

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

FACULTAD DE MATEMÁTICA, ASTRONOMÍA, FÍSICA Y COMPUTACIÓN

SERIE “C”

TRABAJOS DE FÍSICA

N.º 14/2019

COMPLEMENTO PARA FÍSICA EXPERIMENTAL V: Polarización en el efecto Zeeman

Lorenzo M. Iparraguirre



Editor: Miguel Chesta

CIUDAD UNIVERSITARIA – 5000 CÓRDOBA

REPÚBLICA ARGENTINA

COMPLEMENTO para FÍSICA EXPERIMENTAL V: POLARIZACIÓN EN EL EFECTO ZEEMAN

Dr. Lorenzo M. Iparraguirre – FAMAFA – 2019

RESUMEN

Se presentan los cálculos explícitos necesarios para explicar la polarización de las diversas componentes de la línea roja del cadmio de 644 nm de longitud de onda, en la experiencia denominada “Efecto Zeeman”, que se realiza en la asignatura Física Experimental V.

Se considera que esta presentación es útil para facilitar a los alumnos que llegan a cursar dicha asignatura, la integración de conceptos de electromagnetismo con conceptos de mecánica cuántica.

Palabras clave: efecto Zeeman – número cuántico magnético – desdoblamiento – transiciones – polarización.

INTRODUCCIÓN

En nuestra facultad, FAMAFA (UNC), Física Experimental V es una materia que contiene experimentos clásicos de los albores de la física cuántica, cuyos planteos a veces resultan totalmente novedosos para los alumnos, y a veces ofrecen buenas oportunidades de aplicación e integración de conceptos aprendidos teóricamente en otras asignaturas.

El caso del experimento denominado “Efecto Zeeman” ofrece la oportunidad de integrar conceptos de mecánica cuántica y de electromagnetismo, entre otros. Los aspectos relacionados con la polarización de las componentes de la línea que se desdobra por efecto del campo magnético son interesantísimos, pero en general se plantean como curiosidades accesorias a la experiencia, sobre cuyas causas no se profundiza. De este modo los alumnos pierden la oportunidad de relacionar algunos aspectos prácticos muy interesantes de la manera de irradiar ondas electromagnéticas en diversos estados de polarización, con los números cuánticos involucrados en las transiciones responsables de esa radiación.

Por otra parte se debe considerar que, en función del recorrido académico particular de los alumnos que llegan a cursar Física experimental V, solamente algunos alumnos tendrán adquiridos de manera completa los elementos de mecánica cuántica necesarios, por lo cual a continuación se presenta una selección resumida de los elementos básicos necesarios para una explicación semi-clásica de una transición radiativa dipolar eléctrica.

NOCIONES ELEMENTALES DE MECÁNICA CUÁNTICA

Para una partícula cuyo movimiento clásicamente describiríamos con las funciones $x(t)$, $y(t)$, y $z(t)$, la Mecánica Cuántica no nos permite conocer más que ciertas probabilidades de determinadas cosas.

Aquí no trataremos de profundizar mucho en estas cuestiones, sino que trataremos de aprender a realizar algunas cuentas específicas, suponiendo algunos conocimientos elementales que pueden revisarse en cualquier texto básico de Mecánica Cuántica [1]...[4].

Aceptemos que para una partícula como un electrón en un átomo son posibles estados caracterizados por funciones de onda $\Psi(x, y, z, t)$ que permiten calcular probabilidades de que la partícula haga determinadas cosas. Esencialmente estas funciones son complejas, y su módulo cuadrado es un número real positivo que indica la densidad de probabilidad de que la partícula esté en el lugar dado por x, y, z , en el instante t .

Algunos estados tienen propiedades especiales que los hacen importantes para conocer la evolución en el tiempo del sistema: son los estados de “energía definida”, también llamados “estacionarios” por razones que veremos inmediatamente.

Si $\Psi_a(x, y, z, t)$ es la función de onda de un estado estacionario de energía E_a de una partícula, entonces, por razones que no demostraremos aquí, su dependencia del tiempo está dada por:

$$\Psi_a(x, y, z, t) = \psi_a(x, y, z) \times \exp(-i \omega_a t), \quad (1)$$

donde $\omega_a = E_a / \hbar$.

