

Funciones de densidad de probabilidad dependientes del tiempo en una transición radiativa

EFRAIM BARBOSA Y FABIO GONZÁLEZ

Departamento de Física

Universidad Nacional de Bogotá, Colombia

Recibido el 21 de abril de 1992; aceptado el 14 de enero de 1993

RESUMEN. Usando funciones de onda del átomo de hidrógeno calculadas suponiendo que la distribución electrónica de carga tiene un momento de dipolo eléctrico que irradia energía electromagnética de acuerdo con las ecuaciones de Maxwell, hemos estudiado la transición del estado $3D_{5/2}$ al estado $2P_{3/2}$, de un electrón en un átomo de hidrógeno. Se elaboró por computador un video que muestra la evolución temporal de la densidad de probabilidad durante la transición. En este video se ve fácilmente que el máximo de la densidad de probabilidad se mueve en una trayectoria casi circular, con una frecuencia angular igual a la de la luz emitida. La simulación que hemos realizado se puede utilizar para dar soporte conceptual adicional al desarrollo de las teorías de la interacción entre la materia y la radiación.

ABSTRACT. Using hydrogen time-dependent wave functions, calculated under the assumption that the electronic charge distribution has an electric dipole which radiates electromagnetic energy according to the Maxwell's equations, we study the transition from the atomic state $3D_{5/2}$ of a one electron atom to the state $2P_{3/2}$. A computer video showing the time evolution of the probability density during the transition has been made. In this video it is easily seen that the maximum of the probability density, moves in a nearly circular path with an angular frequency equal to that of the emitted light. We can use this computer simulation, to give additional support to a wave mechanical conceptual basis for the further development of the theories of the interaction between matter and radiation.

PACS: 03.65.-w; 32.80.-t; 03.65.Sq

1. INTRODUCCIÓN

Cuando un átomo hace una transición de un estado superior a uno inferior, emite radiación con una frecuencia angular aproximadamente igual a la diferencia entre las energías de los dos estados dividida por \hbar . En realidad, la transición no ocurre instantáneamente sino que dura cierta cantidad de tiempo denominada la vida media del estado excitado. La vida media depende del elemento matricial del dipolo eléctrico entre los dos estados. En el caso del átomo de hidrógeno, esta vida media ha sido calculada para diversas transiciones en varios artículos y libros. Resultados teóricos [1-2] y experimentales [3] muestran que la vida media del estado excitado $3D_{5/2}$ es aproximadamente 15 ns.

Estrictamente deberíamos calcular la distribución espacial de la carga electrónica utilizando las soluciones de la ecuación de Dirac relativista. Sin embargo, hemos usado la solución de la ecuación de Schrödinger no relativista, porque la diferencia entre las dos soluciones es muy pequeña.

En la Sec. 3, seguiremos una formulación teórica basada en la aproximación de Weisskopf y Wigner [4] para obtener una función de onda dependiente del tiempo asociada con el electrón durante la transición. De acuerdo con esta aproximación, un electrón ligado a un átomo, tiene una función de onda dependiente del tiempo, que para el caso del átomo de hidrógeno se puede escribir explícitamente en términos de funciones bien conocidas.

En las Secs. 4 y 5, describiremos la forma como se hizo por computador, un video que simula la transición $3D_{5/2} - 2P_{3/2}$ en el átomo de hidrógeno. En esta simulación, se observa que la densidad de probabilidad rota con una frecuencia igual a la de la luz emitida. De este resultado concluimos en la última sección, que las similitudes entre la emisión de un fotón por un átomo y la emisión de ondas electromagnéticas por una antena dipolar, puede ser más fundamental de lo que pensábamos anteriormente.

2. HAMILTONIANO DEL SISTEMA ÁTOMO-RADIACIÓN

El hamiltoniano de un átomo que interactúa con un campo de radiación se puede escribir como

$$H = H_{\text{átomo}} + H_{\text{radiación}} - \frac{e}{m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \frac{e^2}{2m} A^2, \quad (1)$$

donde \mathbf{A} es el potencial vectorial a partir del cual se deducen los campos electromagnéticos que constituyen la radiación.

