\psi_{2\{-\frac{1}{2}\}\text{CE/dm}}^{(0)}\rangle = \text{sen}K \left| \frac{1}{2} \right\rangle - \text{cos}K e^{i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{B-17})$$

$$|\psi_{2\{\frac{1}{2}\}\text{CE/dm}}^{(0)}\rangle = \text{cos}K e^{-i\phi} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \text{sen}K \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{B-18})$$

¹ Los números romanos entre paréntesis se refieren a identidades y desarrollos listados en el §5 del Apéndice.

b. DOS CASOS PARTICULARES

Por inspección de los valores propios (B-4, 5) y (B-11, 12) y los correspondientes vectores propios (B-6, 7) y (B-14, 15) obtenidos en el Caso General, se tienen los siguientes dos casos particulares:

i. Caso Paralelo
 ($\theta = 0^\circ$; $\phi = 0^\circ$)

$\Delta E_2^{(1)}$	$ \psi_2^{(0)}\rangle$	
$\Delta E_{2\{\frac{3}{2}\}CE/dm}^{(1)} = 3(A - \alpha)$	$ \psi_{2\{\frac{3}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \left \frac{3}{2} \right\rangle$	(B-19-a,b)
$\Delta E_{2\{\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(1)} = -3A - \alpha$	$ \psi_{2\{\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \left \frac{1}{2} \right\rangle$	(B-20-a,b)
$\Delta E_{2\{-\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(1)} = -3A + \alpha$	$ \psi_{2\{-\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = -\left \frac{1}{2} \right\rangle$	(B-21-a,b)
$\Delta E_{2\{-\frac{3}{2}\}CE/dm}^{(1)} = 3(A + \alpha)$	$ \psi_{2\{-\frac{3}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = -\left \frac{3}{2} \right\rangle$	(B-22-a,b)

ii. Caso Perpendicular
 ($\theta = 90^\circ$; $\phi = 0^\circ$)

$\Delta E_2^{(1)}$	$ \psi_2^{(0)}\rangle$	
$\Delta E_{2\{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\}CE/dm}^{(1)} = 3A$	$ \psi_{2\{\frac{3}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \left \frac{3}{2} \right\rangle$ $ \psi_{2\{-\frac{3}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = -\left \frac{3}{2} \right\rangle$	(B-23-a,b,c)
$\Delta E_{2\{\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(1)} = -3A - 2\alpha$	$ \psi_{2\{\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left \frac{1}{2} \right\rangle + \left -\frac{1}{2} \right\rangle \right)$	(B-24-a,b)
$\Delta E_{2\{-\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(1)} = -3A + 2\alpha$	$ \psi_{2\{-\frac{1}{2}\}CE/dm}^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left \frac{1}{2} \right\rangle - \left -\frac{1}{2} \right\rangle \right)$	(B-25-a,b)

Simulación computacional

CAPÍTULO VI

A. CONSIDERACIONES FÍSICAS Y NUMÉRICAS

1. Interacciones magnéticas
 - a. Interacción Dipolar Magnética (DM)
 - b. Interacción Dipolar Magnética fuerte y Cuadripolar Eléctrica débil (DM/ce)
 2. Interacciones eléctricas
 - a. Interacción Cuadripolar Eléctrica (CE)
 - b. Interacción Cuadripolar Eléctrica fuerte y Dipolar Magnética débil (CE/dm)
-

B. POSIBLES EXTENSIONES

C. CONCLUSIÓN

En este capítulo se describen las consideraciones fundamentales físicas y numéricas de la simulación computacional de las interacciones DM, CE, DM/ce y CE/dm basada en los cálculos de esta tesis y se proponen posibles extensiones de la simulación.

El programa *Eigenerador* es un simulador computacional de las interacciones DM, CE, DM/ce y CE/dm, basado en los cálculos de esta tesis y compilado en *Visual Basic Versión 3.0*. La simulación es para el isótopo ^{57}Fe , pero el programa contempla la incorporación de posibles extensiones que abarcan la mayoría de los isótopos Mössbauer. El simulador incluye pantallas de ayuda y una Guía Rápida para el usuario.

El diseño de la simulación de *Eigenerador* está fundamentado en consideraciones físicas y numéricas que resumen los principales resultados de los cálculos de los Capítulos II-V

A. CONSIDERACIONES FÍSICAS Y NUMÉRICAS

1. Interacciones magnéticas (Ver Tabla 1)

a. INTERACCIÓN DIPOLAR MAGNÉTICA (DM)

- La interacción DM levanta totalmente las degeneraciones de la energía E_2 (de orden cuatro con vectores propios $|\frac{3}{2}\rangle$, $|\frac{1}{2}\rangle$, $|\frac{-1}{2}\rangle$ y $|\frac{-3}{2}\rangle$), y de la energía E_1 (de orden dos con vectores propios $|\frac{1}{2}\rangle$ y $|\frac{-1}{2}\rangle$).
- Si $\theta = 0^\circ$, los vectores de estado $|\psi^{(0)}\rangle$ son combinaciones lineales triviales de los vectores de los estados propios de E_2 y E_1 . De no ser así, las combinaciones lineales son no triviales con coeficientes reales (si $\phi = 0^\circ$) o complejos (si $\phi \neq 0^\circ$).