Y a estos estados les cabe la denominación de “estacionarios” porque como se desprende de (1), su módulo cuadrado, y con él cualquier probabilidad que represente, resulta absolutamente independiente del tiempo¹.

Dado un sistema hay métodos para conocer todos sus estados estacionarios Ψ_a, Ψ_b, Ψ_c , etc., con sus respectivas energías E_a, E_b, E_c , etc., y para todos ellos hay un tratamiento estandar que establece algunas cosas típicas como.

1) Las funciones de onda se definen normalizadas de manera que su módulo cuadrado es una cantidad real positiva que representa la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en el elemento de volumen d^3x , y por ello siempre se tiene:

$$\int \Psi_a \Psi_a^* d^3x = \int |\Psi_a|^2 d^3x = 1 \quad (2)$$

Lo cual expresa el requisito básico de que la probabilidad total de existir la partícula (distribuida de alguna manera cualquiera que sea en el infinito universo), es igual a la unidad.

Por otra parte, el hecho de que $|\Psi_a|^2$ sea la densidad (por unidad de volumen) de la probabilidad de encontrar la partícula en el elemento de volumen d^3x en cada lugar, nos permite utilizarla para calcular el valor medio, también llamado valor “de expectación”, de cualquier variable que dependa de la posición del electrón, como se indica en el próximo punto.

2) El valor medio de la función real $f(x, y, z)$, en el estado Ψ_a está dado por:

$$\langle f \rangle = \int |\Psi_a|^2 f d^3x \quad (3)$$

Y vemos que si el sistema está en un estado de energía definida, la estructura expresada por (1) para estos estados garantiza que para cualquier función f de las coordenadas que no dependa del tiempo, el valor medio $\langle f \rangle$ no dependerá del tiempo, lo cual justifica nuevamente la denominación de estacionarios para estos estados.

¹ Estos estados representan la idea básica de Bohr: estados en los cuales el electrón en el átomo podría mantenerse orbitando en un nivel de energía indefinidamente, sin irradiar como el electromagnetismo exigiría. La teoría cuántica logra inventar estos estados en los cuales nada que pueda detectarse varía en el tiempo, y logran así burlar al electromagnetismo de alguna manera.

Notar que el valor medio que definimos de esta manera no es un promedio temporal, sino exclusivamente espacial, que considera todas las probabilidades de estar el electrón en cada lugar en un mismo único instante. Este valor medio no depende del tiempo exclusivamente en los estados estacionarios, y veremos que sí puede depender de él en otros estados.

3) Las funciones de distinta energía no se solapan (se dice que son “ortogonales”) entre sí:

$$\int \Psi_a \Psi_b^* d^3x = 0 \quad (4)$$

Estados estacionarios y estados mezcla

Si hemos aceptado que un sistema que está en un estado estacionario Ψ_a tiene la evolución temporal dada por (1), entonces hemos aceptado que permanecerá indefinidamente en ese estado, y nunca sufrirá una transición a otro estado a menos que algo lo perturbe.

Ahora bien, ya sea porque eso requeriría un sistema absolutamente aislado, libre de toda perturbación, lo cual en la práctica nunca se da, o ya sea porque, como dijo Richard Feynmann “nadie entiende realmente la física cuántica” [5], resulta que los sistemas cuando están en un estado estacionario cualquiera Ψ_a , por más energía definida que tenga, si disponen de estados de energía menor, en general tienden a “saltar” al estado de menor energía, emitiendo un fotón con la energía sobrante. Y solamente permanecen indefinidamente cuando están en el estado de *más baja energía posible*, denominado “fundamental”, del cual sólo pueden salir si son excitados por una perturbación externa que los lleve a un nivel de mayor energía.

De manera que en general un sistema en el estado estacionario Ψ_a , si dispone de un estado estacionario Ψ_b de menor energía ($E_b < E_a$), en algún momento realizará espontáneamente una transición a ese estado emitiendo el correspondiente fotón. Dejando de lado los casos especiales de transiciones inducidas por determinadas perturbaciones, estas transiciones espontáneas ocurren en algún momento impredecible y se realizan de una manera probabilística que como dijo Feynmann, [5], no ha podido ser explicada nunca por nadie, y no trataremos de explicar aquí.

