



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**Estudio de los Estados más Bajos del Átomo de
Hidrógeno en Campos Magnéticos y Transiciones
Radiativas**

T E S I S

**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)**

P R E S E N T A:

HORACIO OLIVARES PILÓN

TUTOR : DR. ALEXANDER TURBINER ROSENBAUM

**COMITÉ TUTORAL: DR. JUAN CARLOS LÓPEZ VIEYRA,
DR. JULIO HERRERA VELÁZQUEZ**



**posgrado en ciencias físicas
u n a m**

2007



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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.

AGRADECIMIENTOS

Deseo agradecer sinceramente al mi tutor el *Dr. Alexander Turbiner* por haber dirigido este trabajo de tesis. Por el mucho tiempo invertido en las discusiones sobre el tema y las correcciones en el desarrollo de la tesis. Así también, por sus valiosos comentarios tanto académicos como personales que sin duda me fueron de gran ayuda.

A los miembros del comité tutorial:

- Dr. Alexander Turbiner Rosenbaum
- Dr. Julio Herrera Velázquez
- Dr. Juan Carlos López Vieyra

y a los miembros del sínodo:

- Dr. Alexander Turbiner Rosenbaum
- Dr. Eugenio Ley Koo
- Dr. Dany Page Rollinet
- Dr. Horacio Martínez Valencia
- Dr. Nicolais Guevara León

por la lectura minuciosa y sus comentarios hechos, los cuales mejoraron el contenido de este trabajo.

Agradezco al *Dr. Juan Carlos López Vieyra*, por sus constantes comentarios e interés en el desarrollo de este trabajo, así como sus acertadas correcciones y observaciones las cuales me ayudaron a mejorar el contenido de la tesis.

Al *Dr. Nicolais Guevara León* por los comentarios y sugerencias hechos durante el desarrollo de la tesis.

Agradezco muy especialmente a mis padres *Celso Nazario Olivares Madrid* y *Agustina Pilon Montiel* por su paciencia y apoyo incondicional que nos han brindado durante tantos años.

Agradezco el apoyo económico brindado por CONACyT a través de la asignación de la beca de Maestría y la hospitalaria acogida del Instituto de Ciencias Nucleares el cual me facilitó el desarrollo de este trabajo.



Índice general

Introducción	1
El Régimen de Coulomb (electrón ligado)	2
El Régimen de Landau (electrón libre)	3
Escalas naturales de los campos magnéticos	4

Parte I

Espectro del Átomo de Hidrógeno en Campos Magnéticos

1. Iones Hidrogenoides	9
1.1. Campo Magnético Externo $B = 0$	9
1.1.1. Los Estados $1s_0$, $2p_0$ y $2p_{-1}$	11
1.2. En Presencia de un Campo Magnético $B \neq 0$	12
1.3. Escalamiento	14
2. Teoría Perturbativa: El Método de No-linealización	17
3. El Método Variacional	25
3.1. El Principio Variacional	25
3.2. Las Funciones de Prueba	28

3.3. La Energía de Amarre	31
3.4. Cálculos Computacionales	32
4. Espectro del Átomo de Hidrógeno	35
4.1. El Estado $1s_0$	36
4.2. El Estado $2p_{-1}$	38
4.3. El Estado $2p_0$	40
4.4. El Espectro	42
4.4.1. Campos Magnéticos Débiles	42
4.4.2. Campos Magnéticos Intensos	44

Parte II

Transiciones Radiativas	46
5. Transiciones Radiativas: Aproximación Dipolar Eléctrica	49
5.1. Teoría de Perturbaciones Dependiente del Tiempo	49
5.2. Interacción de Radiación con la Materia	50
5.3. Aproximación Dipolar Eléctrica	53
5.4. Cantidades Características de las Transiciones Radiativas	56
5.4.1. Iones Hidrogenoides: He^+ , Li^{2+} ,	58
5.5. Polarización de la Radiación	59
5.6. Reglas de Selección	61
5.7. Comportamiento de las Transiciones en los Casos Límite	62
5.7.1. Teoría de Perturbaciones: B pequeño	62
5.7.2. Comportamiento Asintótico: $B \rightarrow \infty$	64
6. Resultados	67
6.1. Transición $1s_0 \iff 2p_{-1}$	68
6.1.1. Fuerza Dipolar: $1s_0 \iff 2p_{-1}$	69
6.1.2. Fuerza de Oscilador: $1s_0 \iff 2p_{-1}$	70
6.1.3. Probabilidad de Transición: $1s_0 \iff 2p_{-1}$	71

6.2. Transición $1s_0 \iff 2p_0$	73
6.2.1. Fuerza Dipolar: $1s_0 \iff 2p_0$	74
6.2.2. Fuerza de Oscilador: $1s_0 \iff 2p_0$	75
6.2.3. Probabilidad de Transición: $1s_0 \iff 2p_0$	77
6.3. Longitud de Onda	78
Conclusiones	81
Apéndices	
A. El Estado $2p_1$	85
A.1. La Energía de Amarre	85
A.2. La Transición $1s_0 \iff 2p_1$	87
B. Orbitales de Landau	91
C. Unidades	95
C.1. Unidades Átomicas	95
C.2. Constantes (SI)	97
C.3. Armónicos Esféricos	97
C.4. Factores de Conversión	98
D. Cálculos	99
D.1. Teoría de Perturbaciones Dependiente del Tiempo	99
D.2. Emisión y Absorción de Radiación (Norma del Potencial Vectorial)	102
D.3. Integral	104
D.4. Densidad de Estados	105
Bibliografía	107



Introducción

Después del descubrimiento del neutrón en 1932 por J. Chadwick, ese mismo año L. Landau sugirió la existencia de una estrella compacta compuesta de neutrones. Tuvieron que pasar treinta y cinco años para que finalmente en 1967 Jocelyn Bell y A. Hewish detectaran la presencia de este tipo de estrellas. Sin embargo fue unos años antes (1964) que F. Hoyle, J. V. Narlikar y J. A. Wheeler, estudiando la emisión de Rayos X en la nebulosa del cangrejo, propusieron la existencia de campos magnéticos del orden de 10^{10} Gauss en la superficie de las estrellas de neutrones (ver por ejemplo el artículo de revisión [1]). Hoy se sabe que la intensidad del campo magnético en una estrella de este tipo varía entre $10^{12} - 10^{13}$ Gauss. No obstante, algunas estrellas de neutrones jóvenes, conocidas como magnetares, presentan campos magnéticos de hasta 10^{16} Gauss¹.

El descubrimiento de la existencia de campos magnéticos tan intensos dio origen al estudio de sistemas atómicos y moleculares en medios tan extremos. Más recientemente, en el año de 2002, las mediciones del observatorio espacial de rayos X Chandra indicaron la presencia de dos líneas de absorción en 0.7 keV y 1.4 keV en el espectro de la estrella de neutrones 1E1207.4-5209 [2]. Una posible explicación a estas líneas, es la presencia de sistemas exóticos de un solo electrón² como H_2^+ , H_3^{2+} , He^+ , $(HeH)^{2+}$ y He_2^{3+} en la atmósfera de la estrella de neutrones (ver [4] y [5]). Particular atención se ha puesto al estudio del átomo de hidrógeno en presencia de un campo magnético. Ello debido a la gran importancia de este sistema en diversas ramas de la física, como en astrofísica, física de plasmas y física de estado sólido, entre otras.

¹Desde la primera vez en que los magnetares fueron detectados en 1979, hasta el 2003, se han encontrado doce. Localizados en la Vía Láctea y en las Nubes de Magallanes.

²Un análisis detallado de los iones moleculares con un solo electrón en campos magnéticos se presenta en el artículo de revisión [3].

En este trabajo se realiza un estudio detallado del átomo de hidrógeno en presencia de un campo magnético y de las transiciones radiativas entre los niveles más bajos de su espectro. Es importante mencionar que entre los diferentes sistemas atómicos y moleculares con un electrón, el estudio de las transiciones radiativas solo se ha reportado para el caso del átomo de hidrógeno ([6], [7] y [8]) y el He^+ [9].

La organización general de la tesis esta dividida en dos partes. La primera parte se centra en el estudio del espectro del átomo de hidrógeno en campos magnéticos intensos, particularmente está enfocada en el estudio de los niveles $1s_0$, $2p_0$ y $2p_{-1}$. En la segunda parte se aborda el estudio de las transiciones electromagnéticas $2p_0 \longleftrightarrow 1s_0$ y $2p_{-1} \longleftrightarrow 1s_0$.

El Régimen de Coulomb (electrón ligado)

El estudio del átomo de hidrógeno (un protón y un electrón con una interacción Coulombiana), puede hacerse tan preciso como uno lo requiera. En una primera aproximación, la masa del protón se considera infinita, con lo cual, el bien conocido espectro de energía en unidades del Sistema Internacional (SI) es:

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m_e c^2 \alpha^2}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

donde α es la constante de estructura fina, c la velocidad de la luz y m_e la masa del electrón³.

Si consideramos que el protón realmente no se encuentra fijo, sino que su masa m_p es finita, la primera corrección resulta de tomar la masa reducida $\mu = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_p}}$ y no la masa del electrón.

Pero el electrón además de su movimiento alrededor del núcleo, tiene un espín, y con ello el momento angular total es $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Esto da origen a la llamada *interacción espín-órbita* corrigiendo la fórmula para la energía, a primer orden en teoría de perturbaciones, por el término (ver por ejemplo [10])

$$E_{eo}^{(1)} = \frac{E_n^2}{m_e c^2} \left\{ \frac{n[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)} \right\}.$$

Considerando ahora el movimiento relativista del electrón, la corrección que resulta a primer orden es (ver por ejemplo [10])

$$E_r^{(1)} = -\frac{E_n^2}{2m_e c^2} \left[\frac{4n}{l+1/2} - 3 \right].$$

³Estas constantes están definidas en el Apéndice C.2.

Estas dos correcciones de orden $\alpha^4 m_e c^2$ se denominan *estructura fina* del átomo de hidrógeno.

Al tomar en cuenta el espín del protón, se tiene la llamada *estructura hiperfina*. Esta corrección es de orden $\frac{m_e}{m_p} \alpha^4 m_e c^2$.

Así, se tiene una jerarquía en las correcciones al átomo de hidrógeno como

	orden
Átomo de Bohr	$\alpha^2 m_e c^2$
Estructura fina	$\alpha^4 m_e c^2$
Estructura hiperfina	$\frac{m_e}{m_p} \alpha^4 m_e c^2$

El Régimen de Landau (electrón libre)

Desde el punto de vista clásico, cuando un electrón en movimiento se coloca en una región de campo magnético B constante y homogéneo, éste describe una trayectoria helicoidal. La proyección de esta hélice sobre un plano perpendicular a la dirección del campo, corresponde a una circunferencia de radio

$$R_c = \frac{P_\perp}{eB}$$

donde P_\perp es la componente transversal del momento total del electrón (la componente z origina el desplazamiento uniforme en la dirección del campo), e la carga del electrón y B la intensidad del campo magnético. El radio R_c corresponde al llamado *radio de Larmor* (o radio ciclotrónico).

La descripción cuántica del electrón en un campo magnético constante y homogéneo⁴ conduce a la cuantización de la energía como

$$\begin{aligned}
 E_{N,m} &= \hbar\omega_c \left\{ N + \frac{1}{2} + \frac{m + |m|}{2} \right\} + \frac{P_z^2}{2m_e}, & (1) \\
 \omega_c &= \frac{eB}{m_e}, \\
 N &= 0, 1, 2, \dots \\
 m &= 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots
 \end{aligned}$$

donde N es el número cuántico de Landau, P_z y m las componentes del momento y del momento angular, respectivamente, en la dirección del campo magnético B .

⁴Ver Apéndice B

Esencialmente lo que se tiene es un oscilador armónico que describe su movimiento en el plano (x, y) transversal al campo magnético cuya frecuencia ω_c corresponde a la llamada *frecuencia ciclotrónica*. Además de un movimiento libre en la dirección del campo magnético, es decir en la dirección z . Los niveles de energía asociados con el movimiento transversal están igualmente espaciados, siendo el espaciamiento entre dichos niveles proporcional al campo magnético e igual a $\hbar\omega_c = \frac{\hbar e B}{m_e}$. Todos los niveles con número cuántico magnético $m \leq 0$ conducen al mismo valor de la energía, por lo que en este caso el sistema es infinitamente degenerado.

Tomando el valor correspondiente al estado de menor energía, es decir con $N = 0$, $m \leq 0$ y $P_z = 0$, tenemos que $E = \frac{\hbar\omega_c}{2}$. Aunque éste valor de la energía no corresponde a una trayectoria bien definida, vale la pena ver cuál es la magnitud del radio ciclotrónico clásico correspondiente a dicha energía.⁵ Por lo tanto el radio ciclotrónico clásico correspondiente al nivel de energía cuántico mas bajo es

$$R_c = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}},$$

Considerando el campo magnético en el rango $B = (2.3505 \times 10^{11} - 4.414 \times 10^{13})$ Gauss⁶, el radio ciclotrónico toma valores entre $R_c = (5.29 \times 10^{-11} - 3.86 \times 10^{-13})$ m. Y si comparamos con el radio de Bohr $a_0 = 5.29 \times 10^{-11}$ m resulta que en la dirección transversal a la dirección del campo magnético el movimiento del electrón se compacta a partir del radio Bohr a_0 hasta 140 veces en relación a su tamaño en ausencia de campo magnético en dicho intervalo de campos magnéticos.

Escalas naturales de los campos magnéticos

Cuando se dice que una cantidad física tiene una magnitud grande o pequeña, es necesario especificar respecto a qué se está comparando. En el caso de sistemas atómicos cuando se habla de un campo magnético, esta comparación se hace respecto al campo magnético interno del átomo de hidrógeno. Este campo magnético está determinado por el tamaño de la órbita del electrón, la cual corresponde a a_0 , el radio de Bohr. Así, nos gustaría saber para qué intensidad del campo magnético se puede obtener una órbita de “radio” igual a a_0 , es decir, $R_c = a_0$, con lo cual

$$R_c = \sqrt{\frac{\hbar}{eB_0}} = a_0,$$

⁵Es posible demostrar que dada la distribución de la función de probabilidad, el máximo de ésta coincide con el radio ciclotrónico.

⁶ 10^4 Gauss = 1 Tesla.

$$\Rightarrow B_0 = \frac{\hbar}{ea_0^2} \cong 2.3505 \times 10^9 \text{ G}.$$

La expresión anterior es de hecho la definición de unidad atómica del campo magnético. Cabe mencionar sin embargo, que la gran mayoría de autores han optado por utilizar la conversión $B_0 = 2.35 \times 10^9 \text{ G}$ como la unidad atómica para el campo magnético. Esto debe tomarse en cuenta cuando se realicen comparaciones entre los cálculos realizados por diferente autores. En este trabajo nos apegaremos a esta convención y se usará como factor de conversión $B_0 = 2.35 \times 10^9 \text{ G}$.

El estudio estará restringido al dominio de aplicabilidad de la teoría no relativista. Para obtener este límite, se busca que el espaciamiento en los niveles de energía de los estados del electrón en un campo magnético (orbitales de Landau) sea a lo mucho igual a la energía necesaria para la creación de un electrón⁷, es decir

$$\begin{aligned} \Delta E^{\text{Landau}} &= \frac{\hbar e B_{\text{Rel}}}{m_e} = m_e c^2, \\ B_{\text{Rel}} &= \frac{m_e^2 c^2}{\hbar e} \cong 4.414 \times 10^{13} \text{ G}. \end{aligned}$$

Así, éste valor del campo magnético (denominado comúnmente como límite de Schwinger) corresponde al límite máximo del campo en donde los efectos relativistas aun no son importantes.