Para campos de intensidad baja, el último término que contiene A^2 se puede despreciar. Este es obviamente el caso cuando el átomo emite radiación espontáneamente. El término que contiene A^2 desempeña un papel muy importante en casi todos los problemas que involucran láseres, pero en este artículo no se considerarán dichos problemas.

Nos restringiremos a los campos muy débiles que constituyen el fotón emitido espontáneamente por un átomo en un estado excitado. Por consiguiente, en una primera aproximación, el término de interacción $-(e/m)\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ se puede considerar como una perturbación.

Las transiciones atómicas entre los diferentes estados de los átomos libres, son inducidas por el término de interacción en el hamiltoniano del sistema compuesto por los átomos y el campo de radiación.

La bien conocida teoría de perturbaciones dependiente del tiempo, que es válida solamente para intervalos de tiempo muy cortos después de que la transición ha comenzado, no se puede utilizar para describir completamente una transición radiativa.

Para simplificar, suponemos de acuerdo con todos los hechos experimentales conocidos, que en la transición sólo están involucrados un estado inicial $|a\rangle$ y un estado final $|b\rangle$, ambos estacionarios.

3. LA APROXIMACIÓN DE WEISSKOPF-WIGNER

Los estados propios $|s\rangle$ del hamiltoniano no perturbado $H_0 = H_{\text{átomo}} + H_{\text{radiación}}$ que no tiene en cuenta la interacción entre la radiación y la materia, se pueden usar como

estados base del espacio vectorial que contiene todos los estados del sistema interactuante completo. Los coeficientes de la expansión del vector de estado correspondiente al sistema interactuante átomo-radiación evolucionan en el curso del tiempo de acuerdo con las conocidas ecuaciones [5]

$$i\hbar \frac{dc_n}{dt} = \sum_s \langle n | H_1 | s \rangle e^{i\omega_{ns}t} c_s(t), \tag{2}$$

donde $H_1 = -(e/m)\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ es la parte del hamiltoniano que describe la interacción entre el átomo y la radiación circundante.

En el marco de la aproximación de Weisskopf-Wigner, buscamos una solución de (2), partiendo de la condición inicial en la cual el sistema está en un estado $|a, 0\rangle$ que no contiene ningún fotón en el campo de radiación. Debido a la evolución temporal de Schrödinger, este estado cambia al estado final $|b, 1\rangle$ que contiene solamente un fotón en el campo de radiación con una energía $E_a - E_b$, igual a la diferencia de energía entre los dos estados atómicos $|a\rangle$ y $|b\rangle$. Supondremos además que existe una correlación altísima entre los estados de los electrones y los estados de los fotones, de manera que si conocemos el estado del electrón automáticamente conocemos el estado del fotón. Esta suposición se justifica con base en los muchos resultados experimentales que hasta ahora se tienen a nuestra disposición.

El fotón emitido no tiene una frecuencia definida, sino que se crea en un estado que es una combinación lineal de distintos estados del fotón, cada uno de los cuales corresponde a una frecuencia diferente de un modo del campo electromagnético. Por consiguiente si hacemos un análisis espectral de la luz emitida por los átomos, esperamos que haya una distribución de frecuencias que contribuyan a la formación del fotón emitido. Esta distribución de frecuencias es aproximadamente lorentziana.

Nuestra consideración del fotón emitido durante una transición como un paquete que contiene muchísimas frecuencias, no es la usual que aparece en la teoría cuántica corrientemente aceptada del campo de radiación, donde se entiende que los fotones son los cuantos correspondientes a los modos normales del campo electromagnético. Esta imagen del fotón como una superposición de muchos estados monocromáticos es reminiscente el sentido del término fotón que fue introducido originalmente por Lewis [6]. Sostenemos explícitamente que lo que constituye el fotón, es un paquete de ondas que contiene muchas frecuencias, y no una onda plana monocromática como se acepta generalmente.