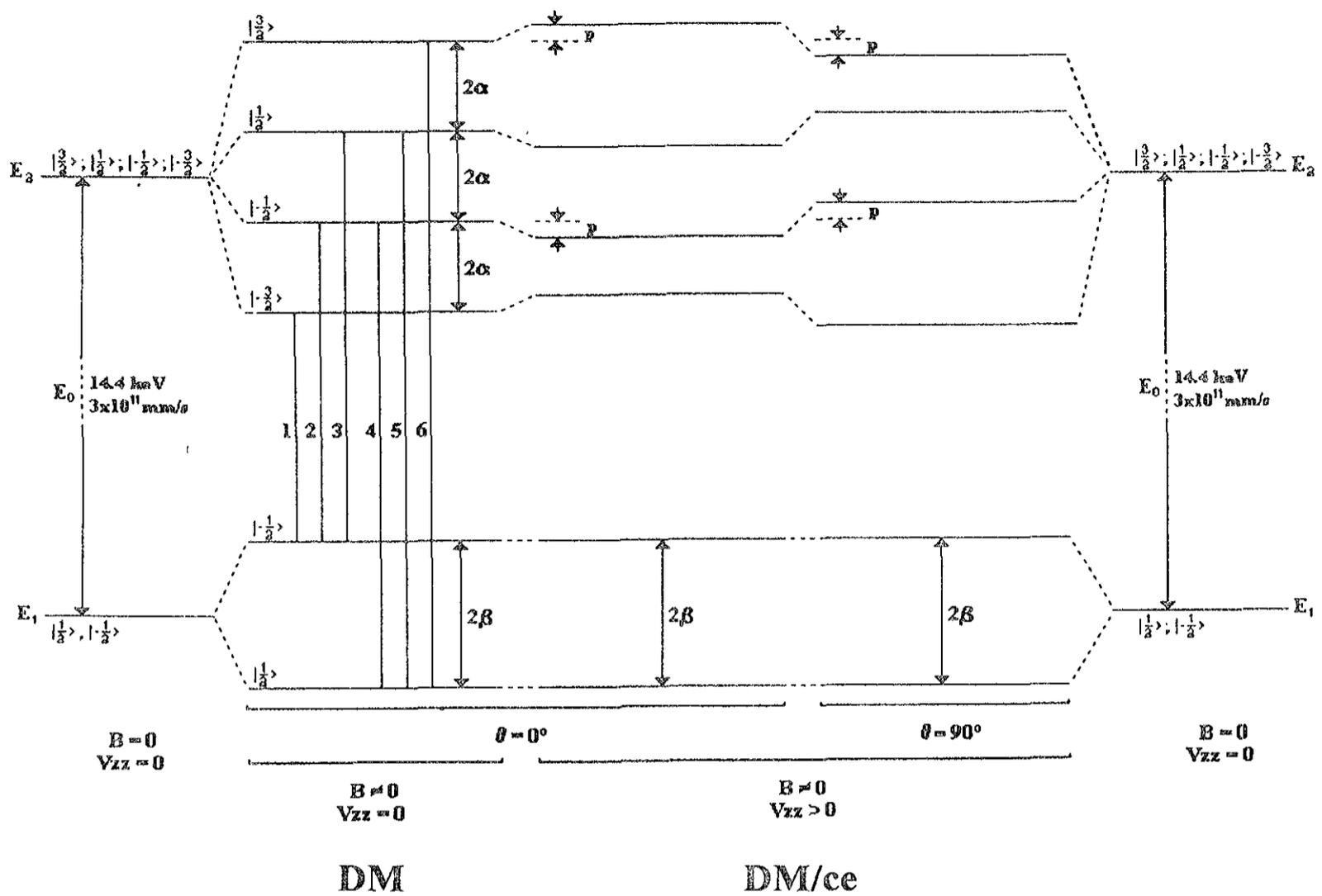
Los vectores de estado son función de los ángulos θ y ϕ , que especifican la orientación del campo magnético B con respecto al eje z .

- La aplicación de las reglas de selección descritas en el §A4 del Capítulo I indica que, de ocho transiciones posibles, sólo se permiten seis.
- Las correcciones $\Delta E^{(1)}$ no son función de los ángulos θ y ϕ . Por lo tanto, el comportamiento de los niveles de energía es independiente de la orientación del campo magnético.
- La diferencia 2α es la misma entre los cuatro niveles de energía excitados. La diferencia 2β entre los dos niveles de energía base es mayor que la diferencia 2α entre niveles de energía excitados.

b. INTERACCIÓN DIPOLAR MAGNÉTICA FUERTE Y CUADRIPOLO ELÉCTRICA DÉBIL (DM/ce)