⁷Estamos igualando cantidades físicas equivalentes, en este caso la energía ciclotrónica con el equivalente en energía de la masa en reposo del electrón. El que se tome solo la energía necesaria para la creación de una partícula y no del par e^-e^+ , asegura que nos encontramos en un dominio en el cual la ecuación de Schrödinger es aun aplicable.

Parte I

Espectro del Átomo de Hidrógeno en Campos Magnéticos

Iones Hidrogenoides

Entre los pocos sistemas que se pueden resolver exactamente, el átomo de hidrógeno es, sin duda, el más importante. Al estar constituido de un solo protón y un solo electrón con una interacción Coulombiana, es el sistema atómico más simple que existe en la naturaleza. Si consideramos iones hidrogenoides, es decir un sistema con Z protones en el núcleo y un solo electrón, aun es posible obtener una solución exacta.

1.1. Campo Magnético Externo $B = 0$

Como es bien sabido, en ausencia de campo magnético el hamiltoniano del ión hidrogenoide¹ en unidades del Sistema Internacional² es

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} + V(r) , \quad (1.1)$$

donde $V(r)$ es el potencial electrostático

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{r} , \quad (1.2)$$

$\hat{\mathbf{p}}$ el operador de momento lineal, m_e la masa, y e la carga del electrón, y Z el número atómico. Con el núcleo en el origen de coordenadas, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ representa la distancia entre el núcleo y el electrón. Utilizando el método de separación de

¹Se considera la aproximación de Born-Oppenheimer a orden cero, es decir que la masa del núcleo es infinita.

²Ver Apéndice C.2.

variables en coordenadas esféricas³ (ya que tenemos un potencial central), la ecuación de Schrödinger a resolver es

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi) . \quad (1.3)$$

Explícitamente

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} \right\} \Psi(r, \theta, \varphi) = [E - V(r)]\Psi(r, \theta, \varphi) , \quad (1.4)$$

donde $\hat{\mathbf{L}}^2$ es el cuadrado del operador de momento angular

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = - \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] ,$$

cuyas funciones propias son los armónicos esféricos $Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)$, *i.e.*

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) , \\ l &= 0, 1, 2, \dots , \\ m_l &= -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l . \end{aligned}$$

Aquí, l es el *número cuántico azimutal* y m el *número cuántico magnético*. Considerando la solución como $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)$, al sustituir en (1.4) obtenemos la ecuación diferencial para $R(r)$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - V(r)]R(r) = l(l+1) \frac{R(r)}{r^2} . \quad (1.5)$$

Para obtener la solución de (1.5) se hace uso del método de aproximación asintótica (el cual se ejemplifica de manera amplia en el Apéndice sobre orbitales de Landau). Las soluciones para (1.5) que resultan aceptables son los polinomios asociados de Laguerre $R_{nl}(r) = L_{n-l-1}^{2l+1}(r)$ e imponen la condición de cuantización de la energía

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{\mathcal{Z}^2 m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} , \\ n &= 1, 2, 3, \dots , \end{aligned}$$

con n el *número cuántico principal*. De estas consideraciones, la solución normalizada a la ecuación de Schrödinger para el ión hidrogenoide es:

$$\Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi) = \left[\left(\frac{2\mathcal{Z}}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\mathcal{Z}r}{na_0}} \left(\frac{2\mathcal{Z}}{na_0} r \right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2\mathcal{Z}}{na_0} r \right) Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) , \quad (1.6)$$

³Considerando las relaciones convencionales entre los sistemas de coordenadas cartesianas y esféricas. $x = r \sin \theta \cos \phi$, $y = r \sin \theta \sin \phi$ y $z = r \cos \theta$, con r la distancia entre el origen y cualquier punto del espacio, θ el ángulo polar y ϕ el ángulo azimutal.

1.1 Campo Magnético Externo $B = 0$

donde a_0 es el radio de Bohr. Para un valor fijo de n , los posibles valores de l son $l = n - 1, n - 2, \dots, 0$. Así, los números cuánticos n , l y m_l cumplen

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots, \\ l &= 0, 1, 2, \dots, n - 1, \\ m_l &= -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l. \end{aligned}$$

En Rydbergs⁴, la expresión de la energía es

$$E_n = -\frac{\mathcal{Z}^2}{n^2}. \quad (1.7)$$

Ya que la energía solo depende del número cuántico principal n , se tiene una degeneración de orden n^2 respecto a los números cuánticos azimutal l y magnético m_l .

Para denotar los diferentes estados utilizamos la tradicional notación espectroscópica

$$nl_{m_l}$$

con los números cuánticos n , l y m definidos anteriormente. Como es costumbre, para cada número cuántico azimutal l se considera la siguiente asignación de letras romanas

l	0	1	2	3	...
notación	s	p	d	f	...

1.1.1. Los Estados $1s_0$, $2p_0$ y $2p_{-1}$

Las funciones propias del átomo de hidrógeno $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ para los estados $1s_0$, $2p_0$ y $2p_{\pm 1}$, obtenidas directamente de la solución general (1.6) son

$$\Psi_{1,0,0}(r, \theta, \varphi) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}} Y_0^0(\theta, \varphi), \quad (1.8)$$

$$\Psi_{2,1,0}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{24a_0^5}} r e^{-\frac{r}{2a_0}} Y_1^0(\theta, \varphi), \quad (1.9)$$

$$\Psi_{2,1,\pm 1}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{24a_0^5}} r e^{-\frac{r}{2a_0}} Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi), \quad (1.10)$$

⁴Ver Apéndice C.1

1.2 En Presencia de un Campo Magnético $B \neq 0$

con a_0 el radio de Bohr. Si escribimos explícitamente los armónicos esféricos⁵ $Y_l^m(r, \theta, \varphi)$, y ya que

$$z = r \cos \theta,$$

$$\rho = r \sin \theta,$$

las eigenfunciones (1.8), (1.9) y (1.10) resultan

$$\Psi_{1,0,0}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}, \quad (1.11)$$

$$\Psi_{2,1,0}(r, \theta, \varphi) = A z e^{-\frac{r}{2a_0}}, \quad (1.12)$$

$$\Psi_{2,1,\pm 1}(r, \theta, \varphi) = \mp \frac{A}{\sqrt{2}} \rho e^{\pm i\varphi} e^{-\frac{r}{2a_0}}, \quad (1.13)$$

donde

$$A = \sqrt{\frac{1}{32\pi}} \frac{1}{a_0^{5/2}}.$$

Las funciones del átomo de hidrógeno escritas en esta forma son las que usaremos más adelante.

1.2. En Presencia de un Campo Magnético $B \neq 0$

Si se coloca al ión hidrogenoide en una región de campo magnético, ya no es posible obtener una solución exacta del sistema. Antes de escribir el hamiltoniano consideremos algunos puntos.

- Ya que la masa del protón resulta ser 1836.1527 veces mayor que la correspondiente a la del electrón, resulta natural considerar al núcleo fijo en el origen, es decir se considerará la aproximación de Born-Oppenheimer a orden cero.
- La distancia entre el electrón y el protón la indicamos por r , y por conveniencia, nuestro sistema de referencia es tal que el eje z se toma paralelo al campo magnético (Ver Fig. 1.1).
- Para incluir la presencia del campo magnético en el hamiltoniano, se considera el llamado acoplamiento mínimo, es decir se reemplaza el momento lineal \mathbf{p} por $\mathbf{p} + e\mathbf{A}$.

⁵Los primeros armónicos esféricos se presentan en el Apéndice C.3.

1.2 En Presencia de un Campo Magnético $B \neq 0$

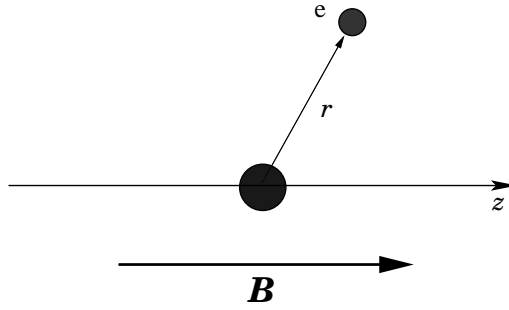


Figura 1.1: Configuración del átomo hidrogenoide en un campo magnético B en la dirección z . La posición del núcleo está indicada por el círculo sobre el eje z . El electrón e se muestra a una distancia r del protón.

- Debido a que las partículas tienen espín, estas poseen un momento magnético intrínseco $\boldsymbol{\mu}$, cuyo operador es de la forma

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{\mu}{s} \hat{\mathbf{s}},$$

con $\hat{\mathbf{s}}$ el operador de espín y $\frac{\mu}{s}$ es la llamada razón giromagnética.⁶ Este momento magnético intrínseco interactúa directamente con el campo magnético externo, por lo que al hamiltoniano debe agregarse un término dado por $-\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B}$ el cual corresponde a la energía del momento magnético $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ en el campo magnético \mathbf{B} .⁷

Con lo anterior, el operador hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ para el electrón es:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2}{2m_e} - \frac{\mu}{s} \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B} + V(r), \quad (1.14)$$

donde $V(r)$ es nuestro potencial dado por la ec. (1.2), $\hat{\mathbf{p}}$ corresponde al operador de momento y \mathbf{A} es el potencial vectorial asociado al campo magnético \mathbf{B} .

Para describir el campo magnético constante y homogéneo en la dirección z , $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, tomamos el potencial vectorial $\mathbf{A} = \frac{\mathbf{B}}{2} \times \mathbf{r} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$ el cual se conoce

⁶Para el electrón con espín $\frac{1}{2}$, esta razón es de $-\frac{|e|\hbar}{m_e c}$ por lo que su momento magnético intrínseco μ corresponde al llamado magnetón de Bohr $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$. El signo menos es debido a que la carga del electrón es $-e$, con $|e| = 1.60210 \times 10^{-19}\text{C}$.

⁷El signo menos viene del hecho de que la energía de un momento magnético $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ colocado en un campo magnético \mathbf{B} es mínima cuando $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ y \mathbf{B} son paralelos y máxima cuando son antiparalelos.

como potencial vectorial en la norma simétrica por el hecho que presenta simetría cilíndrica. Con esta elección del potencial vectorial \mathbf{A} , se cumple la condición de la norma Coulomb, $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, por lo que los operadores $\hat{\mathbf{p}}$ y \mathbf{A} conmutan, y podemos reescribir (1.14) como:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} + \frac{e}{m_e} \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2m_e} \mathbf{A}^2 - \frac{\mu}{s} \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B} + V(r) ,$$

Ahora, dada nuestra elección de \mathbf{A} se tiene que $\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} = (\frac{\mathbf{B}}{2} \times \mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}})$ pero en este último término $\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}$ es nada menos que el momento angular del electrón $\hat{\mathbf{L}}$, y como en el sistema coordenado el eje z coincide con la dirección del campo magnético se tiene que $\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \frac{1}{2} B \hat{l}_z$, siendo \hat{l}_z la componente z del momento angular del electrón. Mientras que desarrollando el término cuadrático en \mathbf{A} se obtiene $\frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m_e}$ donde $\rho^2 = x^2 + y^2$ es la distancia del electrón al eje z . Así el hamiltoniano resulta:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} + \frac{eB\hat{l}_z}{2m_e} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m_e} - \frac{\mu}{s} \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B} + V(r) .$$

Nótese sin embargo que el término de espín es un término constante y como consecuencia, su presencia se limitará a cambiar el nivel de referencia cero de la energía. Por ello y por convención, éste término en el hamiltoniano es omitido.

En sistemas atómicos y moleculares, es conveniente trabajar en unidades atómicas⁸, en donde $e = m_e = \hbar = 4\pi\epsilon_0 = 1$. Así finalmente el hamiltoniano en unidades atómicas, con la energía medida en Rydbergs toma la siguiente forma:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\Delta + mB + \frac{B^2 \rho^2}{4} + V(r) , \tag{1.15}$$

donde Δ es el operador laplaciano. En esta última expresión se usó el hecho que el operador de momento tiene la forma $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, y que los eigenvalores de la componente z del momento angular son $m\hbar$ donde $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

1.3. Escalamiento

En la aproximación de Born-Oppenheimer a orden cero, el hamiltoniano del ión hidrogenoide con número atómico \mathcal{Z} esta dado por (1.15). Indicando explícitamente la dependencia de las funciones de onda del número atómico y el campo magnético, la ecuación de Schrödinger es

$$\hat{\mathcal{H}} \psi(\mathcal{Z}, B; \mathbf{r}) = E(\mathcal{Z}, B) \psi(\mathcal{Z}, B; \mathbf{r}) . \tag{1.16}$$

⁸Ver Apéndice C.1 para una descripción de estas unidades.

1.3 Escalamiento

Si consideramos un cambio de escala en el hamiltoniano (ec. (1.15)) dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &\rightarrow \frac{\mathbf{r}'}{\mathcal{Z}} \\ B &\rightarrow \mathcal{Z}^2 B' , \end{aligned} \quad (1.17)$$

la ecuación de Schrödinger resulta

$$\left[-\Delta' + mB' + \frac{B'^2 \rho'^2}{4} - \frac{2}{r'} \right] \psi(\mathcal{Z}, B'; \mathbf{r}') = \frac{E(\mathcal{Z}, B')}{\mathcal{Z}^2} \psi(\mathcal{Z}, B'; \mathbf{r}') . \quad (1.18)$$

Ahora, notemos que al hacer la transformación⁹ $r \rightarrow \frac{r'}{\mathcal{Z}}$ en la función de onda (1.6) obtenemos que

$$\Psi_{n,l,m}(\mathcal{Z}; \mathbf{r}) = \mathcal{Z}^{\frac{3}{2}} \Psi_{n,l,m}(\mathcal{Z} = 1; \mathbf{r}') .$$

Ya que estamos considerando la aproximación de Born-Oppenheimer a orden cero, el núcleo siempre permanecerá fijo, exista o no campo magnético. Por ello, la forma en que transforman las funciones de onda bajo (1.17) cuando hay un campo magnético presente es de esta misma forma. Es decir $\psi(\mathcal{Z}, B; \mathbf{r}) = \mathcal{Z}^{\frac{3}{2}} \psi(\mathcal{Z} = 1, B'; \mathbf{r}')$. Al sustituir en la ecuación (1.18) se tiene

$$\left[-\Delta' + mB' + \frac{B'^2 \rho'^2}{4} - \frac{2}{r'} \right] \psi(\mathcal{Z} = 1, B'; \mathbf{r}') = \frac{E(\mathcal{Z}, B')}{\mathcal{Z}^2} \psi(\mathcal{Z} = 1, B'; \mathbf{r}') ,$$

la cual no es más que la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno en un campo magnético $B' = \frac{B}{\mathcal{Z}^2}$ con energía $E = E(\mathcal{Z} = 1, B') = \frac{E(\mathcal{Z}, B)}{\mathcal{Z}^2}$. Así, resulta posible obtener el espectro de iones hidrogenoides en presencia de un campo magnético B a partir del espectro del átomo de hidrógeno simplemente al hacer el escalamiento (ver por ejemplo [7])

$$E(\mathcal{Z}, B) = \mathcal{Z}^2 E\left(\mathcal{Z} = 1, \frac{B}{\mathcal{Z}^2}\right) \quad (1.19)$$

$$\psi(\mathcal{Z}, B; \mathbf{r}) = \mathcal{Z}^{\frac{3}{2}} \psi\left(\mathcal{Z} = 1, \frac{B}{\mathcal{Z}^2}; \mathcal{Z}\mathbf{r}\right) , \quad (1.20)$$

siempre que se considere la aproximación de Born-Oppenheimer de orden cero.

⁹ $r = |\mathbf{r}|$.

