Estructura de la materia 3
2^{do} Cuat. 2021

<u>Práctica 2</u>
Interacción luz-materia

Serie 2. Reglas de selección,transiciones dipolares.

1. a) Demuestre, calculando la integral, que el elemento de matriz de transición dipolar $\int \psi_{1s}^{*} \boldsymbol{r} \psi_{2s} \, \mathrm{d}\tau$ de la transición $1S \to 2S$ en el átomo de H es cero.

   b) Calcule la probabilidad de transición A de $2P \to 2S$.

   Usar para ambos items las funciones de onda del H.

2. Mostrar que la paridad del estado inicial y del final en transiciones dipolares tiene que ser distinta.

3. Las funciones de onda de un atomo hidrogenoide se pueden escribir de la siguiente forma:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = F(r, \theta) \exp(\mathrm{i} m_l \varphi)$$

   Considerar una transición dipolar entre un estado con proyección del momento angular m a un estado con m'. Considerando la integral sobre φ, mostrar que el elemento de matriz es cero excepto en los siguientes casos:

   (a) $m' = m$ para luz con polarización $\hat{\mathbf{z}}$;

   (b) $m' = m + 1$ para luz con polarización σ^{+} $(\hat{\mathbf{x}} + \mathrm{i}\hat{\mathbf{y}})$;

   (c) $m' = m - 1$ para luz con polarización σ^{-} $(\hat{\mathbf{x}} - \mathrm{i}\hat{\mathbf{y}})$;

   (d) $m' = m \pm 1$ para luz con polarización $\hat{\mathbf{x}}$ o $\hat{\mathbf{y}}$.

4.  Especifique si existe un termino multipolar dominante (E1, M1, E2...) para la emisión espontánea de fotones por un electrón excitado en cada una de las siguientes transiciones. Supongamos funciones de onda hidrogénicas simples sin correcciones relativistas o de otro tipo.

$$2\ \mathrm{p}_{1/2} \to 1\ \mathrm{s}_{1/2}$$
$$2\ \mathrm{s}_{1/2} \to 1\ \mathrm{s}_{1/2}$$
$$3\ \mathrm{d}_{3/2} \to 2\ \mathrm{s}_{1/2}$$
$$2\ \mathrm{p}_{3/2} \to 2\ \mathrm{p}_{1/2}$$
$$3\ \mathrm{d}_{3/2} \to 2\ \mathrm{p}_{1/2}$$

   En caso de no existir termino multipolar dominante ¿Cómo podría producirse la transición?

5. Considere un átomo con una transición dipolar entre un nivel con momento angular total J y uno inferior con $J' = J - 1$. Dada la tasa total de emisión espontanea Γ, el problema consiste en encontrar las tasas de las distintas transiciones permitidas, es decir, la fracción de la emisión que entra en cada una de las transiciones posibles $(J, m) \longrightarrow (J', m')$.

   Considerar el caso $J = 2,\ J' = 1$.

   a) ¿Cuantas transiciones posibles hay?

   b) Utilizando el teorema de Wigner-Eckart, calcular la tasa de emisión para cada transición.

Ayuda: teniendo en cuenta que la tasa para una transición $(J, m) \longrightarrow (J', m')$ debe ser la misma que para $(J, -m) \longrightarrow (J', -m')$ (¿Por qué), solo hace falta calcular las siguientes:

$$\begin{array}{ll} a: & m=2 \longrightarrow m'=1 \\ b: & m=1 \longrightarrow m'=1 \\ c: & m=0 \longrightarrow m'=1 \\ d: & m=1 \longrightarrow m'=0 \\ e: & m=0 \longrightarrow m'=0 \end{array}$$

c) ¿Cuánto vale la tasa total de decaimiento desde cada uno de los 5 niveles de $J = 2$ hacia $J' = 1$? Esto puede responderse sin utilizar lo calculado en b).

6. En este problema veremos una descripción cuántica de los procesos de radiación dipolar atómicos. Trabajaremos con estados S y P, y utilizamos las funciones de onda $\psi(x, y, z) = Q_l^m(x, y, z)R_{nl}(r)$. La parte radial R no es importante en este problema, y para simplificar las cuentas consideramos que absorbe todas las constates de normalización.

   a) Calcular la corriente de densidad de probabilidad $\vec{S} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*)$ para el estado $|S\rangle$ y para los tres estados $|P, m\rangle$. Haga un esquema de la corriente para los casos con $m = \pm 1$.

   b) Considere ahora el siguiente estado: $|\psi\rangle(t) = a(t)|S\rangle + b(t)|P, m = 0\rangle$. Calcular $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ y $\langle \hat{z}(t)\rangle$.