En este artículo no discutiremos ninguno de los detalles acerca de la naturaleza del fotón emitido. Solamente mostraremos la manera como se hizo una representación gráfica animada de las densidades de probabilidad electrónicas dependientes del tiempo, durante una transición radiativa. Tomaremos la aproximación de Weisskopf-Wigner como la base matemática y física para nuestro modelo de la interacción átomo-radiación durante una transición radiativa espontánea.

Para incluir la dependencia temporal de los estados del electrón en un átomo, dentro de la aproximación de Weisskopf-Wigner, podemos hacer consecuentemente el *Ansatz* (vocablo alemán para indicar una hipótesis de partida) de que los estados del electrón

dependientes del tiempo se pueden escribir como

$$|\psi\rangle = e^{-\frac{1}{2}\gamma t}|a\rangle + \sqrt{1 - e^{-\gamma t}}|b\rangle, \tag{3}$$

donde γ es una constante que depende del elemento matricial del dipolo entre los dos estados. Esta constante es igual al inverso de la vida media τ del estado excitado superior $|a\rangle$.

En el *Ansatz* de arriba que ha sido obtenido de la solución de la Ec. (2) de Weisskopf-Wigner para el sistema átomo-radiación, hemos despreciado las correcciones muy pequeñas a la frecuencia ω , debidas al efecto de Lamb.

Por conveniencia para tener un modelo matemático satisfactorio de las funciones de onda del electrón, hemos tomado el sistema completo átomo-radiación, pero en este artículo hemos restringido nuestros estudios a la representación de la parte atómica de los estados.

Por el momento estamos interesados en una visualización de la evolución temporal de la densidad de probabilidad del electrón; por consiguiente hemos realizado una animación por computador que simula la importante transición alfa Balmer del estado $|a\rangle = |3, 2, 5/2\rangle$ al estado $|b\rangle = |2, 1, 3/2\rangle$ del electrón en el átomo de hidrógeno.

4. LAS FUNCIONES DE ONDA DEL ÁTOMO DE HIDRÓGENO DEPENDIENTES DEL TIEMPO

Para el caso especial simplificado de un electrón en un átomo de hidrógeno, en la representación de coordenadas, podemos escribir con muy buena aproximación la función de onda electrónica durante una transición de estado $|a\rangle = |3, 2, 5/2\rangle$ al estado $|b\rangle = |2, 1, 3/2\rangle$:

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta, \varphi, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left\{ \frac{e^{-\frac{1}{2}\gamma t}}{162} r^2 e^{-r/3} \text{sen}^2 \theta e^{2i\varphi - iE_3 t/\hbar} \right. \\ \left. + \frac{\sqrt{1 - e^{-\gamma t}}}{8} r e^{-r/2} \text{sen} \theta e^{i\varphi - iE_2 t/\hbar} \right\}, \tag{4} \end{aligned}$$

donde E_3 y E_2 son las energías del electrón en los estados $3D_{5/2}$ y $2P_{3/2}$.

Por consiguiente para la densidad de probabilidad tenemos

$$\begin{aligned} |\psi(r, \theta, \varphi, t)|^2 = \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{e^{-\gamma t}}{(162)^2} r^4 e^{-2r/3} \text{sen}^4 \theta + \frac{(1 - e^{-\gamma t})}{8^2} r^2 e^{-r} \text{sen}^2 \theta \right. \\ \left. + \frac{e^{-\frac{1}{2}\gamma t} \sqrt{1 - e^{-\gamma t}}}{162 \times 4} r^3 e^{-5r/6} \text{sen}^3 \theta \cdot \cos(\omega t - \varphi) \right\}, \tag{5} \end{aligned}$$

donde $\omega = (E_3 - E_2)/\hbar$. Hemos escogido unidades atómicas donde el radio de Bohr se toma igual a la unidad.

Puesto que no es posible representar una densidad de probabilidad tridimensional directamente sobre una pantalla de salida de un computador, hemos decidido representar

los valores de la densidad de probabilidad como una función de los puntos del espacio x e y . Se dibujó en la pantalla una proyección simplificada de la densidad de probabilidad bidimensional independiente de z .