- La interacción DM/ce mantiene totalmente levantadas las degeneraciones de las energías E_2 y E_1 .
- Los vectores de estado $|\psi^{(0)}\rangle$ son, en aproximación a orden cero, los mismos de la interacción DM (ver el §B2 del Capítulo I).
- Las correcciones $\Delta E^{(1)}$ a las energías base son las mismas de la interacción DM. Las correcciones a las energías excitadas son función de los ángulos θ y ϕ , de la magnitud del campo magnético B , del parámetro de asimetría η , y de la componente en z del gradiente del campo eléctrico V_{zz} .
- Cuando $V_{zz} > 0$ y $\theta = 0^\circ$, la diferencia entre los dos niveles excitados superiores es mayor que la diferencia entre los dos niveles excitados inferiores. Esto se invierte cuando $\theta \rightarrow 90^\circ$. El parámetro p muestra este comportamiento, comparando los niveles de energía de la interacción DM/ce con los de la interacción DM.
- El cambio de signo del gradiente del campo eléctrico V_{zz} invierte el comportamiento de las energías excitadas.

TABLA 1
INTERACCIONES MAGNÉTICAS



INTERACCIÓN DIPOLAR MAGNÉTICA (DM)

Caso General		Caso Paralelo $\theta = 0^\circ; \phi = 0^\circ$	Caso Perpendicular $\theta = 90^\circ; \phi = 0^\circ$
I	$\Delta E^{(1)}$	$\Delta E^{(1)}$	$\Delta E^{(1)}$
$3/2$	$\mp 3\alpha$	$\mp 3\alpha$	$\mp 3\alpha$
$1/2$	$\mp \alpha$	$\mp \alpha$	$\mp \alpha$
$1/2$	$\mp \beta$	$\mp \beta$	$\mp \beta$

INTERACCIÓN DIPOLAR MAGNÉTICA FUERTE Y CUADRIPOLO ELÉCTRICA DÉBIL (DM/ce)

Caso General		Caso Paralelo $\theta = 0^\circ; \phi = 0^\circ$	Caso Perpendicular y Simétrico $\theta = 90^\circ; \phi = 0^\circ, \eta = 0$
I	$\Delta E^{(1)}$	$\Delta E^{(1)}$	$\Delta E^{(1)}$
$3/2$	$3 \left[\mp \alpha + A \left(\cos^6 \frac{\theta}{2} \left[1 - \tan^2 \frac{\theta}{2} \left[3 + 3 \tan^2 \frac{\theta}{2} - \tan^4 \frac{\theta}{2} - 2\eta(1 + \tan^2 \frac{\theta}{2}) \cos 2\phi \right] \right) \right]$	$3(\mp \alpha + A)$	$\mp 3(\alpha \pm \frac{1}{2} A)$
$1/2$	$\mp \beta$	$\mp \beta$	$\mp \beta$

2. Interacciones eléctricas (Ver Tabla 2)

a. INTERACCIÓN CUADRIPOLOAR ELÉCTRICA (CE)

- La interacción CE sólo levanta parcialmente la degeneración de la energía E_2 (de orden cuatro con vectores propios $|\frac{3}{2}\rangle$, $|\frac{1}{2}\rangle$, $|\frac{-1}{2}\rangle$ y $|\frac{-3}{2}\rangle$), produciendo dos degeneraciones de orden dos.
- La interacción CE no afecta la energía E_1 , la cual permanece degenerada con vectores propios $|\frac{1}{2}\rangle$ y $|\frac{-1}{2}\rangle$.
- Si $\eta = 0$, los vectores de estado $|\psi^{(0)}\rangle$ son combinaciones lineales triviales de los vectores de los estados propios de E_2 . De no ser así, las combinaciones lineales son no triviales con coeficientes reales.

Los vectores de estado sólo dependen de η .

- La aplicación de las reglas de selección descritas en el §A4 del Capítulo I indica que se permiten las dos transiciones posibles
- Las correcciones $\Delta E^{(1)}$ a las energías excitadas son función del parámetro de asimetría η y de la componente en z del gradiente del campo eléctrico V_{zz} . La diferencia entre los dos niveles de energía del estado excitado es $6A$. Cuando $\eta = 1$, esta diferencia aumenta por un factor máximo de $\frac{2}{\sqrt{3}} \cong 1.16$.
- El cambio de signo del gradiente del campo eléctrico V_{zz} invierte los niveles de energía excitados.