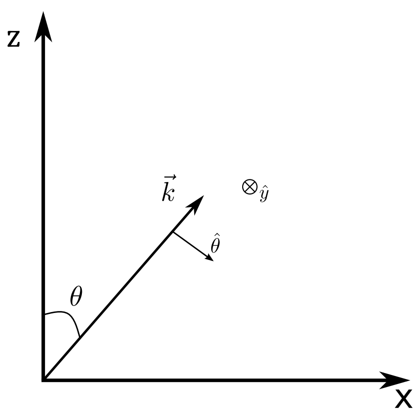
   c) Considere ahora que el estado $|P\rangle$ decae al $|S\rangle$ en un tiempo τ. Es decir, $b(t) = e^{-t/\tau}$ y $a(t) = 1 - b(t)$. Haga un gráfico cualitativo de $\langle \hat{z}(t)\rangle$. d) Repetir b) y c) para $|\psi\rangle(t) = a(t)|S\rangle + b(t)|P, m = \pm 1\rangle$, calculando $\left\langle \hat{\vec{r}}(t) \right\rangle$.

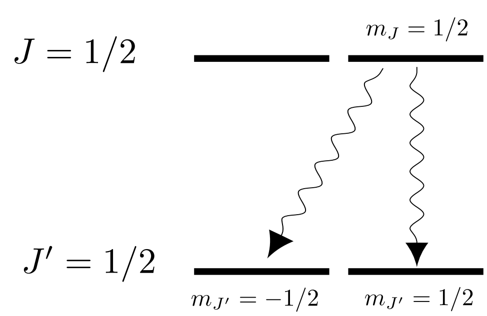
   En este problema, conviene utilizar las funciones Q_l^m en coordenadas cartesianas, dadas en la tabla:

l	m	$Q_l^m(x,y,z)$
0	0	1
1	-1	$x - iy$
1	0	z
1	1	$x + iy$

7. Distribución angular de la fluoresencia atómica.

   Se tiene un ensamble de átomos preparados en el subnivel $m'_J = 1/2$ de un estado excitado con momento angular $J' = 1/2$, desde el cual decaen espontáneamente a un estado inferior que también tiene $J = 1/2$. No se aplican campos externos.





   a) ¿Cuál es la distribución angular de la intensidad de la luz emitida por cada una de los dos posibles decaimientos?

   b) ¿Es isótropa la intensidad total de luz emitida?

   c) ¿Cómo es la polarización de la luz emitida en dirección $\hat{z}$? ¿Y en $-\hat{z}$?

8.

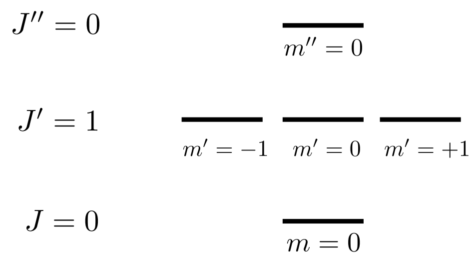
Se tiene un conjunto de átomos con tres niveles $J = 0$, $J' = 1$ y $J'' = 0$ como se ve en el esquema. Inicialmente se encuentran todos en el estado de $J = 0$. En este problema vamos a asumir que no hay decaimiento espontaneo.

a) Se aplica un pulso corto de luz sintonizado a la transición $J \longleftrightarrow J'$ con polarización $\hat{z}$. ¿Cómo será el estado de los átomos excitados al nivel J'?

b) Repetir a) para el caso de polarización $\hat{x}$.

c) En las condiciones del item b), mostrar que si se aplica un segundo pulso corto de luz sintonizado a la transición $J' \longleftrightarrow J''$ con polarización $\hat{x}$, el estado J'' puede poblarse, mientras que eso no sucede si el segundo pulso esta polarizado en $\hat{y}$. Es decir, el sistema se encuentra en un estado oscuro para la absorción de luz con polarización $\hat{y}$ en la transición $J' \longleftrightarrow J''$.

d) Considere de nuevo la situación del item b). Ahora, luego del pulso, se enciende un campo magnético $\vec{B} = B_0\hat{z}$. Calcule como será en función del tiempo la absorción de luz con polarización $\hat{y}$ en la transición $J' \longleftrightarrow J''$. ¿A qué frecuencia oscila?