Pero intentaremos una explicación semiclásica que arroja cierta luz sobre algunas características del proceso.

Pensemos que el sistema está en el estado estacionario Ψ_a , y en un instante dado comienza un hipotético proceso de pasar gradualmente al estado estacionario Ψ_b de menor energía, de manera que demora cierto tiempo en hacerlo, y durante ese lapso el sistema está en un estado “mezcla”, Ψ , dado por:

$$\Psi = a \Psi_a + b \Psi_b. \quad (5)$$

Donde a y b son dos coeficiente complejos tales que en todo instante $|a|^2 + |b|^2 = 1$, de manera de conservar la normalización (o sea la probabilidad), y van variando (supondremos que muy lentamente) desde un instante inicial en el que $a = 1$ y $b = 0$, para expresar $\Psi = \Psi_a$, hasta que finalmente $a = 0$ y $b = 1$, cuando se llega a la situación $\Psi = \Psi_b$.

Aplicando (2) y (4) es fácil ver que durante toda la transición el estado mezcla Ψ se mantiene normalizado, y cumple siempre el requisito básico mencionado en (2).

Pero ahora unas cuentas simples nos mostrarán que en general el valor medio $\langle f \rangle$ de diversas funciones representativas de algunas propiedades interesantes del sistema, ya no serán constantes mientras el sistema está en el estado mezcla.

Por ejemplo, si nuestro sistema es un electrón de carga $-e$ moviéndose (en el potencial de un núcleo, en general), la componente x del momento dipolar eléctrico del sistema está dado por el producto $-e \cdot x$, y podemos calcular su valor medio $\langle p_x \rangle = -e \langle x \rangle$.

Si obtenemos que $\langle p_x \rangle$ en el estado mezcla es una función oscilatoria del tiempo, estaremos en presencia de un dipolo oscilante y podremos encontrar la onda electromagnética que necesariamente debe irradiar, y así podremos justificar semiclásicamente la generación del fotón pensado como un paquete de ondas.

El cálculo es sencillo. Lo planteamos para la componente x_i , representativa de x , y , o z , en el estado mezcla $\Psi = a \psi_a(x, y, z) \times \exp(-i \omega_a t) + b \psi_b(x, y, z) \times \exp(-i \omega_b t)$:

$$\begin{aligned} \langle x_i \rangle &= \int (a \psi_a e^{-i \omega_a t} + b \psi_b e^{-i \omega_b t}) (a^* \psi_a^* e^{i \omega_a t} + b^* \psi_b^* e^{i \omega_b t}) x_i d^3 x \\ &= \int (|a|^2 |\psi_a|^2 + |b|^2 |\psi_b|^2 + a^* b \psi_a^* \psi_b e^{i(\omega_a - \omega_b)t} + a b^* \psi_a \psi_b^* e^{-i(\omega_a - \omega_b)t}) x_i d^3 x \\ &= |a|^2 \int |\psi_a|^2 x_i d^3 x + |b|^2 \int |\psi_b|^2 x_i d^3 x + \\ &+ a^* b e^{i(\omega_a - \omega_b)t} \int \psi_a^* \psi_b x_i d^3 x + (a^* b e^{i(\omega_a - \omega_b)t} \int \psi_a^* \psi_b x_i d^3 x)^* \end{aligned} \quad (6)$$

Ahora inspeccionemos esta expresión. Para simplificar las ideas supondremos que la evolución en el tiempo de los coeficientes de la mezcla, a , y b , es infinitamente lenta. Es decir consideremos qué pasaría en un estado mezcla si se pretendiera que se mantuviera inalterado en el tiempo como se supone que hacen los estados estacionarios.

Podemos distinguir en el primer renglón de (6) una parte independiente del tiempo en la cual cada integral es el valor medio de x_i en cada uno de los estados estacionarios ($\langle x_i \rangle_a$ y $\langle x_i \rangle_b$), mientras que el segundo renglón da claramente una función real que oscila armónicamente en el tiempo con frecuencia $\omega_a - \omega_b$:

$$\langle x_i \rangle = |a|^2 \langle x_i \rangle_a + |b|^2 \langle x_i \rangle_b + X_{ab} \cos((\omega_a - \omega_b)t + \alpha) \quad (7)$$

Donde:

$X_{ab} = 2 |a^* b| \left| \int \psi_a^* \psi_b x_i d^3 x \right|$, y α es el factor de fase que resulta de la suma de los factores de fase de los términos $a^* b$, y $\int \psi_a^* \psi_b x_i d^3 x$.