Teoría Perturbativa

El haber colocado el átomo de hidrógeno en una región de campo magnético tuvo como consecuencia que dejara de tener soluciones exactas. Cuando el campo magnético es pequeño, los métodos perturbativos resultan adecuados para obtener una solución aproximada. En este capítulo obtendremos las correcciones a las funciones de onda y a la energía utilizando un método ideado por A. Turbiner ([13] y [14]) llamado *método de no-linealización*. Este tiene la ventaja, ante el tradicional método de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger, que las correcciones a la función de onda del n -ésimo estado del sistema sin perturbar $\psi_n^{(0)}$, se obtienen a partir de la misma función $\psi_n^{(0)}$, siendo innecesario el tener que conocer todo el espectro del sistema no perturbado explícitamente.

El Método de No-linealización

Comencemos escribiendo el hamiltoniano¹ de un sistema con potencial V_0 sobre el cual actúa una perturbación V_1 ,

$$\hat{\mathcal{H}} = -\Delta + V = -\Delta + V_0 + \lambda V_1, \quad (2.1)$$

donde Δ es el operador laplaciano y λ el parámetro perturbativo. Para resolver la ecuación de Schrödinger

$$(-\Delta + V)\psi = E\psi, \quad (2.2)$$

se propone que la solución tenga la forma general²

$$\psi(x) = f(x)e^{-\phi(x)}, \quad x \in \mathbb{R}^n. \quad (2.3)$$

¹En unidades atómicas y la energía medida en Rydbergs.

²Este tipo de soluciones son las que se utilizan en la llamada *Teoría de Perturbaciones Logarítmica*.

con $f(x)$ y $\phi(x)$ funciones suaves para valores finitos de x . Antes de operar primero reescribimos la función (2.3) como $\psi(x) = e^{-\xi(x)}$, donde se definió $\xi(x) = \phi(x) - \log f(x)$. Ahora, aplicando el operador laplaciano sobre $\psi(x)$, obtenemos

$$\begin{aligned}\Delta\psi(x) &= \Delta e^{-\xi(x)} \\ &= (-\Delta\xi(x) + [\nabla\xi(x)]^2)e^{-\xi(x)} .\end{aligned}$$

Y con la definición de $\xi(x)$, se tiene

$$-\Delta\psi(x) = \left\{ \Delta\phi(x) - (\nabla\phi(x))^2 + \frac{1}{f(x)} \left(2\nabla\phi(x) \cdot \nabla f(x) - \Delta f(x) \right) \right\} \psi(x) . \quad (2.4)$$

Al sustituir esta expresión para el laplaciano $\Delta\psi(x)$ en la ecuación de Schrödinger (2.2) y eliminando el término $\psi(x) = e^{-\xi(x)}$, obtenemos la ecuación.

$$\left\{ \Delta\phi(x) - (\nabla\phi(x))^2 - E + V \right\} f(x) = \Delta f(x) - 2\nabla\phi(x) \cdot \nabla f(x) . \quad (2.5)$$

Ahora consideramos un desarrollo de la energía E y de las funciones $f(x)$ y $\phi(x)$ en una serie de potencias del parámetro λ de la forma

$$E = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n E^{(n)} \quad (2.6)$$

$$\phi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \phi^{(n)}(x) \quad (2.7)$$

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n f^{(n)}(x) . \quad (2.8)$$

Sustituyendo estas expansiones en (2.5), se obtiene que el coeficiente del término de grado n , es una ecuación diferencial para $\phi_n(x)$, $f_n(x)$, $\phi_{n-1}(x)$ y $f_{n-1}(x)$. Es decir, tenemos un procedimiento iterativo en donde las correcciones de orden n dependen de aquellas de orden $n-1$. Una expresión general para los coeficientes se presenta en las referencias [13] y [14]. Aquí solo presentaremos los coeficientes hasta la primera corrección, que es la que utilizaremos. Estos son:

- λ^0

$$E^{(0)} - V_0 = \Delta\phi^{(0)}(x) - (\nabla\phi^{(0)}(x))^2 + \frac{2\nabla\phi^{(0)}(x) \cdot \nabla f^{(0)}(x) - \Delta f^{(0)}(x)}{f^{(0)}(x)} \quad (2.9)$$

- λ^1

$$\begin{aligned}E^{(1)} - \tilde{V} &= \Delta\phi^{(1)}(x) - 2\nabla\phi^{(0)}(x) \cdot \nabla\phi^{(1)}(x) \\ &+ \frac{2(\nabla\phi^{(0)}(x) \cdot \nabla f^{(1)}(x) + \nabla\phi^{(1)}(x) \cdot \nabla f^{(0)}(x)) - \Delta f^{(1)}(x)}{f^{(0)}(x)} ,\end{aligned} \quad (2.10)$$

2.0 El Método de No-linealización

con

$$\tilde{V} = V_1 + \frac{f^{(1)}(x)}{f^{(0)}(x)} \left(\Delta\psi^{(0)}(x) - (\nabla\phi^{(0)}(x))^2 - E^{(0)} + V_0 \right).$$

Notemos ahora que la ecuación (2.9) no es otra cosa sino la ecuación de Schrödinger del estado no perturbado (ec. (2.5)). Es decir con $\lambda = 0$ en (2.1). La primera corrección a la energía y las funciones $\phi(x)$ y $f(x)$ se obtiene al resolver la ecuación (2.10) la cual depende de $E^{(0)}$ y las funciones $\phi^{(0)}(x)$ y $f^{(0)}(x)$. El resto de las correcciones se obtienen mediante un procedimiento similar.

Hasta el momento, la teoría que hemos desarrollado, ha sido de modo general. Consideremos ahora el sistema que estamos estudiando, el átomo de hidrógeno en un campo magnético B . Con el campo magnético en la dirección z de nuestro sistema de referencia, el hamiltoniano en Rydbergs es (ec. (1.15) con $\mathcal{Z} = 1$)

$$\hat{\mathcal{H}} = -\Delta + V(r) + mB + \frac{B^2\rho^2}{4}.$$

El parámetro de perturbación en este caso es $\lambda = B^2$, y el potencial perturbativo es $V_1 = \frac{B^2}{4}$. El término mB proviene de la conservación de la componente z del momento angular \hat{l}_z . Además, por ser este un término constante para cada valor del campo magnético, puede ser absorbido dentro de la definición de la energía.

Para continuar, consideremos explícitamente los tres estados más bajos del átomo de hidrógeno $1s_0$, $2p_0$ y $2p_{-1}$ ³, e identifiquemos las funciones $\phi^{(0)}(x)$ y $f^{(0)}(x)$.

$$\psi_{1s_0}(\mathbf{r}) = e^{-r} \implies \begin{cases} \phi^{(0)}(r) = r \\ f^{(0)}(\mathbf{r}) = 1 \\ E_1^{(0)} = -1 \end{cases} \quad (2.11)$$

$$\psi_{2p_0}(\mathbf{r}) = ze^{-\frac{1}{2}r} \implies \begin{cases} \phi^{(0)}(r) = \frac{1}{2}r \\ f^{(0)}(\mathbf{r}) = z \\ E_2^{(0)} = -\frac{1}{4} \end{cases} \quad (2.12)$$

$$\psi_{2p_{-1}}(\mathbf{r}) = \rho e^{-i\varphi} e^{-\frac{1}{2}r} \implies \begin{cases} \phi^{(0)}(r) = \frac{1}{2}r \\ f^{(0)}(\mathbf{r}) = \rho e^{-i\varphi} \\ E_2^{(0)} = -\frac{1}{4} \end{cases} \quad (2.13)$$

El factor $f(x)$ en la ec. (2.3) define las llamadas *superficies nodales*⁴. Es posible demostrar, (ver [12]) que para los estados que estamos estudiando: $1s_0$, $2p_0$ y $2p_{-1}$, las superficies nodales no son deformadas por la presencia de un campo magnético

³Para los estados con $l = 1$, las funciones son las presentadas en la ec. (1.11).

⁴Superficies donde la función es igual a cero.

B. Esto es, $f(x)$ debe ser una función independiente del campo magnético. Por ello en el desarrollo en serie (2.8), los coeficientes $f^{(n)}(x) = 0$ para $n \geq 1$.

Analícemos ahora los términos de la ecuación que da la primera corrección (ec. (2.10)). De las funciones (2.11)-(2.13), la forma general de $\phi^{(0)}(r)$ es⁵ αr , y el gradiente resulta $\nabla\phi^{(0)}(r) = (\alpha, 0, 0)$ con lo que el segundo término del lado derecho es $-2\alpha \frac{\partial\phi^{(1)}(\mathbf{r})}{\partial r}$. Como vimos $f^{(n)}(x) = 0$ para $n \geq 1$ por lo que el término racional se reduce a $\frac{2\nabla\phi^{(1)}(\mathbf{r}) \cdot \nabla f^{(0)}(\mathbf{r})}{f^{(0)}(\mathbf{r})}$ y $\tilde{V} = V_1$. Con todo esto, la primera corrección (ec. (2.10)) se obtiene al resolver

$$\Delta\phi^{(1)}(\mathbf{r}) - 2\alpha \frac{\partial\phi^{(1)}(\mathbf{r})}{\partial r} + \frac{2\nabla\phi^{(1)}(\mathbf{r}) \cdot \nabla f^{(0)}(\mathbf{r})}{f^{(0)}(\mathbf{r})} = E^{(1)} - \frac{\rho^2}{4}. \quad (2.14)$$

Por otra parte, el átomo de hidrógeno en presencia de un campo magnético presenta simetría cilíndrica en la dirección de dicho campo. Gracias a esta simetría, es posible expresar los coeficientes $\phi^{(1)}(\mathbf{r})$ como funciones independientes del ángulo azimutal ϕ . Específicamente, podemos utilizar los polinomios de Legendre $P_l^0(\cos\theta)$ para determinar la dependencia angular. Ahora, ya que las expansiones se realizan sobre el parámetro perturbativo $\lambda = B^2$ (ecuaciones (2.11)-(2.13)), el cual es cuadrático en en el campo magnético, solo tendremos potencias pares de B por lo que es natural considerar una expansión polinomial de los coeficientes $\phi^{(n)}(\mathbf{r})$ como

$$\phi^{(n)}(r, \theta) = \sum_{i=0}^n R_{n,2i}(r) P_{2i}^0(\cos\theta),$$

donde $R_{n,2i}(r)$, son funciones de r que se determinarán más adelante. En nuestro caso $n = 1$, se tiene

$$\phi^{(1)}(r, \theta) = R_{1,0}(r) P_0^0(\cos\theta) + R_{1,2}(r) P_2^0(\cos\theta).$$

con la forma usual de los polinomios de Legendre $P_l^0(\cos\theta)$

$$P_0^0(\cos\theta) = 1 \quad (2.15)$$

$$P_2^0(\cos\theta) = \frac{1}{2} (3\cos^2\theta - 1). \quad (2.16)$$

Al sustituir en (2.14) obtenemos

$$\mathcal{A}P_0^0(\cos\theta) + \mathcal{B}P_2^0(\cos\theta) + \frac{2}{r^2} \frac{R_{1,2}(r)}{f^{(0)}(\mathbf{r})} \frac{\partial P_2^0(\cos\theta)}{\partial\theta} \frac{\partial f^{(0)}(\mathbf{r})}{\partial\theta} = 0, \quad (2.17)$$

⁵Donde $\alpha = \frac{1}{n}$.

2.0 El Método de No-linealización

en donde

$$\begin{aligned}\mathcal{A} &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R_{1,0}(r) \right) + \left(\frac{2}{f^{(0)}(\mathbf{r})} \frac{\partial f^{(0)}(\mathbf{r})}{\partial r} - 2\alpha \right) \frac{\partial R_{1,0}(r)}{\partial r} + \left(\frac{r^2}{6} - E^{(1)} \right) \\ \mathcal{B} &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R_{1,2}(r) \right) + \left(\frac{2}{f^{(0)}(\mathbf{r})} \frac{\partial f^{(0)}(\mathbf{r})}{\partial r} - 2\alpha \right) \frac{\partial R_{1,2}(r)}{\partial r} - \left(\frac{r^2}{6} + \frac{6}{r^2} R_{1,2}(r) \right).\end{aligned}$$

El siguiente paso es considerar una nueva expansión. Ahora para las funciones $R_{n,2i}(r)$ con una forma general como

$$R_{n,2i}(r) = \sum_{k=\max\{2,2i\}}^{2n+1} a_{n,2i,k} r^k.$$

Aquí solo describimos el procedimiento para el estado $1s_0$ ya que este es el mismo para el resto de los estados. En este caso, $n = 1$, $i = 0, 1$ y la expansión de $R_{1,2i}(r)$ es

$$\begin{aligned}R_{1,0}^{1s_0}(r) &= a_{1,0,2} r^2 + a_{1,0,3} r^3 \\ R_{1,2}^{1s_0}(r) &= a_{1,2,2} r^2 + a_{1,2,3} r^3.\end{aligned}$$

Con estas expresiones en la ecuación (2.17), y considerando la ortogonalidad de los polinomios de Legendre, se obtienen las expresiones para las funciones $R_{1,2i}^{1s_0}(r)$ y la primera corrección a la energía

$$\begin{aligned}E^{(1)} = \frac{1}{2} \quad ; \quad R_{1,0}^{1s_0}(r) &= \frac{1}{12} \left(r^2 + \frac{r^3}{3} \right) \\ R_{1,2}^{1s_0}(r) &= -\frac{1}{12} \left(\frac{r^2}{2} + \frac{r^3}{3} \right).\end{aligned}$$

Entonces, la corrección a primer orden de $\phi(r, \theta)$ resulta ser

$$\phi_{1s_0}^{(1)}(r, \theta) = \left(r^2 + \frac{r^3}{3} \right) \frac{P_0^0(\cos \theta)}{12} - \left(\frac{r^2}{2} + \frac{r^3}{3} \right) \frac{P_2^0(\cos \theta)}{12}. \quad (2.18)$$

De este procedimiento, la forma de la función resultante es $\psi = e^{-(\phi^{(0)}(r) + \lambda \phi^{(1)}(r, \theta))}$. La cual podemos reescribir, utilizando el desarrollo de Taylor de la función exponencial, y conservando solo el término lineal en λ como:

$$\begin{aligned}\psi &= e^{-(\phi^{(0)}(r) + \lambda \phi^{(1)}(r, \theta))} \\ &\approx e^{-\phi^{(0)}(r)} \left(1 - \lambda \phi^{(1)}(r, \theta) \right).\end{aligned}$$

Con la corrección $\phi^{(1)}(r, \theta)$ (ec. (2.18)), la forma final de la función de onda para el estado base $1s_0$ y de la energía a primer orden en $\lambda = B^2$ son:

$$E_{1s_0} = -1 + \frac{B^2}{2} \quad (2.19)$$

$$\psi_{1s_0}(r, \theta) = \left[1 + \frac{B^2}{12} \left\{ \left(\frac{r^2}{2} + \frac{r^3}{3} \right) P_2^0(\cos \theta) - \left(r^2 + \frac{r^3}{3} \right) P_0^0(\cos \theta) \right\} \right] e^{-r} .$$

De la misma manera se obtienen las correcciones para los estados $2p_0$ y $2p_{-1}$. Aquí simplemente se presentan los resultados,

$$E_{2p_0} = -\frac{1}{4} + 3B^2, \quad (2.20)$$

$$\psi_{2p_0}(r, \theta) = \left[1 + \frac{B^2}{18} \left\{ \left(4r^2 + r^3 \right) P_2^0(\cos \theta) - \left(7r^2 + r^3 \right) P_0^0(\cos \theta) \right\} \right] z e^{-\frac{1}{2}r}$$

$$E_{2p_{-1}} = -\frac{1}{4} + 6B^2, \quad (2.21)$$

$$\psi_{2p_{-1}}(r, \theta) = \left[1 + \frac{B^2}{18} \left\{ \left(4r^2 + r^3 \right) P_2^0(\cos \theta) - \left(17r^2 + r^3 \right) P_0^0(\cos \theta) \right\} \right] \rho e^{-i\varphi} e^{-\frac{1}{2}r} .$$

De estos resultados podemos ver que para los tres estados $1s_0$, $2p_{-1}$ y $2p_0$, la corrección a la energía total hasta orden B^2 es positiva. En la Figura 2.1 presentamos gráficamente estos resultados incluyendo el término de Zeeman mB .