9. Bombeo óptico.

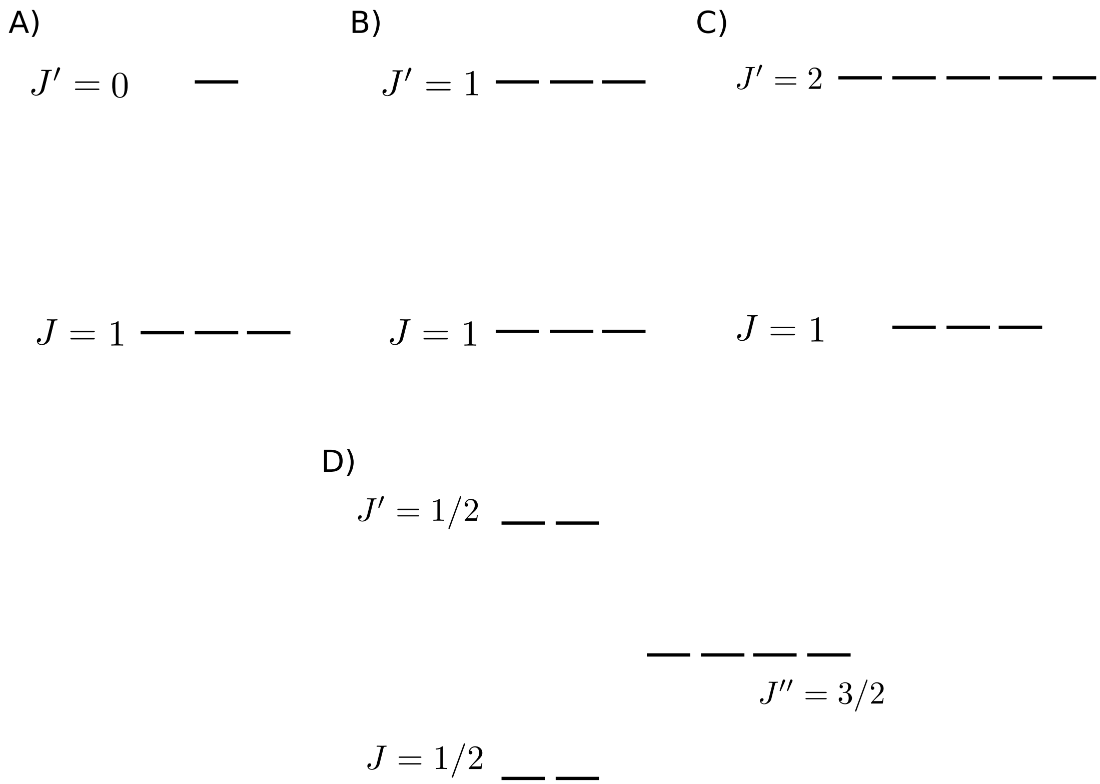
Se tiene un conjunto de átomos cuyo estado fundamental corresponde a un nivel con momento angular total J. Inicialmente el problema es completamente isótropo (es decir, el estado es una mezcla de las componentes m_J). Estudiaremos estructuras atómicas distintas, que se muestran en la figura.

Considerar los casos A, B y C de la figura, en donde el nivel con J' decae siempre al nivel con J. Se aplican sucesivamente pulsos de luz resonantes a la transición $J \longleftrightarrow J'$, siempre con polarización lineal de tal forma de inducir transiciones π.

a) Discutir en cada caso que sucederá con las poblaciones del estado fundamental. Identificar en cada caso qué estados serán "oscuros".

b) Repetir a) para luz circularmente polarizada que genere transiciones σ^+.

c) Considerar ahora el caso D, en donde el estado con J' puede decaer el nivel con J pero también a un estado metaestable con J''. Describir una posible secuencia de pulsos que prepare al sistema en el estado $|J'', m_{J''} = 3/2\rangle$. Pueden aplicarse secuencias de pulsos resonantes a ambas transiciones permitidas $J \longleftrightarrow J'$ y $J' \longleftrightarrow J''$, con cualquier combinación de polarizaciones.



Ayuda: en este problema no es necesario hacer cuentas ni calcular elementos de matriz, excepto para las transiciones $m_J = 0 \longleftrightarrow m'_J = 0$, ya que una de ellas es prohibida.