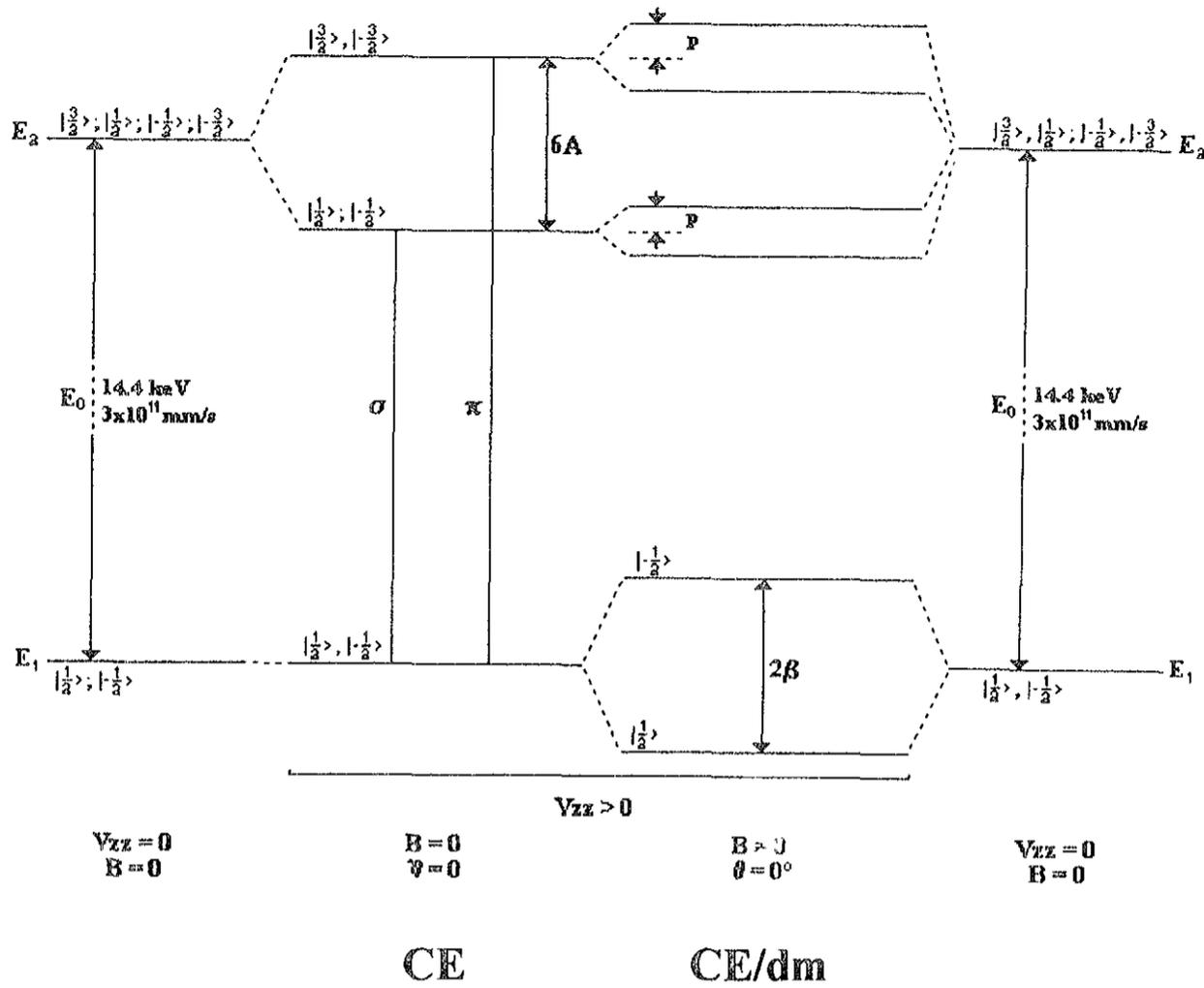
b. **INTERACCIÓN CUADRIPOlar ELÉCTRICA FUERTE Y DIPOLAR MAGNÉTICA DÉBIL (CE/dm)**

- La interacción CE/dm levanta totalmente las degeneraciones de las energías E_2 y E_1 , salvo cuando $\theta = 90^\circ$, en cuyo caso aparece una degeneración de orden dos en el estado excitado con vectores propios $|\frac{3}{2}\rangle$ y $|\frac{-3}{2}\rangle$.
- Si $\theta = 0^\circ$, los vectores de estado $|\psi^{(0)}\rangle$ de las energías excitadas son combinaciones lineales triviales de los vectores de los estados propios de E_2 . (Dos vectores de estado son constantes.) De no ser así, los vectores de estado de dos energías excitadas son combinaciones lineales no triviales de los vectores $|\frac{1}{2}\rangle$ y $|\frac{-1}{2}\rangle$ con dos coeficientes reales (si $\phi = 0^\circ$) o un coeficiente real y otro complejo (si $\phi \neq 0^\circ$).

Los vectores de estado no constantes son función de los ángulos θ y ϕ .

- Las correcciones $\Delta E^{(1)}$ y los correspondientes vectores de estado $|\psi^{(0)}\rangle$ de las energías base son los mismos de la interacción DM.
- Las correcciones $\Delta E^{(1)}$ a las energías excitadas son función del ángulo θ , de la magnitud del campo magnético B , y del gradiente del campo eléctrico V_{zz} .
- Cuando $V_{zz} > 0$ y $\theta = 0^\circ$, la diferencia entre los dos niveles excitados superiores es mayor que la diferencia entre los dos niveles excitados inferiores. El parámetro p muestra este comportamiento, comparando los niveles de energía de la interacción CE/dm con los de la interacción CE.
- El cambio de signo del gradiente del campo eléctrico V_{zz} tiende a invertir el comportamiento de las energías excitadas.