La integral $\int \psi_a^* \psi_b x_i d^3 x$ puede ser nula o no, dependiendo de las características de las dos funciones de onda que se están proponiendo en la mezcla.

En general se la denomina “elemento de matriz” de x_i entre los estados a y b :

$$x_{i(ab)} = \int \psi_a^* \psi_b x_i d^3 x \quad (8)$$

Para el caso que nos interesa, del momento dipolar eléctrico de un electrón, $p_i = -e x_i$, nos encontramos que si este momento dipolar tiene elementos de matriz no nulos entre dos estados posibles a y b del electrón, entonces el electrón no podrá permanecer en un estado mezcla de esos estados porque según el electromagnetismo clásico deberá emitir radiación dipolar que le impedirá mantener constante la energía.

No estamos en condiciones de calcular el valor medio de la energía aquí, pero baste saber que la expresión que arroja la cuántica para $\langle E \rangle$ en el estado mezcla es:

$$\langle E \rangle = |a|^2 E_a + |b|^2 E_b \quad (9)$$

De manera que en una Mecánica Cuántica elemental, que no considere al electromagnetismo y solamente analice las funciones de onda en este nivel superficial, el estado mezcla podría existir indefinidamente, con energía constante dada por (9).

Pero el electromagnetismo no permitiría la permanencia de estados (mezcla) en los cuales el electrón tuviera momento dipolar medio oscilante en el tiempo (notar nuevamente que los valores medios $\langle \rangle$ de la mecánica cuántica no son promedios temporales sino espaciales), dado que eso exigiría radiación y pérdida de energía.

Esto nos permite revisar con nuevos ojos la idea básica de Bohr: existen estados especiales para el electrón en los cuales el electromagnetismo no requiere que haya radiación porque nada “observable” varía en el tiempo, y éstos son los estados estacionarios. Una mezcla de estados estacionarios de distinto nivel de energía no es un estado estacionario, y en general el sistema no puede permanecer en él.

Y así ocurre que, aunque no lo dice la Mecánica Cuántica básica (esto no se encuentra en Mecánica Cuántica I, ni en Mecánica Cuántica II, y para encontrarlo hay que llegar al campo electromagnético cuantificado, en Electrodinámica Cuántica, donde imperan esas ideas de Feynmann [5], según las cuales es como si el electrón probara todos los caminos posibles), si un electrón está en el estado estacionario Ψ_a , y dispone de un estado (no ocupado) Ψ_b de menor energía, para el cual los elementos de matriz del momento dipolar eléctrico $p_{i(ab)}$ no son nulos, en algún momento realizará espontáneamente una transición a ese estado emitiendo el correspondiente fotón de radiación dipolar eléctrica.

Los números cuánticos del átomo

Para el caso de los estados del electrón en el átomo es posible mostrar (lo corroboraremos explícitamente más adelante) que, con la elección habitual de los ejes coordenados y las variables esféricas,

- p_z tiene elementos de matriz no nulos solamente si $\Delta m = 0$, y $\Delta l = \pm 1$.
- p_x , y p_y tienen elementos de matriz no nulos solamente si $\Delta m = \pm 1$, y $\Delta l = \pm 1$.

Revisemos un poco el significado de estos números cuánticos

En general para el electrón en un átomo tenemos funciones de onda $\psi_{n,l,m}$ con tres números cuánticos. El número n se denomina *número cuántico principal*, o *de energía*, porque su valor exclusivamente es el que determina la energía en los átomos de un solo electrón (átomo de hidrógeno, o átomo *hidrogenoide*). Por otra parte l es el número cuántico de *momento angular orbital*, y su valor determina el módulo de dicho vector \vec{L} según la expresión: $L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$, y por último m se denomina número cuántico *magnético*, porque determina la componente z del momento angular orbital (o sea también del momento dipolar magnético) según la expresión: $L_z = m \hbar$ (\hbar es el símbolo que se utiliza para $h/2\pi$, siendo h la constante de Planck, y puede considerarse como la unidad natural de momento angular en el dominio de las partículas cuánticas).