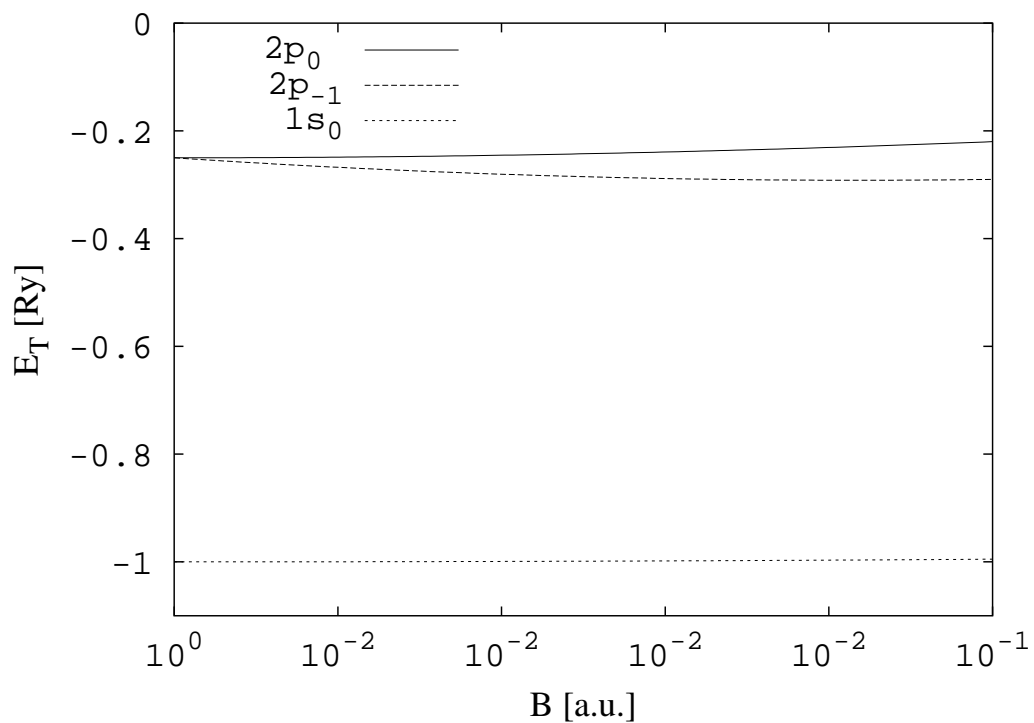


Figura 2.1: Energía total obtenida mediante el método de no-linealización a primer orden en $\lambda = B^2$ para los tres estados $1s_0$, $2p_{-1}$ y $2p_0$. El campo magnético se presenta en unidades atómicas y la energía total en Rydbergs.

El Método Variacional

Cuando el campo magnético aplicado es intenso, $B \gtrsim 2.35 \times 10^9$ Gauss, los métodos perturbativos dejan de ser útiles. En este caso, optamos por utilizar el método variacional el cual es aplicable a todo el rango de campos magnéticos. El precio a pagar es hacer una adecuada elección de las funciones de prueba a utilizar.

3.1. El Principio Variacional

Dado un sistema físico, descrito por un hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$, es posible construir el funcional

$$\mathcal{E}(\psi) = \frac{\int \psi^* \hat{\mathcal{H}} \psi d\mathbf{r}}{\int \psi^* \psi d\mathbf{r}}, \quad (3.1)$$

en donde ψ corresponde a las llamadas funciones de onda, las cuales, son funciones normalizables (en el caso de los estados ligados del sistema), esto es $\int \psi^* \psi d\mathbf{r} = 1$, y para el cual se está interesado en encontrar el mínimo condicionado por $\int \psi \psi^* d\mathbf{r} - 1 = 0$. Para ello se utiliza el método de multiplicadores de Lagrange, que establece que en un punto crítico, existe una constante λ tal que

$$\delta \int \psi^* \hat{\mathcal{H}} \psi d\mathbf{r} + \lambda \delta \left(\int \psi^* \psi d\mathbf{r} - 1 \right) = 0.$$

Identificando $\lambda = E$, esta ecuación se puede escribir como

$$\delta \int \psi^* (\hat{\mathcal{H}} - E) \psi d\mathbf{r} = 0.$$

Entonces, aplicando la variación sobre ψ^* se obtiene la ecuación de Schrödinger $\hat{\mathcal{H}}\psi = E\psi$. Mientras que si la variación es sobre ψ y considerando la hermiticidad de

$\hat{\mathcal{H}}$ se obtiene la ecuación compleja conjugada $\hat{\mathcal{H}}\psi^* = E\psi^*$. Así, la energía resulta ser un multiplicador de Lagrange, y ψ la función de onda que da el *mínimo* del funcional (3.1), corresponde a la función de mínima energía (estado base) ψ_0 . Reformulando lo anterior, se enuncia el siguiente teorema:

Teorema 1 Sea $\hat{\mathcal{H}}$ el hamiltoniano de un sistema, entonces el funcional de energía

$$\mathcal{E}(\psi) = \frac{\int \psi^* \hat{\mathcal{H}} \psi d\mathbf{r}}{\int \psi^* \psi d\mathbf{r}}, \quad (3.2)$$

es minimizado cuando ψ es la eigenfunción del estado base de la ecuación de Schrödinger.

Prueba 1 Sea ψ una función cuadrado integrable que es normalizada a 1 (esto es $\int \psi^* \psi d\mathbf{r} = 1$). Considerando el hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$, junto con el conjunto completo de sus eigenfunciones y eigenvalores, es decir

$$\hat{\mathcal{H}}\psi_n = E_n\psi_n,$$

la función ψ puede ser escrita como una combinación lineal de las eigenfunciones de $\hat{\mathcal{H}}$, esto es

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n. \quad (3.3)$$

Desarrollando (3.2) a partir de (3.3) se obtiene

$$\begin{aligned} \int \psi^* \hat{\mathcal{H}} \psi d\mathbf{r} &= \sum_n \sum_m C_n^* C_m \int \psi_n^* \hat{\mathcal{H}} \psi_m d\mathbf{r} \\ &= \sum_n \sum_m C_n^* C_m E_m \int \psi_n^* \psi_m d\mathbf{r} \\ &= \sum_n |C_n|^2 E_n. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Ahora ordenando los eigenvalores de energía, esto es $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \dots$, se tiene que $(E_n - E_0) \geq 0$ por lo que (3.4) se escribe como

$$\sum_n E_0 |C_n|^2 + \sum_n |C_n|^2 (E_n - E_0) \geq E_0 \sum_n |C_n|^2,$$

y de la condición de normalizabilidad $\int \psi^* \psi = 1$ se tiene que $\sum_n |C_n|^2 = 1$, por lo que finalmente se obtiene

$$\int \psi^* \hat{\mathcal{H}} \psi \geq E_0, \quad (3.5)$$

es decir la igualdad se cumple solo si ψ es la eigenfunción del estado de menor energía, es decir ψ_0 , la función de onda del estado base. ■

3.1 El Principio Variacional

En la práctica, al aplicar éste método de aproximación a un problema concreto, lo que se hace es tomar funciones, en principio arbitrarias,¹ que llamaremos funciones de prueba, $\psi_p = \psi_p(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots)$ que dependan de ciertos parámetros $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots$. De este modo el valor de la energía depende de los valores que toman estos parámetros, y se define la energía variacional como

$$E_{var}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots) = \frac{\int \psi_p^* \hat{\mathcal{H}} \psi_p d\mathbf{r}}{\int \psi_p^* \psi_p d\mathbf{r}}. \quad (3.6)$$

Lo que resta es obtener el valor mínimo de E_{var} como función de los parámetros, pues el valor obtenido será siempre mayor, y en el mejor de los casos igual al valor exacto de la energía del estado base, es decir, de (3.5)

$$E_{var} \geq E_0. \quad (3.7)$$

Un punto interesante de la energía variacional es el siguiente: Tomemos el hamiltoniano del sistema (escrito en Rydbergs) como $\hat{\mathcal{H}} = -\Delta + V$, donde Δ es el operador laplaciano y V el potencial presente, para el cual se tiene $\hat{\mathcal{H}}\psi = E\psi$. Ahora, dadas las funciones de prueba ψ_p es posible encontrar un hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_p = -\Delta + V_p$ con cierto potencial $V_p = \frac{\Delta\psi_p}{\psi_p} + E_p$, para el cual se puede escribir $\hat{\mathcal{H}}_p\psi_p = E_p\psi_p$, así que en la ecuación de la energía variacional E_{var} (3.6) se tiene

$$\begin{aligned} E_{var} &= \frac{\int \psi_p^* \hat{\mathcal{H}} \psi_p d\mathbf{r}}{\int \psi_p^* \psi_p d\mathbf{r}} \\ &= \frac{\int \psi_p^* \hat{\mathcal{H}}_p \psi_p d\mathbf{r}}{\int \psi_p^* \psi_p d\mathbf{r}} + \frac{\int \psi_p^* (\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}_p) \psi_p d\mathbf{r}}{\int \psi_p^* \psi_p d\mathbf{r}} \\ &= E_p + \frac{\int \psi_p^* (V - V_p) \psi_p d\mathbf{r}}{\int \psi_p^* \psi_p d\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

De ésta última ecuación se puede ver que la energía variacional resulta ser los dos primeros términos en la teoría perturbativa, en donde el potencial perturbativo es $V - V_p$ y V_p es el potencial no perturbado. Desde este punto de vista, lo más importante es encontrar funciones de prueba ψ_p cuyos potenciales V_p reproduzcan el potencial original lo más cercanamente posible, es decir que el potencial perturbativo $V - V_p$ sea en cierto sentido pequeño y conduzca posiblemente a una teoría perturbativa convergente.

Antes de continuar reescribamos la expresión para la energía variacional (ec. (3.6)) considerando el hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ de la forma $\hat{\mathcal{H}} = -\Delta + V$ para una función de

¹Realmente, como se ve mas adelante, se eligen las funciones de modo que describan hasta cierto punto las características del sistema a estudiar.

prueba ψ_p

$$\begin{aligned} \int \psi_p^* \hat{\mathcal{H}} \psi_p &= \int \psi_p^* (-\Delta + V) \psi_p \\ &= \int \psi_p^* \left(V - \frac{\Delta \psi_p}{\psi_p} \right) \psi_p \\ &= \int \psi_p^* (V - V_p) \psi_p , \end{aligned}$$

donde $V_p = \frac{\Delta \psi_p}{\psi_p}$.

Así, la *energía total* del sistema E_T resulta de minimizar la energía variacional respecto a los parámetros $\alpha_1, \alpha_2, \dots$

$$E_T = \min_{\{\alpha_1, \alpha_2, \dots\}} \frac{\int \psi_p^* (V - V_p) \psi_p d\mathbf{r}}{\int \psi_p^* \psi_p d\mathbf{r}} . \quad (3.9)$$

3.2. Las Funciones de Prueba

Uno de los puntos centrales en la aplicación del método variacional, es la correcta elección de la función de prueba. Para ello se siguieron tres criterios de adecuación implementados por A.V. Turbiner para sistemas en campos magnéticos (ver por ejemplo [3]). Estos criterios son:

- 1.- La función de prueba ψ_p , debe ser tal que el potencial $V_p = \frac{\Delta \psi_p}{\psi_p}$, para el cual la función de prueba ψ_p es eigenfunción exacta de $\hat{\mathcal{H}}_p = -\Delta + V_p$, con energía cero, reproduzca el potencial original cerca de las singularidades de Coulomb,² y el comportamiento de oscilador armónico a grandes distancias.
- 2.- Se deben incluir en las funciones de prueba las simetrías propias del sistema.
- 3.- Si se estudia el estado base, las funciones de prueba no deben anularse en el dominio de definición, *i.e.* no tiene nodos (de acuerdo con el Teorema de Perron).

²Es decir cerca del origen, $r_i \rightarrow 0$.

3.2 Las Funciones de Prueba

- **El estado base $1s_0$**

La función que estamos buscando debe pertenecer al espacio de Hilbert. Además, por tratarse del estado base, ésta no debe tener nodos.

Si consideramos los casos límite de campo magnético $B = 0$ y $B \rightarrow \infty$, las soluciones son el átomo de hidrógeno y el orbital de Landau. Respectivamente:

$$\begin{aligned} B = 0 &\longrightarrow \Psi_{n,l,m} = \Psi_{1,0,0} = e^{-r} \\ B \rightarrow \infty &\longrightarrow \Psi_{N,m,p_z} = \Psi_{0,0,0} = e^{-\frac{B\rho^2}{4}} . \end{aligned}$$

Un primer Ansatz para la función de onda se obtiene de tomar el producto de estas dos funciones, *i.e.*

$$\Psi = e^{-\alpha r - \beta \frac{B\rho^2}{4}} , \quad (3.10)$$

con α y β los parámetros variacionales. Con este Ansatz el potencial $V_p = \frac{\Delta\Psi}{\Psi}$ es

$$V_p = \underbrace{-\frac{2\alpha}{r}}_{V_C} + \underbrace{\frac{\beta^2 B\rho^2}{4}}_{V_{Landau}} + \underbrace{\alpha\beta \frac{B\rho^2}{r}}_{VV} + \alpha^2 - \beta B . \quad (3.11)$$

Para distancias pequeñas $r \rightarrow 0$, el término dominante del potencial V_p es V_C (ec. (3.11)). Este reproduce la forma funcional del potencial de Coulomb, llegando a ser exacto si $\alpha = 1$. Por otro lado, para grandes distancias, $r \rightarrow \infty$, el término dominante en (3.11), es V_{Landau} . Este reproduce la forma funcional del potencial de un electrón libre en un campo magnético B , siendo exacto para $\beta = 1$. El término, VV en el potencial (3.11) es una perturbación.

La primera corrección a la energía debida a la perturbación VV con la función (3.10) es proporcional al campo magnético B . Sin embargo, como vimos en el Capítulo 2, estas correcciones sólo contienen potencias pares de B . Así, resulta natural considerar como un Ansatz

$$\Psi = e^{-\sqrt{\alpha^2 r^2 + \beta \frac{B^2 \rho^4}{16}}} , \quad (3.12)$$

nuevamente α y β son los parámetros variacionales. Esta función, tiene una expansión adecuada en B y reproduce correctamente el comportamiento para campos magnéticos débiles si $\alpha = 1$, e intensos con $\beta = 1$.

Para campos magnéticos intensos y grandes distancias³ ($\rho \rightarrow \infty$ y z pequeño), la interacción Coulombiana es pequeña y $r \sim \rho$. Podemos por lo tanto incluir un término proporcional a $\frac{B^2 \rho^2 r^2}{16}$.

³Con ello el sistema se aproximaría al de un electrón libre en un campo magnético B .

En el Ansatz (3.12), el término $\alpha^2 r^2$ nos reproduce el potencial de Coulomb V_C , mientras que el término $\frac{B^2 \rho^4}{16}$ reproduce el potencial de Landau V_{Landau} . Podemos entonces incorporar términos cúbicos como r^3 , ρ^3 , $r^2 \rho$ y $r \rho^2$ que serán subdominantes con el fin de mejorar la función de prueba para distancias intermedias.