TABLA 2
INTERACCIONES ELÉCTRICAS



INTERACCIÓN CUADRIPOLO ELÉCTRICA (CE)

Caso General		Caso Simétrico $\eta = 0$	
I	$\Delta E^{(1)}$	$ \psi^{(0)}\rangle$	$ \psi^{(0)}\rangle$
$\frac{3}{2}$	$3A\sqrt{1+\frac{\eta^2}{3}}$ [DEGENERACIÓN DE ORDEN DOS]	$\frac{1}{\sqrt{\eta^2+3\left(1+\sqrt{1+\frac{\eta^2}{3}}\right)^2}} \left[\sqrt{3}\left(1+\sqrt{1+\frac{\eta^2}{3}}\right) \left \pm\frac{3}{2} \right\rangle + \eta \left \mp\frac{1}{2} \right\rangle \right]$	$3A$ [DEGENERACIÓN DE ORDEN DOS] $\left \pm\frac{3}{2} \right\rangle$
$\frac{1}{2}$	$-3A\sqrt{1+\frac{\eta^2}{3}}$ [DEGENERACIÓN DE ORDEN DOS]	$\frac{1}{\sqrt{\eta^2+3\left(1+\sqrt{1+\frac{\eta^2}{3}}\right)^2}} \left[\eta \left \mp\frac{3}{2} \right\rangle - \sqrt{3}\left(1+\sqrt{1+\frac{\eta^2}{3}}\right) \left \pm\frac{1}{2} \right\rangle \right]$	$-3A$ [DEGENERACIÓN DE ORDEN DOS] $\left \pm\frac{1}{2} \right\rangle$
$\frac{1}{2}$	0	$\left \frac{1}{2} \right\rangle; \left -\frac{1}{2} \right\rangle$	0 $\left \frac{1}{2} \right\rangle; \left -\frac{1}{2} \right\rangle$

INTERACCIÓN CUADRIPOLO ELÉCTRICA FUERTE Y DIPOLAR MAGNÉTICA DÉBIL (CE/dm)

Caso General		Caso Paralelo $\theta = 0^\circ; \phi = 0^\circ$	Caso Perpendicular $\theta = 90^\circ; \phi = 0^\circ$
I	$\Delta E^{(1)}$	$ \psi^{(0)}\rangle$	$ \psi^{(0)}\rangle$
$\frac{3}{2}$	$3(A \mp \alpha \cos \theta)$	$\left \pm\frac{3}{2} \right\rangle$	$3A$ [DEGENERACIÓN DE ORDEN DOS] $\left \pm\frac{3}{2} \right\rangle$
$\frac{1}{2}$	$-3A \mp \alpha \sqrt{1+3\sin^2 \theta}$	$\frac{2\sin \theta}{\sqrt{4\sin^2 \theta + \left(\sqrt{1+3\sin^2 \theta} + \cos \theta\right)^2}} \left \mp\frac{1}{2} \right\rangle \pm \frac{\sqrt{1+3\sin^2 \theta} + \cos \theta}{\sqrt{4\sin^2 \theta + \left(\sqrt{1+3\sin^2 \theta} + \cos \theta\right)^2}} e^{\mp i \phi} \left \pm\frac{1}{2} \right\rangle$	$-3A \mp \alpha$ $\left \pm\frac{1}{2} \right\rangle$
$\frac{1}{2}$	$\mp \beta$	$\cos \frac{\theta}{2} e^{\mp i \frac{\phi}{2}} \left \pm\frac{1}{2} \right\rangle \pm \sin \frac{\theta}{2} e^{\pm i \frac{\phi}{2}} \left \mp\frac{1}{2} \right\rangle$	$-3A \mp 2\alpha$ $\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left \frac{1}{2} \right\rangle \pm \left -\frac{1}{2} \right\rangle \right)$
$\frac{1}{2}$	$\mp \beta$	$\left \pm\frac{1}{2} \right\rangle$	$\mp \beta$ $\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left \frac{1}{2} \right\rangle + \left -\frac{1}{2} \right\rangle \right)$

B. POSIBLES EXTENSIONES

La estructura básica del programa *Eigenerador* podría incorporar las siguientes extensiones.

- *Eigenerador* podría simular las interacciones DM, CE, DM/ce y CE/dm de otros isótopos Mössbauer tales como ^{119}Sn , ^{125}Te o ^{195}Pt , cuyo fenómeno de resonancia, al igual que en el isótopo ^{57}Fe , ocurre entre núcleos de espines $I = \frac{1}{2}$ e $I = \frac{3}{2}$ (ver los §§ 1 y 2 del Capítulo 1), simplemente aplicando las razones giromagnéticas (g) y el momento cuadrupolar eléctrico (Q) correspondientes [ver los hamiltonianos (A-7) y (A-21) del Capítulo I y el §2b del Apéndice].