En los átomos con un solo electrón la energía está dada para cada nivel n , y es la misma para todos los números l , y m que correspondan. La presencia de determinadas perturbaciones, como otros electrones, campos magnéticos externos, etc. puede hacer que aparezcan

subniveles con diferentes energías según los valores de l o m , y no necesitaremos aquí conocer expresiones para estas energías.

El caso del cadmio

Para nuestro caso de interés tenemos un sistema que es cadmio, con 48 electrones, cuyo nivel más elevado (menos ligado) de energía es el $n = 5, l = 0$, ocupado por dos electrones con los espines apareados². Por los choques de los electrones de la corriente eléctrica uno de esos dos electrones es excitado al nivel $n = 5, l = 2$, desde el cual decae, emitiendo la luz roja que nos interesa al decaer al $n = 5, l = 1$.

En el nivel de partida (de la caída) hay 5 estados $(5, 2, m)$ de la misma energía $E_a = E_{5,2}$, y en el de llegada hay 3 estados $(5, 1, m')$ de la misma energía $E_b = E_{5,1}$. Para el átomo con un solo electrón, denominado hidrogenoide (que en este caso sería el cadmio 47 veces ionizado), la energía sólo dependería del número n , y por lo tanto, en ese caso E_a y E_b , serían iguales y no habría transiciones entre ellos (y de haberlas no habría oscilaciones ni radiación de energía).

Pero las perturbaciones de los otros 47 electrones son las que hacen que los *subniveles* de distinto número l del nivel principal $n = 5$ tengan diferentes energías, y posibilitan que aparezca esta línea roja $(5,2,m) \rightarrow (5,1,m')$, en el espectro.

Ahora bien, cuando se aplica el campo magnético \vec{B} , todos los estados de cada uno de los subniveles (tanto del subnivel $(5,1,m)$ como del subnivel $(5,2,m')$), que por tener igual energía (en cada subnivel) podían imaginarse con cualquier orientación espacial, se reorganizan con el “eje de cuantificación”, es decir el eje z de las funciones de onda a lo largo del campo (ver las expresiones $\psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r) \cdot Y_l^m(\theta, \varphi)$ más adelante).

Porque los estados naturalmente tienen un momento magnético orbital $\vec{\mu}$, que es proporcional al momento angular orbital según:

$$\vec{\mu} = \frac{-e}{2m_e} \vec{L}, \quad (10)$$

y en presencia del campo \vec{B} modifican su energía en la cantidad $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, que depende de la componente de \vec{L} en la dirección del campo (aquí m_e es la masa del electrón y el factor $(-e/2m_e)$ es la denominada *razón giromagnética*)

De manera que, en presencia de \vec{B} , los estados de energía definida son los estados dados por los tres números cuánticos: n, l , y m , que deben referirse a funciones de onda escritas para un eje z que es la dirección del campo.

Los estados correspondientes a funciones de onda orientadas en el espacio de otra manera (con un eje z' que no coincida con la dirección de \vec{B}) podrían expresarse como combinación

² El *espín* es el momento angular intrínseco del electrón, y debe tratarse con el mismo esquema general de números cuánticos que corresponden a todos los momentos angulares. Pero para el caso que estamos considerando el único detalle que interesa es que el espín introduce un número cuántico de solamente dos valores posibles $+\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$, que hace que cada estado caracterizado por los números cuánticos “orbitales”, n, l, m , pueda ser ocupado por dos electrones, cumpliendo el Principio de Exclusión de Pauli. Este principio dice que no puede haber más de un electrón con cada conjunto completo de números cuánticos, de manera que de no ser por el espín, solamente podría haber un electrón en el estado $\psi_{5,0,0}$, pero considerando dicho espín, podemos tener un electrón en el estado $\psi_{5,0,0,+\frac{1}{2}}$, y otro en el $\psi_{5,0,0,-\frac{1}{2}}$. Estos electrones con espines opuestos constituyen un par con momento angular intrínseco total nulo, y se denominan “apareados”.

de las funciones escritas para z en la dirección de \vec{B} , pero serían estados mezcla, que combinarían distintos valores de energía, y no serían estacionarios.