Con estas consideraciones el Ansatz para el estado base $1s_0$ es (véase [15])

$$\Psi_{1s_0} = e^{-\phi_0} , \quad (3.13)$$

donde

$$\phi_0 = \sqrt{\alpha^2 r^2 + (\gamma_1 r^3 + \gamma_2 r \rho^2 + \gamma_3 \rho^3 + \gamma_4 r \rho^2) B^2 + \frac{\beta_1 B^2 \rho^4}{16} + \frac{\beta_2 B^2 \rho^2 r^2}{16}} , \quad (3.14)$$

donde α , γ_1 , γ_2 , γ_3 , γ_4 , β_1 y β_2 son parámetros variacionales.

La expresión para ϕ_0 (ec. (3.14)) es el resultado de una interpolación entre los casos límite del campo magnético B . Si $B = 0$ y $\alpha = 1$, $\phi_0 = r$. Lo cual corresponde al estado base del átomo de hidrógeno. Por otra parte, para campos magnéticos intensos y grandes distancias, la interacción Coulombiana es pequeña y $r \sim \rho$. Entonces si $\beta_1 + \beta_2 = 1$, $\phi_0 = \frac{B \rho^2}{4}$. Teniendo con ello la función de Landau del estado base.

■ **Los estados $2p_0$ y $2p_{-1}$**

Al igual que para el estado base $1s_0$, las funciones de los estados $2p_0$ y $2p_{-1}$ deben de pertenecer al espacio de Hilbert. Sin embargo, éstas deben de tener un nodo en el dominio de definición. Por otra parte, las superficies nodales⁴ de estos estados no son deformadas por la presencia del campo magnético. Entonces, por continuidad con el caso sin campo magnético, mantenemos el prefactor de los estados $2p_0$ y $2p_{-1}$ correspondientes al caso sin campo magnético. Las funciones de prueba que usamos para estos dos estados son:

$$\Psi_{2p_{-1}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \rho e^{-i\varphi} e^{-\phi_0} = \frac{x - iy}{\sqrt{2}} e^{-\phi_0} \quad (3.15)$$

$$\Psi_{2p_0} = z e^{-\phi_0} . \quad (3.16)$$

Las funciones presentadas anteriormente tienen una forma general

$$\Psi = f e^{-\phi_0} , \quad (3.17)$$

⁴Superficies donde la función es igual a cero.

3.4 La Energía de Amarre

donde f es una función característica de cada estado y ϕ_0 es definida por la ec. (3.14). Con ello analizamos el potencial $V_p = \frac{\Delta\psi_p}{\psi_p}$. Para lo cual reescribimos Ψ como $\Psi = fe^{-\phi_0} = e^{-(\phi_0 - \log f)} \equiv e^{-\chi}$, donde claramente $\chi = \phi_0 - \log f$. Además notemos que

$$\begin{aligned} V_p &= \frac{\Delta\psi_p}{\psi_p} = \frac{\Delta e^{-\chi}}{e^{-\chi}} \\ &= -\Delta\chi + (\nabla\chi)^2, \end{aligned}$$

con la definición de χ obtenemos

$$V_p = -\Delta\phi_0 + (\nabla\phi_0)^2 + \frac{1}{f}(\Delta f - 2\nabla f \cdot \nabla\phi_0). \quad (3.18)$$

Es con esta expresión que se calcula el potencial V_p asociado a cada una de las funciones de prueba, necesario en el cálculo de la energía variacional (ec. (3.9)).

3.3. La Energía de Amarre

Una cantidad importante es la energía de amarre E_b (o energía de ionización). Definida como la diferencia de la energía del electrón libre en un campo magnético B (ec. (1) en Rydbergs) y la energía total del sistema (ec. (3.9)) para el mismo valor del campo magnético.

$$E_b = B(2N + 1 + |m| + m) - E_T.$$

Para campos magnéticos pequeños, podemos utilizar las expresiones de la energía total obtenidas mediante el método de no-linearización (ec. (2.19), ec. (2.21) y ec. (2.21)) y con ello obtener las aproximaciones correspondientes para la energía de amarre. Incluyendo el término del efecto Zeeman mB , estas son

$$\begin{aligned} E_b^{1s0} &= 1 + B - \frac{1}{2}B^2, \\ E_b^{2p0} &= \frac{1}{4} + B - 3B^2 \\ E_b^{2p-1} &= \frac{1}{4} + 2B - 6B^2. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Como vemos, para los estados $1s_0$, $2p_0$ y $2p_{-1}$, la energía de amarre es una función creciente del campo magnético B .

3.4. Cálculos Computacionales

Una vez determinado el hamiltoniano de nuestro sistema (ec. (1.15)) y la expresión de las funciones de prueba para los estados $1s_0$, $2p_0$ y $2p_{-1}$ (ecuaciones (3.13), (3.15) y (3.16) respectivamente), resta hacer el cálculo de la energía total (ec. (3.9)).

Para el cálculo se utilizó un programa en lenguaje *FORTRAN*, el cual comprende dos aspectos básicos

- Realizar la integración de la energía total, para lo cual se utiliza la rutina de integración **DO1FCF** de la biblioteca **NAG-LIB**.
- Minimizar el valor de la energía total en función de los parámetros variacionales utilizando para ello la rutina de minimización **MINUIT** de la biblioteca **CERN-LIB**.

Es importante notar que en el proceso de minimización se busca el mínimo de una hipersuperficie de dimensión igual al número de parámetros variacionales. Por ello esta es la parte más delicada del cálculo.

Los cálculos se realizaron en una computadora personal PC DELL con dos procesadores Xeon a 2.8 GHz cada uno. La precisión relativa en los cálculos fue de 10^{-8} y cada proceso de minimización tomó entre dos y tres minutos. Un archivo de entrada típico es como el que se presenta a continuación.

3.4 Cálculos Computacionales

```
Marzo 16, 07                               Archivo de Entrada                               Pagina 1/1

Magnetic field (in units of B_9) | Magnetic Quantum Number ; H-atom
0.0D0                                         0
Number of regions in rho (nrho)  nrho+1 limits  (NUM / DEN)
2 2
Limits for rho NUM  (according to Number of Regions)
0.0 1.43 14.5
Limits for rho DEN
0.0 1.43 14.5
Number of regions in z  (nz)  nz+1 limits  (NUM / DEN)
3 3
Limits for z  (NUM)  (according to Number of Regions)
0.0D0 0.81 1.59 13.5
Limits for z  DEN
0.0D0 0.81 1.59 13.5
Default Acc. NUM/DEN, Factor, Flag for corr., acc. for corr, screen=1/file=0
1.D-08 1.D-08 1.0D0 1 1.0D-01 1

SET TITLE
'Variational Energy for H+ in a magnetic field'
PARAMETERS
1 'alpha1 ' 1.0 0.010 0.01 3.4
2 'gamma1 ' 0.00865857686 0.010 -0.1 1.0
3 'gamma2 ' 0.018387234 0.010 0.0 1.8
4 'gamma3 ' -0.00453851466 0.010 -0.8 1.0
5 'gamma4 ' -0.00138621571 0.010 -0.1 1.0
6 'beta1 ' 0.078566183 0.010 0.0 1.2
7 'beta2 ' 1.22034163 0.010 0.0 1.5

MINIMIZE
STOP
```

Espectro del Átomo de Hidrógeno

En este capítulo se presentan los resultados de los cálculos de la energía total E_T y la energía de amarre E_b para los estados $1s_0$, $2p_{-1}$ y $2p_0$ del átomo de hidrógeno en un campo magnético B . En todo el rango de campos magnéticos estudiado $B \in (0.0-4.414) \times 10^{13}$ G, se utilizó una sola función de prueba, diferente para cada estado (ecuaciones (3.13), (3.15) y (3.16)). La energía total obtenida con dichas funciones de prueba esta en muy buena correspondencia con los resultados de H. Ruder y G. Wunner [7], sin embargo, ésta no resulta ser mejor. Incluimos los resultados de H. Ruder y G. Wunner [7] y los obtenidos por Y. Kravchenko y M. Liberman [11]. En el texto, al referirnos a estos autores, los indicamos como R&W y K&L, respectivamente.

El método utilizado por H. Ruder y G. Wunner consiste en hacer un desarrollo de la función de onda en una base. Este desarrollo depende del régimen de campos magnéticos. Para campos magnéticos pequeños, consideran como base los armónicos esféricos $\Psi = \sum_l \frac{1}{r} f_{l,m}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$. Mientras que en el extremo de campos magnéticos intensos, la base son los orbitales de Landau $\Psi = \sum_n g_{n,m}(z) \phi_{n,m}^{Lan}(\rho, \phi)$.

En ambos casos las funciones $f_{l,m}(r)$ y $g_{n,m}(z)$ se determinan numéricamente.

Y. Kravchenko y M. Liberman por su parte consideran la solución como una serie de potencias en la coordenada radial con coeficientes que son polinomios de la variable $\sin \theta$, donde θ es el ángulo polar.

Para tener una imagen de la dependencia de nuestros resultados en función del campo magnético, se incluyen gráficas donde presentamos los resultados que se encuentran en las tablas. Para los tres estados, $1s_0$, $2p_{-1}$ y $2p_0$, también comparamos con los resultados de la teoría perturbativa para campos magnéticos débiles obtenidos en el Capítulo 2.

4.1. El Estado $1s_0$

Los resultados de la energía total y la energía de amarre para el estado $1s_0$ del átomo de hidrógeno en presencia de un campo magnético¹ B , se presentan en la Tabla 4.1.

	Presente Trabajo		R&W [7]	K&L [11]
$B \times 10^9 G$	E_T (Ry)	E_b (Ry)		
0.235	-0.99505296	1.09505296*	1.095053	1.09505296
0.47	-0.98076311	1.18076311	1.180763	1.18076313
0.705	-0.95837301	1.25837301	1.258373	1.25837311
0.94	-0.92921046	1.32921046	1.329211	1.32921076
1.0	-0.92082249	1.34635441*	-	-
1.175	-0.89442038	1.39442038	-	1.39442108
1.41	-0.85492327	1.45492327	1.454925	1.45492457
1.645	-0.81144599	1.51144599	-	-
1.88	-0.76456357	1.56456357	-	1.56456679
2.115	-0.71473513	1.61473513	-	-
2.35	-0.66233166	1.66233166*	1.662338	1.66233779
4.7	-0.04439196	2.04439196	-	2.04442781
10.0	1.6403620	2.6149571*	-	-
23.5	6.5052157	3.4947843*	3.495594	3.49559433
100.0	36.839804	5.713387*	-	-
235.0	92.435629	7.564371*	7.5781	7.57960847
1000.0	413.66196	11.86995*	-	-
2350.0	984.77285	15.22715*	15.3241	15.32484649
10000.0	4232.7669	22.5523*	-	-
23500.0	9972.0450	27.9550	-	-
44140.0	18750.476	32.502*	-	-

Tabla 4.1: Resultados de la energía total E_T y la energía de amarre E_b del estado base $1s_0$ del átomo de hidrógeno en un campo magnético B , utilizando la función de prueba (3.13). Para hacer una comparación se presentan los resultados de W&R y K&L.

¹La elección aparentemente extraña del valor del campo magnético para $B < 4.7 \times 10^9$ Gauss, se debe a que en unidades atómicas estos corresponden a $B = 0.1 a.u., 0.2 a.u., \dots$

*Para este valor del campo magnético, en [15] se calcula la energía de amarre utilizando la misma función de prueba (ec. (3.13)).

4.1 El Estado $1s_0$

Como podemos ver de la Tabla 4.1, con una función de prueba relativamente sencilla pero con propiedades físicas correctas (ec. (3.13)), nuestros resultados para la energía de amarre están en buen acuerdo con los valores obtenidos por R&W [7] y K&L [11]. El error relativo crece monótonamente de 10^{-7} hasta 10^{-2} a medida que se incrementa la magnitud del campo magnético en el rango $(0.235 - 2350.0) \times 10^9$ Gauss.

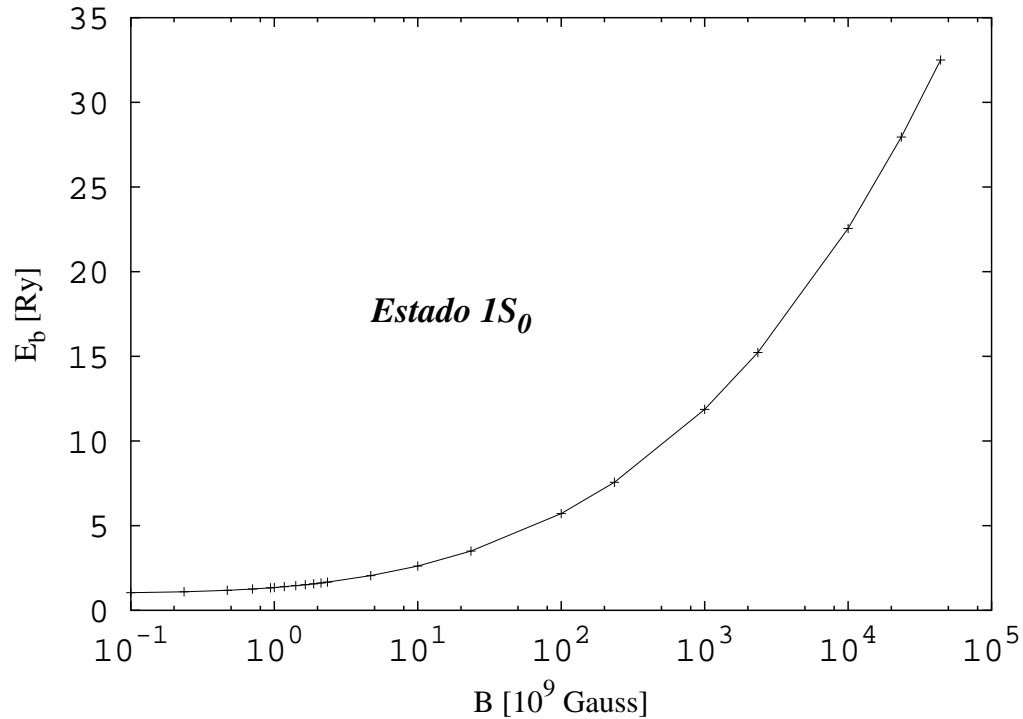


Figura 4.1: Energía de amarre para el estado base $1s_0$ del átomo de hidrógeno como función del campo magnético B . Las cruces indican los puntos calculados. La línea continua esta compuesta de segmentos de rectas que unen los resultados de los cálculos. En la figura no se muestran los resultados de los autores con los cuales se hacen las comparaciones ya que por la poca diferencia en los valores y la escala utilizada estos se traslapan.

4.2. El Estado $2p_{-1}$

Los resultados de los cálculos de la energía total y la energía de amarre para el primer estado excitado $2p_{-1}$ del átomo de hidrógeno en un campo magnético² B , se presentan en la Tabla 4.2.

	Presente Trabajo		R&W [7]	K&L [11]
$B \times 10^9 G$	E_T (Ry)	E_b (Ry)		
0.235	-0.30169120	0.40169120	0.4016913	0.40169135
0.47	-0.30107721	0.50107721	0.5010782	0.50107820
0.705	-0.27818235	0.57818235	0.5781850	0.57818495
0.94	-0.24270465	0.64270465	0.6427096	0.64270956
1.0	-0.23220481	0.65773673	-	-
1.175	-0.19894673	0.69894673	-	0.69895459
1.41	-0.14923612	0.74923612	0.7492475	0.74924755
1.645	-0.09499310	0.79499310	-	-
1.88	-0.03715712	0.83715712	-	0.83717730
2.115	0.02361346	0.87638654	-	-
2.35	0.08683673	0.91316327	0.9131941	0.91319412
4.7	-	-	-	1.19922555
10.0	2.6412847	1.6140344	-	-
23.5	7.7502810	2.2497190	2.250845	2.25084468
100.0	38.680175	3.873016	-	-
235.0	94.744196	5.255804	5.26948	5.26952133
1000.0	416.97459	8.55733	-	-
2350.0	988.80274	11.19726	11.27681	11.27684216
10000.0	4238.2155	17.1036	-	-
23500.0	9978.4426	21.5574	-	-
44140.0	18757.623	25.355	-	-

Tabla 4.2: Resultados de la energía total y la energía de amarre para el estado excitado $2p_{-1}$ del átomo de hidrógeno en campos magnéticos. Los cálculos se realizaron con la función de prueba (3.15).