El orden de degeneración de los niveles de energía no perturbados del núcleo es $2I + 1$ (ver el §2 del Capítulo 1). Por lo tanto, aunque los cálculos de los Capítulos II-V siguen siendo completamente análogos, éstos se complican para los isótopos Mössbauer con espines mayores de $I = \frac{3}{2}$. Por ejemplo, un núcleo de $I = \frac{5}{2}$, tiene una energía no perturbada con una degeneración de orden seis con estados propios $|I, m_1\rangle = |\frac{5}{2}, \frac{5}{2}\rangle, |\frac{5}{2}, \frac{3}{2}\rangle, |\frac{5}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{5}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$ y $|\frac{5}{2}, -\frac{5}{2}\rangle$, de manera que la correspondiente matriz de perturbación es de 6×6 . La diagonalización de este tipo de matrices generalmente requiere aplicar métodos computacionales. En vista de esto, para que *Eigenerador* simulara las interacciones eléctricas y magnéticas de isótopos Mössbauer con $I > \frac{3}{2}$, habría que incorporar al programa:

- i) una pantalla para que el usuario capturara los espines nucleares I de los niveles de energía no perturbados entre los cuales ocurre el fenómeno de resonancia del efecto Mössbauer en el isótopo en cuestión y los valores de g y Q correspondientes;
 - ii) los algoritmos de los hamiltonianos que representan las interacciones DM y CE [ver (A-7) y (A-21) del Capítulo I];
 - iii) los algoritmos de las expresiones de operadores de espín actuando sobre kets, tales como $\hat{I}^2 |Im\rangle = I(I+1)|Im\rangle$ y $\hat{I}_z |Im\rangle = m|Im\rangle$ ¹, que permiten construir las matrices de espines I_x, I_y, I_z [ver (A-5) y (A-9) del Capítulo II] e \hat{I}^2, I_-, I_+ [ver (A-5) del Capítulo III] en cualquier base vectorial dada; y
 - iv) rutinas de diagonalización de matrices y de cálculo de vectores propios.
- Para fines de comparación, en las interacciones DM/ce y CE/dm *Eigenerador* podría desplegar los correspondientes diagramas de energías de DM y CE respectivamente, de manera que en pantalla aparecieran diagramas comparativos de energías como los de las Tablas I y II.

¹ Cohen-Tannoudji (3.1), cap. VI, §C.

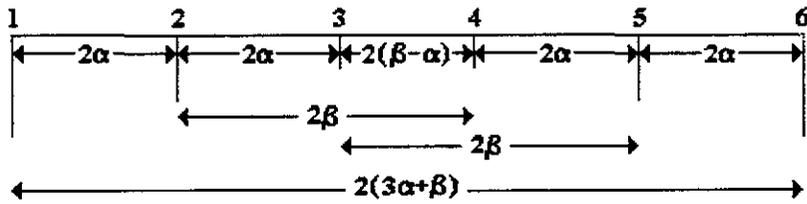


Fig. 1 Diagrama de energías horizontal para la interacción DM

Del dibujo de energías de la interacción DM en la Tabla 1, se aprecia que, por ejemplo, la diferencia entre las líneas 1 y 2 es 2α . Esta es la separación entre los picos 1 y 2 del espectro Mössbauer correspondiente (fig. 2). *Eigenerador* podría dibujar diagramas de energías horizontales como el de la fig. 1, que permiten visualizar directamente las separaciones entre picos de espectros.

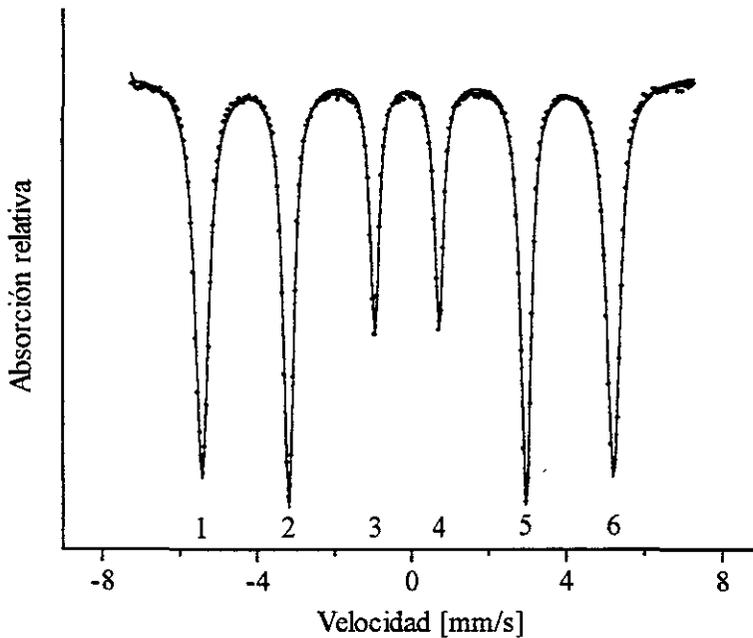


Fig. 2 Espectro Mössbauer típico de la interacción DM

Eigenerador podría simular espectros Mössbauer como el de la fig. 2, incorporando datos de intensidades y usando la información de los diagramas de energía horizontales (fig. 1). Estos espectros serían una herramienta que ayudaría a visualizar el comportamiento de espectros experimentales y a establecer algunos de los parámetros que se emplean para ajustar dichos espectros.