De manera que, desde que existe el campo, cada estado estacionario está dado por los tres números cuánticos: n , l , y m . Las funciones de onda correspondientes (cuya expresión veremos enseguida) están acomodadas en el espacio de manera que el eje z es la dirección de \vec{B} , y las energías están levemente modificadas con una corrección respecto del valor sin campo dada por:

$$\Delta E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = m \frac{e}{2m_e} \hbar B \quad (11)$$

Esto nos dice que las transiciones consideradas aquí, que siempre serán del subnivel $n = 5$, $l = 2$, al $n = 5$, $l = 1$, tendrán la energía que corresponde a esa transición sin campo (que llamaremos $E_0 = \hbar\omega_0$), más una corrección proporcional al campo dada por:

$$\Delta m \frac{e}{2m_e} \hbar B \quad (11')$$

Lo cual nos dice que las transiciones con $\Delta m = 0$, mantendrán la frecuencia que tenían sin campo (ω_0), mientras que las que tengan $\Delta m = +1$ la aumentarán levemente en la misma medida que la disminuirán las que tengan $\Delta m = -1$. Es decir que la línea espectral se descompone en tres, que analizaremos oportunamente.

Las funciones de onda

Las funciones de onda para el electrón en el potencial de un núcleo en función de los números cuánticos n , l , m , son:

$$\Psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (12)$$

Donde Y_l^m son los Armónicos Esféricos.

La función radial esta dada por:

$$R_{n,l}(r) = \left(\frac{2}{na_0} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na_0) \quad (13)$$

Siendo a_0 el “radio de Bohr”, y L_p^q los “Polinomios Asociados de Laguerre”, cuyas expresiones, para los casos particulares que nos interesan son³:

$$L_3^3(X) = 14400 - 10800X + 2160X^2 - 120X^3 \quad (14)$$

$$L_2^5(X) = 105840 - 35280X + 2520X^2 \quad (15)$$

Y por último, los Armónicos Esféricos que utilizaremos son:

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \quad Y_1^{\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi} \quad (16)$$

³ Hay una definición general de estos polinomios, que puede encontrarse en la literatura citada [1]...[4]. Cuando los índices p y q adoptan los valores $\{3,3\}$ y $\{2,5\}$, se obtienen estas expresiones (14) y (15).

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1) \quad Y_2^{\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\varphi} \quad Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi} \quad (17)$$

Todas estas funciones son exactas para el átomo hidrogenoide. Las perturbaciones de los demás electrones afectarían mucho el valor del nivel de energía, que no nos interesa calcular aquí, y también afectan la parte radial, pero prácticamente no afectan la parte angular, que es la que utilizaremos.

Por otra parte vale decir que no se está considerando el espín del electrón porque este electrón mantiene apareado el espín con el del otro electrón del nivel $n = 5$, $l = 0$, $m = 0$, y así el conjunto funciona como un sistema de espín total $S = 0$.

Con estas funciones ahora podemos proceder a calcular los valores de expectación de las componentes de $\vec{p} = -e(r\sin\theta\cos\varphi, r\sin\theta\sin\varphi, r\cos\theta)$, en hipotéticos estados mezcla de los estados estacionarios inicial y final de cada transición.

Transiciones con $\Delta m = 0$.

Hay tres transiciones posibles con $\Delta m = 0$: $\psi_{5,2,1} \rightarrow \psi_{5,1,1}$, $\psi_{5,2,0} \rightarrow \psi_{5,1,0}$, y $\psi_{5,2,-1} \rightarrow \psi_{5,1,-1}$, todas con la misma frecuencia $\omega_0 = (E_{5,2} - E_{5,1})/\hbar$, independiente del valor del campo magnético.

Para cualquiera de ellas apliquemos (6) para calcular $\langle p_x \rangle$, $\langle p_y \rangle$, y $\langle p_z \rangle$ para un estado mezcla con dos hipotéticos coeficientes, a , del estado $\psi_{5,2,m}$, y b , del $\psi_{5,1,m}$.

En la expresión (6) es fácil verificar que las partes angulares del momento dipolar hacen anular cualquiera de las integrales $\int |\psi_{n,l,m}|^2 x_i d^3x$ (esto es fácil de recordar: *ningún estado estacionario del electrón en el átomo tiene momento dipolar eléctrico*).