²Los valores de la intensidad del campo magnético para $B < 4.7 \times 10^9$ Gauss, se debe a que en unidades atómicas estos corresponden a $B = 0.1 a.u., 0.2 a.u., \dots$

4.2 El Estado $2p_{-1}$

La comparación de nuestros resultados con los obtenidos por R&W [7] y K&L [11], nos deja ver que el error relativo en la energía de amarre, crece de manera monótona, de 10^{-7} hasta 10^{-1} conforme la intensidad del campo magnético aumenta de $(0.235 - 2350.0) \times 10^9$ Gauss. En la Figura 4.2 presentamos gráficamente los resultados de la Tabla 4.2.

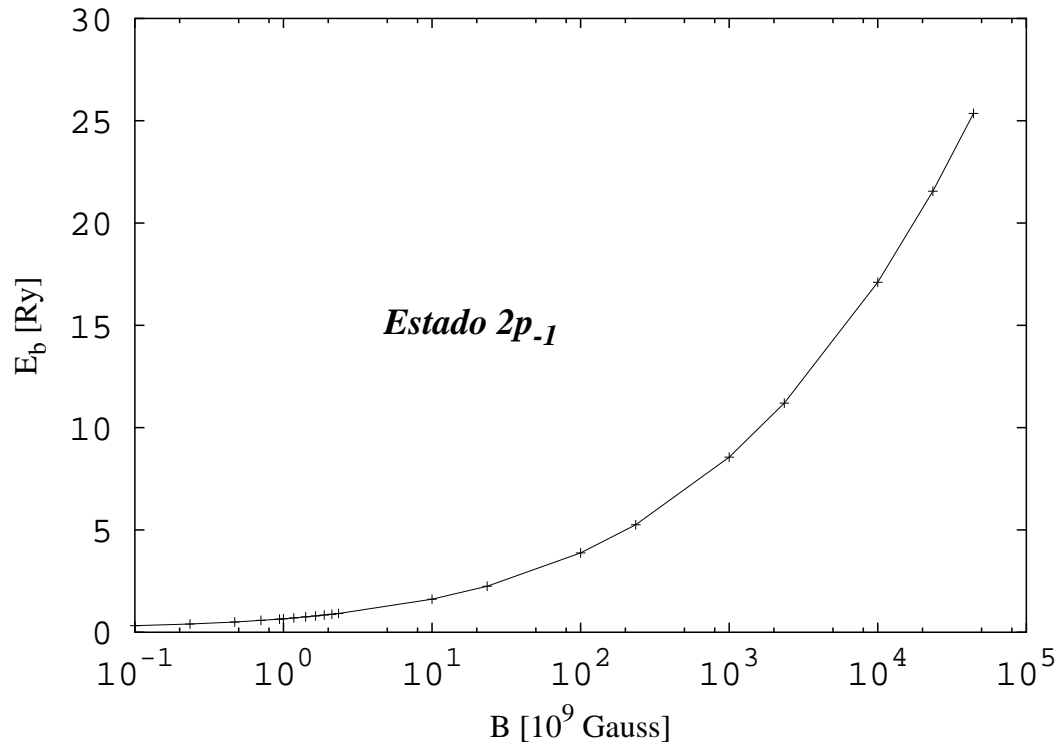


Figura 4.2: Energía de amarre para el estado excitado $2p_{-1}$ del átomo de hidrógeno en función del campo magnético B . El resultado de los cálculos se muestran con cruces mientras que las líneas simplemente unen estos puntos.

4.3. El Estado $2p_0$

Para el segundo estado excitado $2p_0$ los resultados de las energías total y de amarre del átomo hidrógeno en un campo magnético³ B se presentan en la Tabla 4.3.

	Presente Trabajo		R&W [7]	K&L [11]
$B \times 10^9 G$	E_T (Ry)	E_b (Ry)		
0.235	-0.22481989	0.32481989	0.3248202	0.32482016
0.47	-0.17036548	0.37036548	0.3703681	0.37036808
0.705	-0.10300067	0.40300067	0.4030083	0.40300829
0.94	-0.02851588	0.42851588	0.4285310	0.42853100
1.0	-0.00870326	0.43423517	-	-
1.175	0.05050406	0.44949594	-	0.44952068
1.41	0.13267921	0.46732079	0.4673569	0.46735693
1.645	0.21718292	0.48281708	-	-
1.88	0.30347920	0.49652080	-	0.49658385
2.115	0.39119985	0.50880014	-	-
2.35	0.48008059	0.51991941	0.5200132	0.52001323
4.7	1.4048471	0.5951529	-	0.59542195
10.0	3.5779027	0.6774165	-	-
23.5	9.2359032	0.7640968	0.7652975	0.76529970
100.0	41.673595	0.879597	-	-
235.0	99.074485	0.925515	0.9272354	0.92723552
1000.0	424.56094	0.97098	-	-
2350.0	999.01560	0.98440	0.9849900	0.9849900
10000.0	4254.3254	0.9938	-	-
23500.0	-	-	-	-
44140.0	-	-	-	-

Tabla 4.3: Resultados de la energía total y la energía de amarre para el estado excitado $2p_0$ del átomo de hidrógeno en campos magnéticos. En estos cálculos, se utilizó la función de prueba (3.16).

³La elección del valor del campo magnético para $B < 4.7 \times 10^9$ Gauss, se debe a que en unidades atómicas estos corresponden a $B = 0.1 a.u., 0.2 a.u., \dots$

4.3 El Estado $2p_0$

Al comparar los resultados de la energía de amarre del estado $2p_0$, con aquellos obtenidos por R&W [7] y K&L [11], el error relativo crece de 10^{-6} hasta 10^{-2} para campos magnéticos entre $B \in (0.235 - 2350) \times 10^9$ Gauss. En la Figura 4.3 presentamos gráficamente los resultados de la Tabla 4.3.

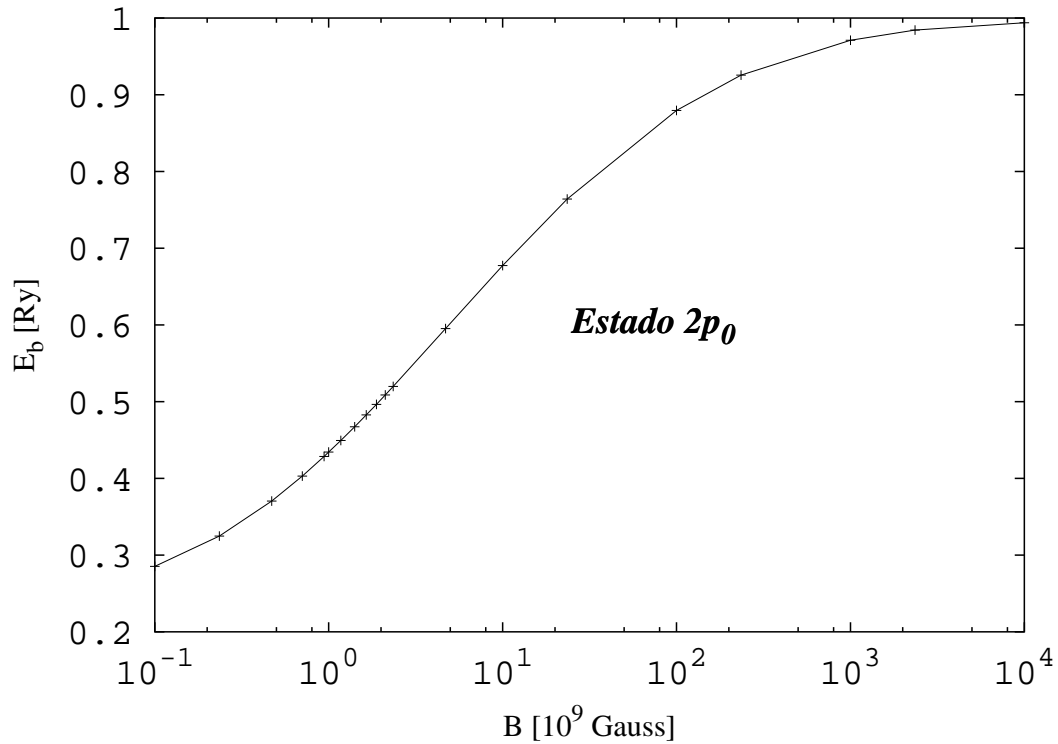


Figura 4.3: Energía de amarre del estado excitado $2p_0$ del átomo de hidrógeno como función del campo magnético B . Las cruces indican los puntos calculados y las líneas rectas unen estos puntos.

4.4. El Espectro

4.4.1. Campos Magnéticos Débiles

Para campos magnéticos débiles, en la Figura 4.4 ((a), (b) y (c)) mostramos gráficamente los resultados de la energía total variacional junto con las curvas de las correcciones obtenidas con el método de no-linealización. Las curvas sólidas se obtuvieron de aproximar con un polinomio cúbico la energía total variacional para los campos $B = (0.0 ; 0.235 ; 0.47) \times 10^9$ Gauss. Para los tres estados: $1s_0$, $2p_{-1}$ y $2p_0$ la energía total obtenida con los cálculos variacionales, hasta cierto valor del campo magnético, está por arriba del valor de la energía total calculada con el método de no-linealización. Es importante recalcar que este es solo un análisis cualitativo. Para poder realizar una correcta comparación sería necesario hacer el cálculo variacional para estos campos magnéticos. Lo que nos interesa es el comportamiento correcto de la energía variacional para campos magnéticos débiles.

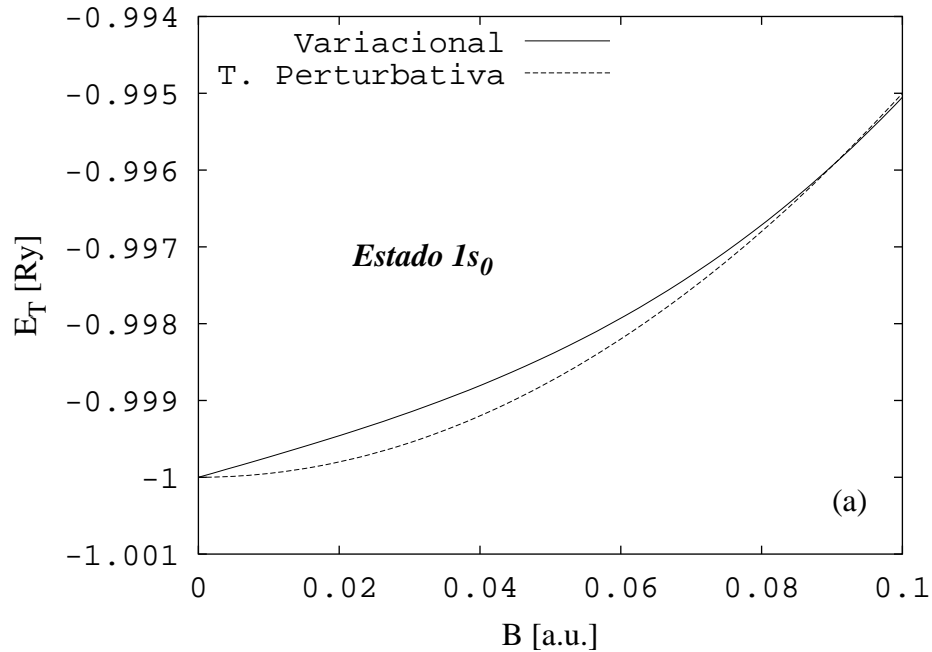


Figura 4.4: Comparación de la energía total del átomo de hidrógeno en campos magnéticos pequeños. Las líneas sólidas corresponden a los cálculos variacionales (ver texto), mientras que las líneas achuradas resultan del cálculo perturbativo utilizando el método de no-linealización. El campo magnético está en unidades atómicas y la energía total en Rydbergs.

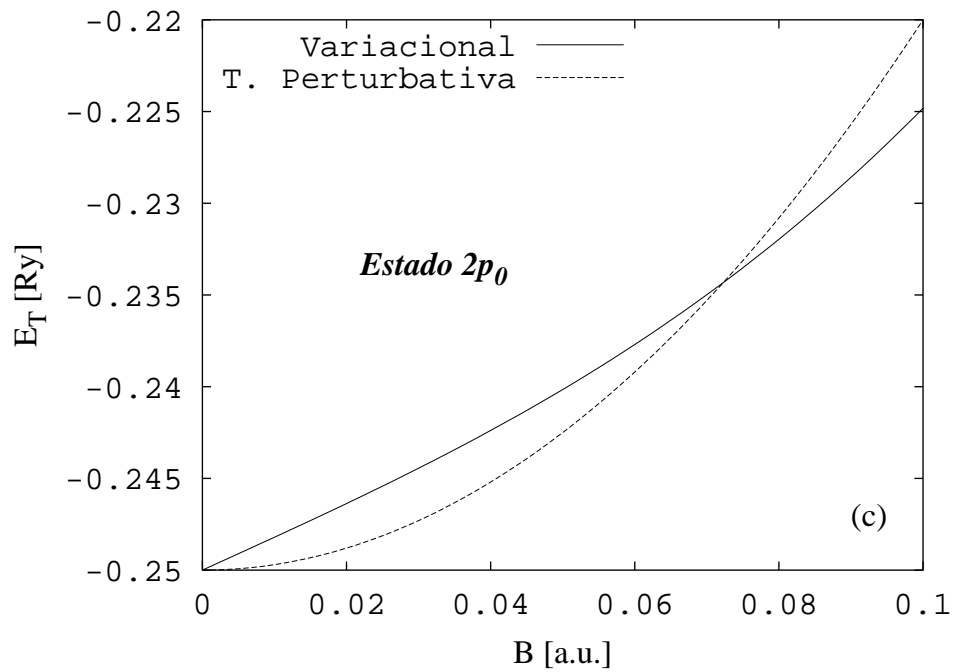
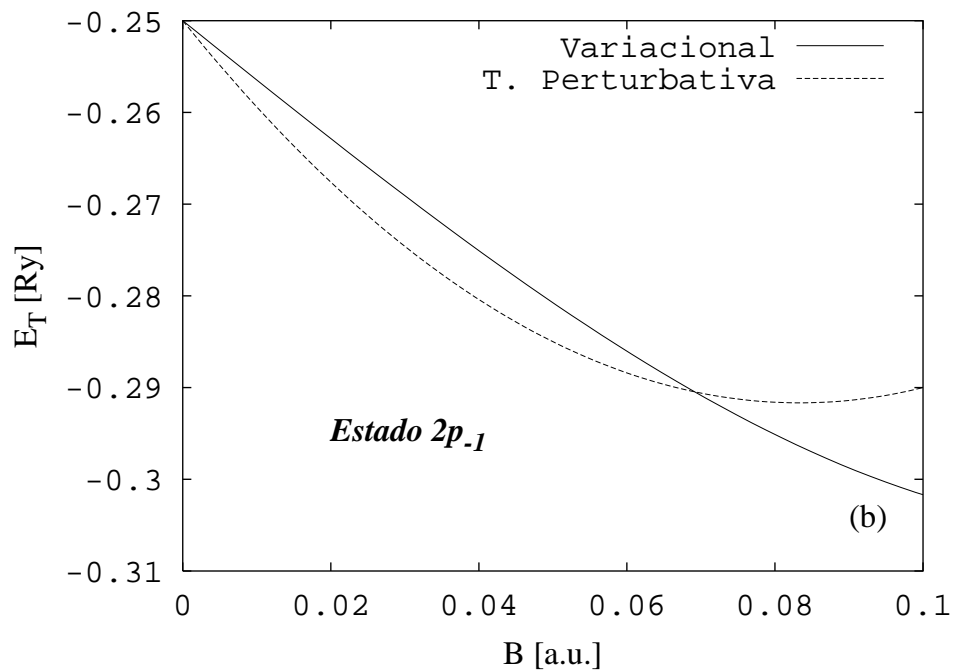


Figura 4.4: Continuación

4.4.2. Campos Magnéticos Intensos

La presencia del protón es crucial para que exista el átomo de hidrógeno. Sin embargo, en el límite de campos magnéticos intensos, el comportamiento del sistema es principalmente descrito por los niveles de Landau del electrón. Para los estados $1s_0$, $2p_{-1}$ y $2p_0$, el número cuántico N de los estados de Landau (ec. (1)) es $N = 0$ [12], por lo que se esperaría que la energía total de estos sistemas tendiera al valor $E_T \rightarrow B$ en el límite $B \rightarrow \infty$. En la Figura 4.5 mostramos la energía total de estos sistemas junto con el caso $E_T = B$, confirmando que para campos magnéticos intensos realmente $E_T \rightarrow B$.