C. CONCLUSIÓN

El programa *Eigenerador* es un simulador computacional de las cuatro interacciones eléctricas y magnéticas más comunes en la espectroscopía Mössbauer. El diseño del programa está basado totalmente en los cálculos de esta tesis, los cuales no aparecen con detalle en la literatura. El simulador es una herramienta didáctica para quienes se inician en el estudio de la espectroscopía Mössbauer y un laboratorio virtual para quienes, ya adentrados en ella, desean experimentar con los principales parámetros de esta espectroscopía.

El programa *Eigenerador* contempla la incorporación de posibles extensiones, las cuales abarcarían la mayoría de los isótopos Mössbauer y producirían una simulación aún más poderosa. Los cálculos de esta tesis y el programa *Eigenerador* en su estado actual son la base para diseñar y validar dichas extensiones.

DATOS DE CONSULTA

1. Símbolos
2. Constantes
 - a. Generales
 - b. Del isótopo ^{57}Fe
3. Factores de conversión
 - a. Generales
 - b. Del isótopo ^{57}Fe
4. Sustituciones
5. Identidades y desarrollos

En este apéndice se presentan los valores numéricos, las sustituciones y otros datos empleados en los cálculos de los Capítulos II-V y en el programa Eigenerador.

1. Símbolos

- I Espín nuclear
 m_I Número cuántico magnético
 B Magnitud del campo magnético en el sitio del núcleo
 V_{zz} Gradiente del campo eléctrico en la dirección z en el sitio del núcleo
 θ, ϕ Ángulos que especifican la orientación del campo magnético \mathbf{B} con respecto al eje z en el sitio del núcleo. (En las interacciones DM/ce y CE/dm, la orientación es con respecto al gradiente del campo eléctrico en el sitio del núcleo.)
 η Parámetro de asimetría

2. Constantes

a. GENERALES

- Carga del protón $e = 1.602\ 189(5) \times 10^{-19}$ coulomb
 Masa del protón $m_p = 1.672\ 65(1) \times 10^{-27}$ kg
 Constante de Planck $\hbar = 1.054\ 589(6) \times 10^{-34}$ joule segundo
 Magnetón nuclear $\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5.050\ 82(2) \times 10^{-27}$ joule/tesla

b. DEL ISÓTOPO ^{57}Fe

- Razones giromagnéticas $g_{\frac{1}{2}} = 0.180$ (núcleos de espín $I=\frac{1}{2}$)
 $g_{\frac{3}{2}} = -0.103$ (núcleos de espín $I=\frac{3}{2}$)
 Momento cuadrupolar eléctrico $Q = 0.2 \times 10^{-28}$ m²

3. Factores de conversión**a. GENERALES**

$$1 \text{ tesla} = 10^4 \text{ gauss}$$

$$1 \text{ electrón-volt} = 1.602\,189(5) \times 10^{-19} \text{ joule}$$

$$1 \text{ joule} = 10^7 \text{ erg}$$

$$1 \text{ coulomb} = 3 \times 10^9 \text{ ues}$$

$$1 \text{ volt} = \frac{1}{300} \text{ erg/ues}$$

b. DEL ISÓTOPO ^{57}Fe

$$1 \text{ mm/s} = 4.8 \times 10^{-11} \text{ keV}$$

4. Sustituciones

$$a = \cos \theta$$

$$b = \sin \theta$$

$$\alpha = \frac{g_{\frac{3}{2}} \mu_N B}{2}$$

$$\beta = \frac{g_{\frac{1}{2}} \mu_N B}{2}$$

$$A = \frac{eQV_{zz}}{4I(2I-1)}$$

5. Identidades y desarrollos

I $b = \operatorname{sen} \theta = 2 \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$

II $1 + a = 1 + \cos \theta = 2 \cos^2 \frac{\theta}{2}$

III $1 - a = 1 - \cos \theta = 2 \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2}$

IV $a^2 + b^2 = \cos^2 \theta + \operatorname{sen}^2 \theta = 1$

V $a^2 - b^2 = \cos^2 \theta - \operatorname{sen}^2 \theta = 2 \cos^2 \theta - 1$

VI $(1+a)(1-a) \stackrel{(II,III)}{=} (2 \cos^2 \frac{\theta}{2})(2 \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2}) = 4 \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}$

VII $(3+a)(1+a) - b^2 = (3 + \cos \theta)(1 + \cos \theta) - \operatorname{sen}^2 \theta = \cos^2 \theta - \operatorname{sen}^2 \theta + 4 \cos \theta + 3 \stackrel{(V)}{=} 2 \cos^2 \theta - 1 + 4 \cos \theta + 3 = 2(\cos^2 \theta + 2 \cos \theta + 1) = 2(\cos \theta + 1)^2 \stackrel{(II)}{=} 2(2 \cos^2 \frac{\theta}{2})^2 = 8 \cos^4 \frac{\theta}{2}$