Con las suposiciones simplificatorias anteriores, la densidad de probabilidad como una función explícita del tiempo y de las coordenadas x e y , se puede escribir como

$$|\psi(x, y, t)|^2 = \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{e^{-\gamma t}}{(162)^2} (x^2 + y^2)^2 e^{-2\sqrt{x^2+y^2}/3} + \frac{1 - e^{-\gamma t}}{8^2} (x^2 + y^2) e^{-\sqrt{x^2+y^2}} + \frac{e^{-\frac{1}{2}\gamma t} \sqrt{1 - e^{-\gamma t}}}{162 \times 4} e^{-5\sqrt{x^2+y^2}/6} (x^2 + y^2) (x \cos \omega t + y \sen \omega t) \right\}. \quad (6)$$

El último término de esta función de densidad de probabilidad, muestra que su máximo rota con una frecuencia angular ω , que es igual a la frecuencia angular promedia del fotón emitido.

Suponiendo que la distribución de la carga eléctrica es directamente proporcional a la distribución de probabilidad, se puede calcular un momento de dipolo eléctrico del átomo. Podemos considerar el fotón emitido como una distribución de campos electromagnéticos generados por una antena dipolar atómica.

En realidad lo que tenemos es un dipolo atómico rotante, en lugar del simplemente oscilatorio que se ha descrito en algunos artículos y textos. Por ejemplo, en 1972 en un artículo sobre el concepto del fotón, Scully y Sargent [7], publicaron algunos dibujos que muestran los dipolos generados por las funciones de onda dependientes del tiempo. Algunos otros autores han publicado diversas imágenes de una función de onda oscilante durante una transición, pero ellas se limitan a descripciones relativamente sencillas de un dipolo oscilante.

Usando computadores modernos, nos fue posible hacer un video donde se simula la transición electrónica espontánea descrita por nuestro modelo relativamente simplificado, basado en la solución de Weisskopf-Wigner de la ecuación de Schrödinger del sistema interactuante átomo-radiación.

Confiamos en que esta visualización dependiente del tiempo nos ayude a lograr una mayor comprensión de la naturaleza ondulatoria de los electrones que se mueven alrededor del núcleo atómico.

5. PELÍCULA POR COMPUTADOR DE LA TRANSICIÓN $3D_{5/2} - 2P_{3/2}$

El estado del arte de la tecnología de graficación por computador, nos permite hacer imágenes de computador en las cuales podemos visualizar ondas de probabilidad que eran impensables anteriormente.

Para realizar una simulación de la transición $3D_{5/2} - 2P_{3/2}$ de un electrón en un átomo de hidrógeno, hemos hecho una secuencia de ciento treinta dibujos diferentes de la función de onda para diversos instantes adecuadamente espaciados en el tiempo. Para mostrar los cambios de amplitud y la rotación del máximo de la densidad de probabilidad dada por

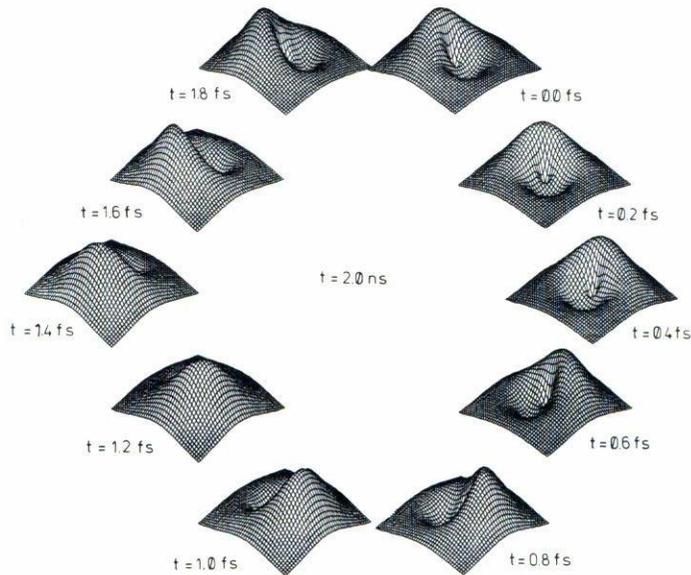


FIGURA 1. Gráficas de la densidad de probabilidad en tiempos dentro de un intervalo de 2 femtosegundos alrededor de 2 nanosegundos después de que la transición ha comenzado.

la Ec. (6), escogimos diez tiempos en una escala logarítmica que va de 0.25 ns a 128 ns. Puesto que el periodo de rotación es muy pequeño (aproximadamente 2 fs) generamos diez cuadros de una secuencia de animación para completar un ciclo de la “rotación de probabilidad” que aparece en el último término de la Ec. (6).