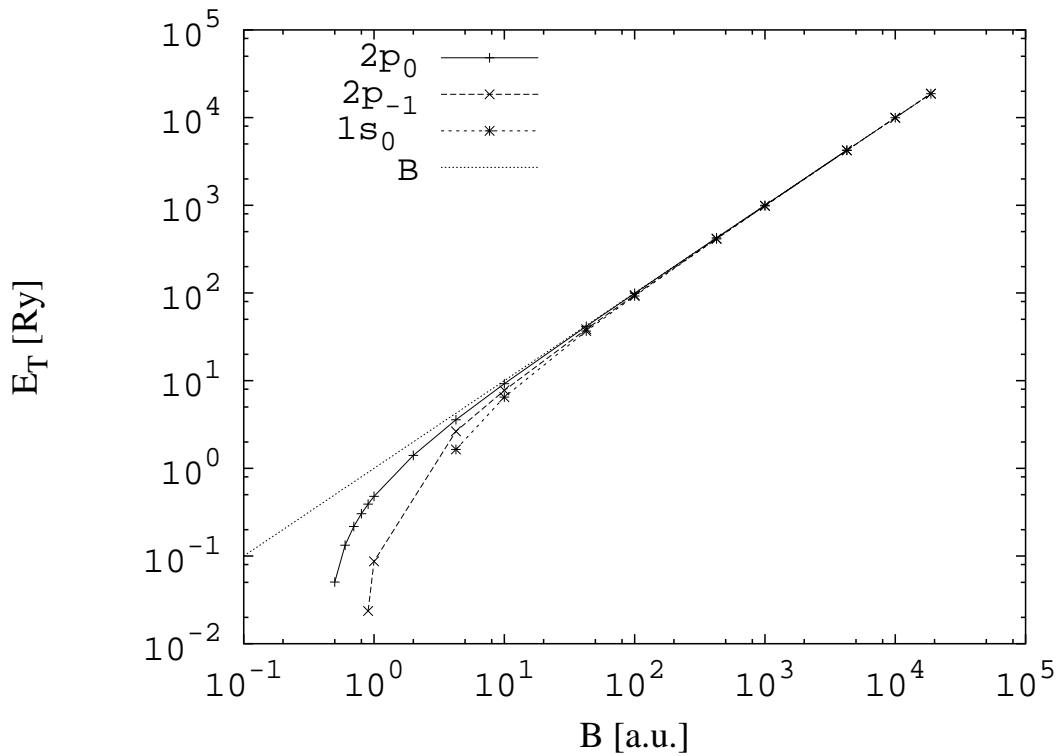


Figura 4.5: Energía total del átomo de hidrógeno en un campo magnético para los estados $1s_0$, $2p_{-1}$ y $2p_0$. Se muestra la curva $E_T^{libre} = B$ correspondiente a la energía de un electrón libre en un campo magnético B . Las cruces indican los resultados de los cálculos variacionales y entre estos puntos trazamos segmentos de líneas rectas.

4.4 El Espectro

Por otra parte, el comportamiento asintótico esperado para la energía de amarre del estado base $1s_0$ es⁴ $E_b = \log^2 B$ [16]. En la figura 4.6 se muestra que esta primera aproximación no concuerda con los resultados de los cálculos variacionales. Para campos del orden de 10^{13} G, la aproximación asintótica da un valor que es tres veces mayor que lo calculado. Además, observamos que a medida que el campo magnético se incrementa, los estados $1s_0$ y $2p_{-1}$ tienden hacia un mismo valor, mientras que el estado $2p_0$ se aleja de los dos anteriores.

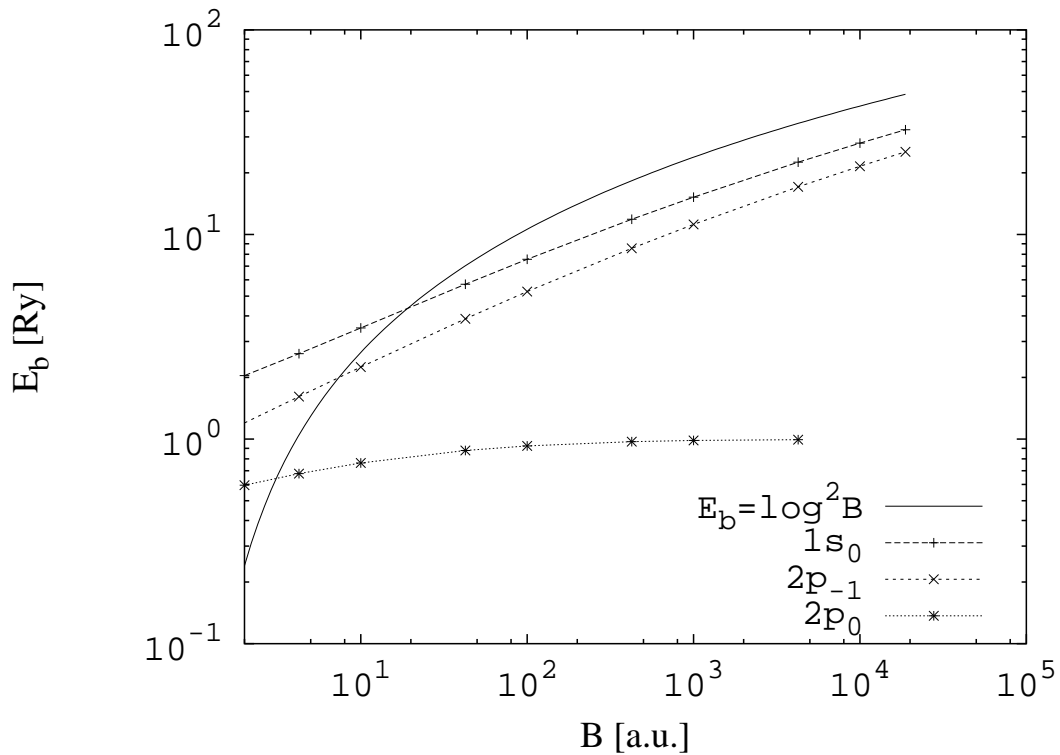


Figura 4.6: Energía de amarre del átomo de hidrógeno en un campo magnético para los estados $1s_0$, $2p_{-1}$ y $2p_0$. Se muestra la curva que da el comportamiento asintótico $E_b^{as} = \log^2 B$. Los resultados se indican por las cruces sobre los cuales trazamos líneas rectas.

⁴En Rydbergs y el campo magnético en unidades atómicas.

Parte II

Transiciones Radiativas

Transiciones Radiativas: Aproximación Dipolar Eléctrica

¿Cómo es que podemos detectar la presencia de un átomo si este presenta un espectro discreto *estacionario*? Una característica de los sistemas atómicos es la emisión y absorción de radiación, y es precisamente esta propiedad, a través de los espectros de emisión y absorción, con la cual es posible la observación y detección de los átomos.

Si el átomo es perturbado por radiación electromagnética, el hamiltoniano del sistema es ahora dependiente del tiempo. Para este tipo de problemas existe la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo con la cual estudiaremos las transiciones entre niveles de energía del átomo de hidrógeno. Para ello consideraremos la aproximación dipolar eléctrica. En el desarrollo de este capítulo, seguimos el libro de I.I. Sobel'man, "Introduction To The Theory Of Atomic Spectra" [10].

5.1. Teoría de Perturbaciones Dependiente del Tiempo

Consideremos un sistema exactamente soluble descrito por un hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$ con eigenfunciones $\psi_n^{(0)}$ y un espectro discreto E_n . Si a este sistema le aplicamos una pequeña perturbación dependiente del tiempo descrita por $V(t)$, el nuevo hamiltoniano tiene la forma

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + V(t). \quad (5.1)$$

La pregunta es: ¿cómo resolver este nuevo sistema?, *i.e.* cómo encontrar las soluciones $\Psi(\mathbf{r}; t)$ al problema espectral

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi(\mathbf{r}; t) = (\hat{\mathcal{H}}_0 + V(t))\Psi(\mathbf{r}; t) = \mathcal{E}\Psi(\mathbf{r}; t). \quad (5.2)$$

Para ello utilizamos el hecho de que el conjunto de funciones propias del sistema sin perturbar $\psi_n^{(0)}$ forman un conjunto completo. Si consideramos la solución de

la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo del sistema no perturbado, la dependencia temporal es determinada por el factor de fase $e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$. Multiplicando la solución completa $\psi_n^{(0)} e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$ por un coeficiente dependiente del tiempo $C_n(t)$, buscamos una solución de la forma

$$\Psi(\mathbf{r}; t) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n(t) \psi_n^{(0)} e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}. \quad (5.3)$$

A diferencia de la teoría de perturbaciones, $|C_n(t)|^2$ no es mas la probabilidad de que el sistema se encuentre en algún estado del sistema sino la probabilidad de que el sistema realice una transición de un estado a otro. Estos estados denominados *estado inicial* y *estado final* pertenecen al espectro discreto del sistema sin perturbar. Para continuar es necesario un desarrollo en serie de los coeficientes $C_n(t)$, y es precisamente el primer orden de tal desarrollo lo que nos conduce a la **fórmula general de la probabilidad de transición**¹ $P_{i \rightarrow f}$

$$P_{i \rightarrow f} = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} \langle \psi_f^{(0)} | V(t') | \psi_i^{(0)} \rangle dt' \right|^2, \quad (5.4)$$

donde $\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$, con $E_{f,i}$ la energía de los estados final $\psi_f^{(0)}$ e inicial $\psi_i^{(0)}$ respectivamente. El intervalo de integración corresponde al tiempo durante el cual la perturbación actúa sobre el sistema, y el elemento de matriz $V_{fi} \equiv \langle \psi_f^{(0)} | V(t') | \psi_i^{(0)} \rangle$ se calcula entre las funciones propias del estado inicial y final del sistema sin perturbar.

5.2. Interacción de Radiación con la Materia

Una manera de resolver las ecuaciones de Maxwell

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} &= \frac{1}{\epsilon_0} \rho & ; & & \nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 & ; & & \nabla \times \mathbf{B} - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= \mu_0 \mathbf{J} \end{aligned}$$

consiste en definir los potenciales vectorial \mathbf{A} y escalar ϕ para el campo magnético y eléctrico respectivamente

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (5.5)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \quad (5.6)$$

¹En el Apéndice D.1 se desarrollan los pasos necesarios para obtener esta expresión.

5.2 Interacción de Radiación con la Materia

Al sustituir estas expresiones en las ecuaciones no homogéneas de Maxwell obtenemos la ecuaciones que deben satisfacer los potenciales \mathbf{A} y ϕ .

$$\begin{aligned}\Delta\phi + \frac{\partial}{\partial t}\nabla\cdot\mathbf{A} &= -\frac{1}{\epsilon_0}\rho, \\ \Delta\mathbf{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} - \nabla\left(\nabla\cdot\mathbf{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) &= -\mu_0\mathbf{J}.\end{aligned}$$

En el vacío $\mathbf{J} = \rho = 0$, y con la condición de la norma de Lorentz $\nabla\cdot\mathbf{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t} = 0$, tenemos

$$\Delta\phi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = 0, \quad (5.7)$$

$$\Delta\mathbf{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{A}}{\partial t^2} = 0. \quad (5.8)$$

De donde vemos que ambos potenciales satisfacen la ecuación de onda. Además, si conocemos solo uno de ellos, la condición de norma de Lorentz nos permite obtener el otro. Elijamos para ello el potencial vectorial en la forma de una onda plana²

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}; t) = \mathbf{A}_0^*e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + \mathbf{A}_0e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)},$$

donde \mathbf{k} es el vector de onda, \mathbf{r} el vector de posición y \mathbf{A}_0 el vector que determina la dirección de $\mathbf{A}(\mathbf{r}; t)$. Confinando la radiación dentro de un volumen \mathcal{V} resulta³

$\mathbf{A}_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega\mathcal{V}}}\vec{\epsilon}$, donde ahora la dirección del potencial vectorial está determinada por el vector unitario $\vec{\epsilon}$. La forma final del potencial vectorial es

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}; t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega\mathcal{V}}}\left[e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}\right]\vec{\epsilon}. \quad (5.9)$$

Por otra parte, si tomamos un sistema cuyo hamiltoniano es $\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V$ y lo colocamos en la zona de radiación, el hamiltoniano del nuevo sistema es

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= \frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{P}} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}; \mathbf{t}))^2 + V \\ &= \hat{\mathcal{H}}_0 + \frac{e}{m}\mathbf{A}(\mathbf{r}; \mathbf{t})\cdot\hat{\mathbf{P}} + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}^2(\mathbf{r}; \mathbf{t}),\end{aligned}$$

con $\mathbf{A}(\mathbf{r}; t)$ en la norma de Coulomb, *i.e.* $\nabla\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}; t) = 0$. El tipo de interacción que se estudiará consiste en la emisión o absorción de un solo fotón, por lo que el último

² ω es la frecuencia de la radiación.