Ahora resta evaluar: $a^* b e^{i(\omega_a - \omega_b)t} \int \psi_a^* \psi_b x_i d^3x + (a^* b e^{i(\omega_a - \omega_b)t} \int \psi_a^* \psi_b x_i d^3x)^*$

Comencemos considerando una de las integrales de esta expresión, para, por ejemplo, $p_z = -e r \cos\theta$:

$$-e \int R_{52}(r) R_{51}(r) r^3 dr \int Y_2^m Y_1^{m*} \cos\theta \sin\theta d\theta d\varphi$$

La integral sobre r dará un valor que denominaremos ρ_{21} y será común a todas las transiciones que vamos a evaluar. No interesa calcularlo, pero puede hacerlo el lector interesado – lo único que importa aquí es que no sea cero.

De manera que la expresión completa para $\langle p_z \rangle$ será:

$$\langle p_z \rangle = -e\rho_{21} \left(a^* b e^{i(\omega_a - \omega_b)t} \int Y_2^{m*} Y_1^m \cos\theta d\Omega + (a^* b e^{i(\omega_a - \omega_b)t} \int Y_2^{m*} Y_1^m \cos\theta d\Omega)^* \right)$$

Para las integrales angulares hay 3 posibilidades, pero todas ellas tienen la misma dependencia azimutal: son independientes de φ ; de manera que la integral sobre φ simplemente las multiplica por 2π , y se tiene:

$$\text{Para } m = 0: \int Y_2^0 Y_1^{0*} \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{2}{\sqrt{15}}$$

$$\text{Para } m = \pm 1: \int Y_2^{\pm 1} Y_1^{\pm 1*} \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{1}{\sqrt{5}}$$

De manera que, finalmente:

$$\text{Para } m = 0, \langle p_z \rangle = -e \rho_{21} \frac{2}{\sqrt{15}} \cos((\omega_a - \omega_b)t + \alpha)$$

$$\text{Para } m = \pm 1, \langle p_z \rangle = -e \rho_{21} \frac{1}{\sqrt{5}} \cos((\omega_a - \omega_b)t + \alpha)$$

Donde α es la fase que introducen los coeficientes a y b, dado que todas las integrales que intervienen son reales (para otras transiciones esto puede cambiar, y habrá una fase que también introducen las integrales, lo cual no cambia esencialmente nada).

Para $\langle p_x \rangle$ y $\langle p_y \rangle$ es fácil ver que son nulas, ya que hay que cambiar $\cos \theta$ por $\sin \theta$ en el factor que aporta cada componente del momento bipolar a las integrales anteriores, y se verifica que:

$$\int Y_2^0 Y_1^{0*} \sin^2 \theta d\theta d\varphi = 0$$

$$\int Y_2^{\pm 1} Y_1^{\pm 1*} \sin^2 \theta d\theta d\varphi = 0$$

Todo esto muestra por cálculo explícito *que estas transiciones corresponden a un dipolo eléctrico oscilando armónicamente a lo largo de z, que es la dirección del campo magnético.*

$$\langle p_x \rangle = \langle p_y \rangle = 0$$

$$\langle p_z \rangle = \text{cte} \times \cos((\omega_a - \omega_b)t + \alpha) = \text{cte} \times \cos(\omega_0 t + \alpha)$$

Transiciones con $\Delta m = \pm 1$.

Hay tres transiciones posibles con $\Delta m = 1$: $\Psi_{5,2,-2} \rightarrow \Psi_{5,1,-1}$, $\Psi_{5,2,-1} \rightarrow \Psi_{5,1,0}$, y $\Psi_{5,2,0} \rightarrow \Psi_{5,1,1}$, todas con la misma frecuencia $\omega_0 - \frac{e}{2m_e} \hbar B$

Veamos ahora $\langle p_x \rangle$ para el hipotético estado mezcla con coeficientes a y b.

$$\langle p_x \rangle = -e \rho_{21} \left(a^* b e^{i(\omega_a - \omega_b)t} \int Y_2^{m*} Y_1^{m+1} \sin \theta \cos \varphi d\Omega + \left(a^* b e^{i(\omega_a - \omega_b)t} \int Y_2^{m*} Y_1^{m+1} \sin \theta \cos \varphi d\Omega \right)^* \right)$$

Donde la integral sobre r ha sido reemplazada por ρ_{21} del mismo cálculo anterior.