Nuestro sistema no es estrictamente periódico debido a que la amplitud cambia después de una vuelta completa; pero en una primera aproximación, tenemos movimientos periódicos para los tiempos seleccionados en los rangos dados anteriormente.

Pasando rápidamente por la pantalla del computador los cuadros anteriores (*page-flipping*), podemos percibir el movimiento de las ondas electrónicas como un movimiento continuo. Con 130 cuadros diferentes, se logró hacer una película satisfactoria. La película completa con más de mil cuadros, se hizo utilizando programas de graficación y de animación por computador que utilizan las técnicas denominadas en inglés *page flipping* [8-9]. El *hardware* que se utilizó fue un computador orientado hacia el video marca Amiga, donde se pudieron pasar 10 cuadros por segundo dando una sensación de continuidad del proceso.

La Fig. 1 muestra las gráficas correspondientes a la simulación descrita anteriormente a los 2 ns de haberse iniciado el proceso de radiación. Se ve fácilmente que el “centro de probabilidad” se mueve en una trayectoria casi circular.

La Fig. 2 muestra la evolución de la “amplitud” de las ondas de probabilidad en una escala de tiempo logarítmica. En esta segunda figura, se hicieron todas las gráficas para el mismo valor de la fase, la cual cambia muy rápidamente. Se muestra cómo el sistema evoluciona desde el estado inicial $3d$ hasta el estado final $2p$.

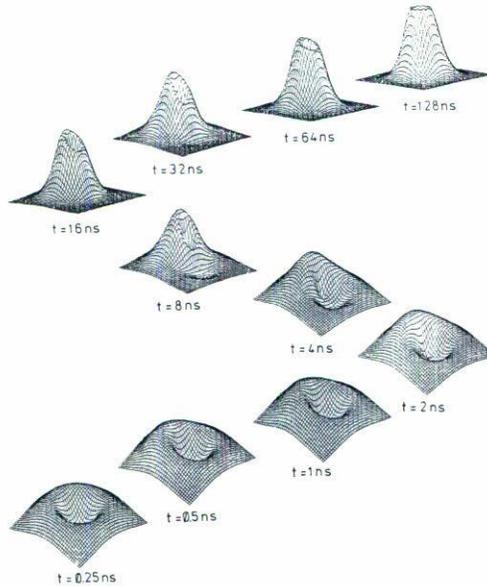


FIGURA 2. Gráficas de la densidad de probabilidad en tiempos entre 0.25 y 128 nanosegundos.

6. CONCLUSIÓN

Dentro de la aproximación de Weisskopf-Wigner, la radiación emitida por los átomos no decae exponencialmente como se afirma usualmente de acuerdo con las predicciones basadas en cálculos perturbativos de orden bajo. La potencia emitida es proporcional al cuadrado del momento de dipolo eléctrico de la distribución electrónica de carga.

En nuestro video podemos ver que la onda de probabilidad electrónica “gira” con una amplitud creciente y luego de cierto tiempo del orden de 40 ns disminuye exponencialmente al aproximarse al estado inferior.

Después de un largo tiempo (a la escala atómica) se llega al estado inferior y el átomo no radia más. De las imágenes animadas del video, estamos seguros de que después de 128 ns, las amplitudes de oscilación de las densidades de carga electrónica son tan pequeñas que podemos despreciar cualquier potencia electromagnética que contribuya a la energía del campo del fotón emitido. Con la densidad de probabilidad rotante podemos asociar inmediatamente un momento de dipolo eléctrico rotante.