VIII $(a-3)(1-a) + b^2 = (\cos \theta - 3)(1 - \cos \theta) + \operatorname{sen}^2 \theta = \operatorname{sen}^2 \theta - \cos^2 \theta + 4 \cos \theta - 3 \stackrel{(V)}{=} 1 - 2 \cos^2 \theta + 4 \cos \theta - 3 = -2(\cos^2 \theta - 2 \cos \theta + 1) = -2(\cos \theta - 1)^2 \stackrel{(III)}{=} -2(-2 \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2})^2 = -8 \operatorname{sen}^4 \frac{\theta}{2}$

IX $3(b^2 - a^2) + 4a - 1 \stackrel{(V)}{=} 3(1 - 2 \cos^2 \theta) + 4 \cos \theta - 1 = -6 \cos^2 \theta + 4 \cos \theta + 2 = -2(3 \cos^2 \theta - 2 \cos \theta - 1) = -2(3 \cos \theta + 1)(\cos \theta - 1) \stackrel{(III)}{=} 4 \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2} (3 \cos \theta + 1)$

X $\sec \theta = \frac{1}{\cos \theta}$

XI $\sec^2 \theta = 1 + \tan^2 \theta$

XII $e^{\pm i\phi} = \cos \phi \pm i \operatorname{sen} \phi$

XIII $\cos \phi = \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2}$

Bibliografía

1. ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER

TEXTOS

- 1.1 *An Introduction to Mössbauer Spectroscopy*
L. May
Plenum Press (1971)
- 1.2 *Introduction à la Spectrométrie Mössbauer*
J. P. Adloff
Monographie, Université Louis Pasteur
- 1.3 *L'effet Mössbauer et ses Applications*
C. Janot
Masson et Cie., Éditeurs (1972)
- 1.4 *Mössbauer Effect Data Index - Covering the 1971 Literature*
J. G. Stevens y V. E. Stevens
IFI/Plenum (1972)
- 1.5 *Mössbauer Effect Methodology*
I. J. Gruverman
Plenum Press (1967)
- 1.6 *Mössbauer Effect: Principles and Applications*
G. K. Wertheim
Academic Press (1964)
- 1.7 *Mössbauer Spectroscopy*
N. N. Greenwood y T. C. Gibb
Chapman and Hall Ltd. (1971)
- 1.8 *The Mössbauer Effect*
H. Frauenfelder
W. A. Benjamin (1962)

ARTÍCULOS

- 1.9 *Evaluation of Mössbauer Spectra for ^{57}Fe*
W. Kündig
Nuclear Instruments and Methods, Vol. 48, 1967
- 1.10 *Some Properties of Supported Small $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ Particles Determined with the Mössbauer Effect*
W. Kündig, H. Bömmel, G. Constabaris, R. H. Lindquist
Physical Review, Vol. 142, No. 2, febrero de 1966

2. FÍSICA NUCLEAR

- 2.1 *Nuclear Physics - Theory and Experiment*
R. R. Roy y B. P. Nigam
John Wiley & Sons, Inc. (1967)
- 2.2 *Physics of the Nucleus*
M. A. Preston
Addison-Wesley Publishing Co., Inc. (1963)
- 2.3 *Theoretical Nuclear Physics*
J. M. Blatt y V. F. Weisskopf
John Wiley & Sons (1963)

3. MECÁNICA CUÁNTICA

- 3.1 *Quantum Mechanics*
C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloë
Hermann (1977)
- 3.2 *Quantum Mechanics*
E. Merzbacher
John Wiley & Sons (1970)

4. FÍSICA MODERNA

TEXTO

- 4.1 *Fundamentos de Física Moderna*
R. M. Eisberg
Editorial Limusa, S.A. de C.V. (1992)

ARTÍCULO

- 4.2 *Why is the Hamiltonian of a magnetic dipole $-m \cdot B$?*
D. J. Griffiths
American Journal of Physics, Vol. 65, No. 10, octubre de 1997

5. RESONANCIA MAGNÉTICA

- 5.1 *Principles of Magnetic Resonance*
C. P. Slichter
Harper & Row (1963)

6. COMPUTACIÓN

TEXTOS

- 6.1 *Help Compiler Guide*
Microsoft Corporation (1993)
- 6.2 *Visual Basic 3.0*
M. Achával
Ventura Ediciones, S.A. de C.V. (1993)

PROGRAMAS

- 6.3 *IconMaker*
(Diseño del icono de *Eigenerador*)
- 6.4 *Microsoft Visual Basic Version 3.0*
(Compilación de *Eigenerador*)
- 6.5 *Microsoft Word 2.0*
(Texto de las pantallas de ayuda de *Eigenerador*)
- 6.6 *Paintbrush for Windows*
(Dibujos de las pantallas de ayuda de *Eigenerador*)