Veamos las integrales angulares. Hay tres, una para cada m.

$$\int Y_2^{-2} Y_1^{-1*} \sin^2 \theta \cos \varphi d\theta d\varphi = \int \frac{3\sqrt{5}}{16\pi} \sin^5 \theta \cos \varphi e^{-i\varphi} d\theta d\varphi = \frac{\sqrt{5}}{5}$$

$$\int Y_2^{-1} Y_1^{0*} \sin^2 \theta \cos \varphi d\theta d\varphi = \int \frac{3\sqrt{5}}{4\sqrt{2}\pi} \sin^2 \theta \cos^2 \theta \cos \varphi e^{-i\varphi} d\theta d\varphi = \frac{3\sqrt{5}}{4\sqrt{2}}$$

$$\int Y_2^0 Y_1^{1*} \sin^2 \theta \cos \varphi d\theta d\varphi = \int \frac{\sqrt{15}}{16\sqrt{2}\pi} \sin^3 \theta (3\cos^2 \theta - 1) \cos \varphi e^{-i\varphi} d\theta d\varphi = \frac{\sqrt{30}}{30}$$

De manera que, tomando la parte real, y considerando la fase α que introduce el producto a^*b , se tiene:

$$\langle p_x \rangle = \text{cte} \times \cos((\omega_a - \omega_b)t + \alpha) = \text{cte} \times \cos((\omega_0 + e\hbar B/2m_e)t + \alpha)$$

Donde la constante es diferente para cada m .

Ahora bien, para calcular $\langle p_y \rangle$ solamente hay que cambiar $\cos \varphi$ por $\sin \varphi$ en las integrales anteriores, y eso solamente cambia la parte azimutal de la integral, cuyo resultado fue π en las tres, y ahora será $-\pi$. De manera que el cambio con respecto a las integrales anteriores será la fase: $\alpha \rightarrow \alpha - \frac{1}{2}\pi$.

Por lo cual:

$$\langle p_y \rangle = \text{cte} \times \cos((\omega_a - \omega_b)t + \alpha - \pi/2) = \text{cte} \times \sin((\omega_0 + e\hbar B/2m_e)t + \alpha)$$

Donde las constantes tienen los mismos valores que para $\langle p_x \rangle$, diferentes para cada m .

Por último es inmediato ver que $\langle p_z \rangle = 0$ para cualquiera de las transiciones, porque la parte azimutal es $e^{-i\varphi}$ para todas las integrales, y entonces la integral sobre φ da cero.

Es decir que ahora vemos por cálculo explícito *que estas transiciones corresponden a un dipolo eléctrico con movimiento circular uniforme en el plano perpendicular al campo magnético, con una velocidad angular $\omega_0 + e\hbar B/2m_e$.*

Por último, para $\Delta m = -1$, se tendrán las mismas integrales con el único cambio $e^{-i\varphi} \rightarrow e^{+i\varphi}$, de manera que el resultado será que el dipolo girará en sentido contrario al anterior en el mismo plano perpendicular al campo, con velocidad angular $\omega_0 - e\hbar B/2m_e$.

A partir de estos resultados, consideraciones básicas de radiación dipolar permiten determinar cómo es la polarización esperada de cada una de las tres líneas de emisión que se detectan en presencia de campo magnético.

Citas

- [1].- N. Zettili. *Quantum Mechanics. Concepts and Applications*. 2ª Ed. J. Wiley & Sons, Chichester, 2009.
- [2].- D. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. 2ª. Ed. Pearson Prentice Hall, Nueva Jersey, 2005.
- [3].- R. Shankar. *Principles of Quantum Mechanics*. 2ª. Ed. Plenum Press, Nueva York y Londres, 1994.

[4].- Eugen Merzbacher. *Quantum Mechanics*. 2º Ed. Wiley Internacional Edition.

[5].- Stephen Hawking, Leonard Mlodinow. *El gran diseño*. Edición para el Cono Sur Ed. Paidós SAICF. Buenos Aires.