Como en todas las teorías neoclásicas sobre la interacción entre la materia y la radiación, creemos que el momento de dipolo eléctrico rotante asociado con la densidad de probabilidad electrónica cambiante, genera una configuración de campos electromagnéticos, que se puede calcular de acuerdo con las reglas dadas por las ecuaciones clásicas de Maxwell. Por consiguiente podemos considerar el fotón como la configuración de campos electromagnéticos emitidos por una antena dipolar atómica cambiante. Esta consideración nos da una clara conexión entre la física clásica y la física cuántica en el ámbito de los fenómenos electromagnéticos. En efecto, la mayoría de los fenómenos electromagnéticos que involucran la interacción de la radiación con la materia, se pueden explicar de manera

semiclásica, y por esta razón, un número creciente de investigadores en el campo de la óptica cuántica cuestionan la necesidad de la cuantización del campo electromagnético.

Otra conexión entre la teoría cuántica y la teoría clásica en el caso del problema kepleriano, que no involucra emisión de radiación, fue mostrada en 1989 en una película de computador realizada por Nauenberg [10] y sus colaboradores. Sin embargo, nosotros pensamos que las relaciones más estrechas entre la física clásica y la física cuántica se deben buscar en los resultados de los análisis detallados de los fenómenos electrodinámicos que ocurren en las interacciones entre los átomos y la radiación.

Además es interesante anotar que en la transición que hemos estudiado, el momento angular que pierde el electrón es transferido al fotón emitido.

En el caso de la transición espontánea $3D_{5/2} - 2P_{3/2}$ considerada en este artículo, durante un intervalo de tiempo de aproximadamente 11 ns al comienzo de la transición, la potencia aumenta hasta un máximo. Sólo después de 40 ns, tenemos el muy conocido decaimiento exponencial de la potencia radiada.

Por tanto, de acuerdo con nuestro modelo de emisión espontánea, estamos estableciendo que en las transiciones atómicas radiativas, no tenemos un decaimiento exponencial de las oscilaciones de la densidad de probabilidad electrónica. Así pues, el espectro de frecuencias del fotón emitido no es estrictamente lorentziano. Este es el punto crucial donde nuestro modelo podría ser susceptible de verificación experimental.

En el corto plazo, parece ser muy difícil de realizar mediciones directas de la densidad de probabilidad dependiente del tiempo que nosotros hemos visualizado, pero pequeñas desviaciones de la forma lorentziana del espectro del fotón emitido, se pueden buscar por medio de técnicas espectroscópicas en el dominio del tiempo o en el dominio de la frecuencia. La investigación en esta dirección es muy importante porque debemos ser capaces, no solamente de verificar las diferentes teorías con aproximaciones que describen la interacción átomo-radiación con exactitudes cada vez mayores, sino también ser capaces de poner a prueba la validez de la representación ortodoxa del electrón como una onda de probabilidad dependiente del tiempo y sus relaciones con el fotón radiado.

AGRADECIMIENTOS

Le agradecemos a Diego Buriticá y a Roberto Martínez las observaciones críticas al manuscrito.

REFERENCIAS

1. M. Mizushima, *Quantum Mechanics of Atomic Spectra and Atomic Structure*, W.A. Benjamin, Inc., Nueva York (1970), p. 129.
2. R. Loudon, *The Quantum Theory of Light*, Clarendon Press Oxford (1973), p. 52.
3. A.S. Goodman D.J. Donahue, *Phys. Rev.* **141** (1966) 1.
4. V.F. Weisskopf and E. Wigner, *Z. Physik*, **63** (1930) 54.
5. W.H. Louisell, *Radiation and Noise in Quantum Electronics*, McGraw-Hill Book Company, Nueva York (1964), pp. 191-197.
6. G.N. Lewis, *Nature* **118** (1926) 874.
7. M.O. Scully and M. Sargent III, *Phys. Today* **25** (3), (1972) 38.

8. D. Silva, *Deluxe Paint III*, Electronic Arts, San Mateo CR, (1989).
9. K. Doyle, *The Director*, The Right Answers Group, Torrance, CA (1987).
10. M. Nauenberg, *Phys. Rev.* **40A** (1989) 1133.