³La deducción de este coeficiente se da en el Apéndice D.2.

término no es considerado⁴. De modo que el potencial perturbativo es

$$V(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}; \mathbf{t}) \cdot \hat{\mathbf{P}}.$$

Con la expresión para el potencial vectorial (5.9) y definiendo

$$\hat{v} = \frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega\mathcal{V}}} \vec{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{P}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (5.10)$$

el potencial perturbativo es reescrito como

$$V(\mathbf{r}, t) = \hat{v}e^{-i\omega t} + \hat{v}^\dagger e^{i\omega t}. \quad (5.11)$$

De esta ultima expresión la probabilidad de transición (ec. (5.4)) es

$$\begin{aligned} P_{i \rightarrow f} &= \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_f t'} \langle \psi_f^{(0)} | \hat{v} e^{-i\omega t'} + \hat{v}^\dagger e^{i\omega t'} | \psi_i^{(0)} \rangle dt' \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle \psi_f^{(0)} | \hat{v} | \psi_i^{(0)} \rangle \int_0^t e^{i(\omega_f - \omega)t'} dt' + \langle \psi_f^{(0)} | \hat{v}^\dagger | \psi_i^{(0)} \rangle \int_0^t e^{i(\omega_f + \omega)t'} dt' \right|^2. \end{aligned}$$

Cuando el tiempo durante el cual la perturbación actúa sobre el sistema es grande, la integración en la variable temporal resulta⁵

$$\left| \int_0^t e^{i(\omega_f \pm \omega)t'} dt' \right|^2 = 2\pi t \delta(\omega_f \pm \omega),$$

donde δ es la función Delta de Dirac. Así se tiene

$$\begin{aligned} P_{i \rightarrow f} &= \frac{2\pi t}{\hbar^2} \left\{ |\langle \psi_f^{(0)} | \hat{v} | \psi_i^{(0)} \rangle|^2 \delta(\omega_f - \omega) + |\langle \psi_f^{(0)} | \hat{v}^\dagger | \psi_i^{(0)} \rangle|^2 \delta(\omega_f + \omega) \right. \\ &\quad \left. + \langle \psi_f^{(0)} | \hat{v} | \psi_i^{(0)} \rangle \langle \psi_f^{(0)} | \hat{v}^\dagger | \psi_i^{(0)} \rangle \delta(\omega_f - \omega) \delta(\omega_f + \omega) \right\}. \end{aligned}$$

En la ecuación anterior, para que el primer término sea diferente de cero se debe de cumplir que $\omega_f - \omega = \frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{\hbar} = 0$, lo cual ocurre solo si la energía del estado final es mayor que la correspondiente al estado inicial. En este proceso, conocido como *absorción*, el sistema absorbe radiación de frecuencia $\omega = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$. Con el mismo análisis se encuentra que el segundo término es diferente de cero solo si la energía del estado final E_f es menor que la del estado inicial E_i . En este caso el sistema

⁴En electrodinámica cuántica, el potencial vectorial \mathbf{A} se trata como un operador de creación y aniquilación de fotones por lo que un término \mathbf{A}^2 indica que estos procesos se realizan con dos fotones a la vez.

⁵El cálculo de estas integrales se presenta en el Apéndice D.3.

5.3 Aproximación Dipolar Eléctrica

emite radiación de frecuencia $\omega = \frac{E_i - E_f}{\hbar}$ y al proceso se le llama *emisión inducida*. El tercer término es diferente de cero solo si las dos condiciones anteriores se cumplen simultáneamente por lo que $E_f = E_i$, *i.e.* no hay transición alguna, así que este término es igual a cero.

La *probabilidad por unidad de tiempo de que ocurra una transición* $\Gamma_{i \rightarrow f}$ de un estado inicial con energía E_i a un estado final de energía E_f consta de dos partes: la probabilidad de absorción por unidad de tiempo $\Gamma_{i \rightarrow f}^a$ y la probabilidad de emisión inducida por unidad de tiempo $\Gamma_{i \rightarrow f}^{em}$. Con la propiedad de la función Delta de Dirac $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$ se tiene

$$\begin{aligned}\Gamma_{i \rightarrow f}^a &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f^{(0)} | \hat{v} | \psi_i^{(0)} \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \\ \Gamma_{i \rightarrow f}^{em} &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f^{(0)} | \hat{v}^\dagger | \psi_i^{(0)} \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega).\end{aligned}\quad (5.12)$$

En este punto es necesario hacer una consideración más: cuando el fotón se detecta, éste se encuentra en un intervalo de momento $\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}$, alrededor de $|\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c}$ y la transición medida es

$$\sum_{\Delta\mathbf{k}} \Gamma_{if};$$

entonces buscamos el número de fotones en los estados entre $\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}$ *i.e.* el número de estados de los fotones. Esto se calcula en el Apéndice D.4 y resulta ser

$$\sum_{\Delta\mathbf{k}} \Gamma_{if} = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3} \int d\Omega \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 d\left(\frac{\omega}{c}\right) \hbar^3 \Gamma_{if},$$

donde $d\Omega$ es el elemento de ángulo sólido. Con las expresiones para Γ_{if} (ec. (5.12)), un cálculo directo nos conduce a las *expresiones generales de la probabilidad de transición por unidad de tiempo* $\mathcal{W}_{i \rightarrow f}$, tanto para absorción como para emisión estimulada

$$\mathcal{W}_{i \rightarrow f}^{asb} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2\pi\hbar^2 c^3 m^2} \int d\Omega (E_f - E_i) |\langle \psi_f^{(0)} | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \vec{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{P}} | \psi_i^{(0)} \rangle|^2, \quad (5.13)$$

$$\mathcal{W}_{i \rightarrow f}^{em} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2\pi\hbar^2 c^3 m^2} \int d\Omega (E_f - E_i) |\langle \psi_f^{(0)} | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \vec{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{P}} | \psi_i^{(0)} \rangle|^2. \quad (5.14)$$

5.3. Aproximación Dipolar Eléctrica

Para cálculos explícitos de la probabilidad de transición $\mathcal{W}_{i \rightarrow f}$, resulta conveniente considerar algunas simplificaciones a la ecuación general (5.13). Consideremos para ello el término exponencial del elemento de matriz $\langle \psi_f^{(0)} | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \vec{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{P}} | \psi_i^{(0)} \rangle$ y analicemos

el término $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$. Escribiendo la norma del vector de onda como $|\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c} = \frac{\hbar\omega}{\hbar c}$, en el numerador tenemos unidades de energía, y ya que nuestro sistema es el átomo de hidrógeno, consideremos la energía de su estado base $E_1 = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2$, con $\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c}$ la constante de estructura fina. \mathbf{r} por su parte la podemos considerar como el radio de Bohr $a_0 = \frac{\hbar}{m c \alpha}$, con lo cual tenemos:

$$\begin{aligned} |\mathbf{k}||\mathbf{r}| &= \left(\frac{\hbar\omega}{\hbar c} \right) a_0 \\ &= \frac{-\frac{1}{2}mc^2\alpha^2}{\hbar c} \left(\frac{\hbar}{m c \alpha} \right) \\ &= -\frac{1}{2}\alpha. \end{aligned}$$

Así, una expansión de la función exponencial nos muestra que en orden de magnitud, los elementos de matriz decrecen en potencias de la constante de estructura fina α . Por ello podemos tomar

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1.$$

Esta aproximación, se conoce como la *aproximación dipolar eléctrica*⁶.

En la aproximación dipolar eléctrica, las probabilidades de transición para emisión estimulada y absorción son iguales (ec. (5.13) y ec. (5.14)), y es suficiente trabajar con una de ellas, a la que se llama simplemente *probabilidad de transición* $\mathcal{W}_{i \rightarrow f}$.

$$\mathcal{W}_{i \rightarrow f} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2\pi\hbar^2 c^3 m^2} \int d\Omega (E_f - E_i) |\langle \psi_f^{(0)} | \vec{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{P}} | \psi_i^{(0)} \rangle|^2. \quad (5.15)$$

Para escribir en una forma práctica la probabilidad de transición, notemos que el vector unitario $\vec{\epsilon}$ es independiente de las variables de las funciones $\psi^{(0)}$ por lo cual

$$\langle \psi_f^{(0)} | \vec{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{P}} | \psi_i^{(0)} \rangle = \vec{\epsilon} \cdot \langle \psi_f^{(0)} | \hat{\mathbf{P}} | \psi_i^{(0)} \rangle. \quad (5.16)$$

Además, recordemos que la derivada temporal de un valor de expectación de un operador $\hat{\mathcal{A}}$ es

$$\frac{d}{dt} \langle \phi_i | \hat{\mathcal{A}} | \phi_j \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \phi_i | [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{A}}] | \phi_j \rangle,$$

y para el caso particular en donde $\hat{\mathcal{A}} = \mathbf{r}$ se obtiene $\frac{d}{dt} \langle \phi_i | \mathbf{r} | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m} | \phi_j \rangle$. Aplicando ésto a nuestro caso $\hat{\mathcal{A}} = \hat{\mathbf{P}}$ (ec. (5.16)), con el hamiltoniano del sistema

⁶El considerar términos de mayor orden da origen a las aproximaciones cuadrupolar eléctrica, dipolar magnética, etc.

5.3 Aproximación Dipolar Eléctrica

sin perturbar $\hat{\mathcal{H}}\psi^{(0)} = (\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V)\psi^{(0)} = E\psi^{(0)}$ tenemos

$$\begin{aligned}\langle \psi_f^{(0)} | \vec{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_i^{(0)} \rangle &= m \vec{\varepsilon} \cdot \frac{d}{dt} \langle \psi_f^{(0)} | \mathbf{r} | \psi_i^{(0)} \rangle \\ &= \frac{im}{\hbar} \vec{\varepsilon} \cdot \langle \psi_f^{(0)} | [\hat{\mathcal{H}}, \mathbf{r}] | \psi_i^{(0)} \rangle \\ &= \frac{im}{\hbar} (E_f - E_i) \vec{\varepsilon} \cdot \langle \psi_f^{(0)} | \mathbf{r} | \psi_i^{(0)} \rangle.\end{aligned}$$

Con este resultado, la probabilidad de transición (ec. (5.15)) resulta

$$\mathcal{W}_{i \rightarrow f} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2\pi\hbar^4 c^3} \int d\Omega (E_f - E_i)^3 |\vec{\varepsilon} \cdot \langle \psi_f^{(0)} | (-e\mathbf{r}) | \psi_i^{(0)} \rangle|^2.$$

Definiendo el *operador vectorial dipolar eléctrico* como

$$\hat{\mathcal{D}} = -e\mathbf{r},$$

y sus elementos de matriz como

$$\mathbf{D}_{fi} = \langle \psi_f^{(0)} | \hat{\mathcal{D}} | \psi_i^{(0)} \rangle,$$

reescribimos la ecuación anterior en la siguiente forma

$$\mathcal{W}_{i \rightarrow f} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\omega_{fi}^3}{2\pi\hbar c^3} \int d\Omega |\vec{\varepsilon} \cdot \mathbf{D}_{fi}|^2, \quad (5.17)$$

con la ya definida $\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$.

Analicemos ahora el integrando $\vec{\varepsilon} \cdot \mathbf{D}_{fi}$ de la ecuación (5.17). Para ello, introducimos un sistema de coordenadas y colocamos al vector dipolar eléctrico $\vec{\mathcal{D}}$ en la dirección z de este sistema. Ya que estamos considerando la norma de Coulomb $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, o de manera equivalente $\mathbf{k} \cdot \mathbf{A} = 0$, y ya que el vector $\vec{\varepsilon}$ define la dirección del potencial vectorial, $\vec{\varepsilon}$ es ortogonal al vector de onda \mathbf{k} . En la Figura 5.1 vemos que el ángulo entre $\vec{\mathcal{D}}$ y $\vec{\varepsilon}$ es $\frac{\pi}{2} - \theta$, siendo θ el ángulo polar. Así, $|\vec{\varepsilon} \cdot \mathbf{D}_{fi}| = |\vec{\varepsilon}| |\mathbf{D}_{fi}| \cos(\frac{\pi}{2} - \theta) = |\mathbf{D}_{fi}| \sin \theta$, y la integral del cuadrado de esta expresión

$$\begin{aligned}\int d\Omega |\vec{\varepsilon} \cdot \mathbf{D}_{fi}|^2 &= \int d\Omega |\mathbf{D}_{fi}|^2 \sin^2 \theta \\ &= |\mathbf{D}_{fi}|^2 \int d\Omega \sin^2 \theta \\ &= \frac{8}{3} \pi |\mathbf{D}_{fi}|^2.\end{aligned}$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación (5.17)

$$\begin{aligned}\mathcal{W}_{i \rightarrow f} &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4}{3} \frac{\omega_{fi}^3}{\hbar c^3} |\mathbf{D}_{fi}|^2 \\ &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega_{fi}^3}{\hbar c^3} |\langle \psi_f^{(0)} | \mathbf{r} | \psi_i^{(0)} \rangle|^2.\end{aligned}$$

Ahora consideremos el factor constante⁷

$$\begin{aligned}\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega_{fi}^3}{\hbar c^3} &= \frac{1}{3} \left(\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right)^2 4\pi\epsilon_0 \left(\frac{4\hbar^3 \omega_{fi}^3}{m^2 c^3 e^2} \right) \\ &= \frac{1}{3} \frac{1}{a_0^2} \left(\frac{4\pi\epsilon_0 \hbar c}{e^2} \right) \left(\frac{4\hbar^2 \omega_{fi}^3}{m^2 c^4} \right) = \frac{1}{3} \frac{1}{a_0^2} \frac{1}{\alpha} \left(\frac{4\hbar^2 \omega_{fi}^3}{m^2 c^4} \right) \\ &= \frac{1}{3a_0^2} \frac{\alpha^5 m c^2}{2\hbar} \left(\frac{2\hbar \omega_{fi}}{\alpha^2 m c^2} \right)^3 \\ &= \frac{1}{3a_0^2} \frac{1}{\tau_0} \left(\frac{\hbar \omega_{fi}}{E_\infty} \right)^3,\end{aligned}$$

donde se definió $\frac{1}{\tau_0} = \frac{\alpha^5 m c^2}{2\hbar} \approx 8.03 \times 10^9 \text{ seg}^{-1}$ y $E_\infty = \frac{1}{2} m c^2 \alpha^2$ es la energía de Rydberg, la cual corresponde al valor de la energía del estado base del átomo de hidrógeno. Con estos resultados, la expresión para la *probabilidad de transición* por unidad de tiempo resulta ser

$$\boxed{\mathcal{W}_{i \rightarrow f} = \frac{1}{3\tau_0} \left(\frac{\hbar \omega_{fi}}{E_\infty} \right)^3 |\langle \psi_f | \frac{\mathbf{r}}{a_0} | \psi_i \rangle|^2.} \quad (5.18)$$

5.4. Cantidades Características de las Transiciones Radiativas

Aunque la ec. (5.18) es la expresión final para el cálculo de probabilidades de transición, resulta conveniente hacer algunas definiciones a partir de ella. Antes de eso, reescribimos esta ecuación en unidades atómicas⁸, en donde $a_0 = 1$ y con la energía medida en Rydbergs, $E_\infty = 1$. Además, es común en lugar de utilizar el vector de

⁷Las definiciones de las constantes que se utilizan en esta deducción se presentan en el Apéndice C.2.

⁸Apéndice C.1.

5.4 Cantidades Características de las Transiciones Radiativas

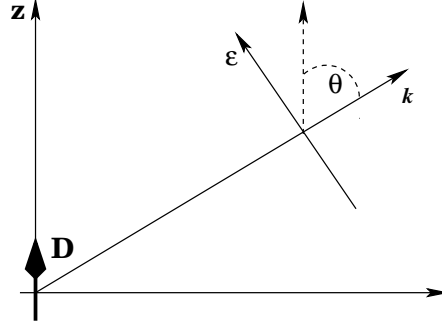


Figura 5.1: Configuración del sistema en donde se muestra el ángulo entre el dipolo eléctrico \mathbf{D} y el vector $\vec{\varepsilon}$.

posición en la forma estándar $\mathbf{r} = (x, y, z)$, considerar sus componentes esféricas $r^{(q)} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_1^q(\theta, \varphi)$ con $q = 0, \pm 1$. Explícitamente

$$\begin{aligned} r^{(0)} &= r \cos \theta, \\ r^{(\pm 1)} &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}} r \sin \theta e^{\pm i\varphi}. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Con ello, la probabilidad de transición de cada componente esférica q del vector de posición \mathbf{r} toma la forma

$$\mathcal{W}_{i \rightarrow f}^{(q)} = \frac{1}{3\tau_0} (E_f - E_i)^3 |\langle \psi_f | r^{(q)} | \psi_i \rangle|^2.$$

Definiendo el elemento de matriz correspondiente como $p_{fi}^{(q)}$

$$p_{fi}^{(q)} = \langle \psi_f | r^{(q)} | \psi_i \rangle, \quad (5.20)$$

el cuadrado de este elemento de matriz es conocido como **fuerza dipolar**⁹ $d_{fi}^{(q)}$:

$$d_{fi}^{(q)} = |p_{fi}^{(q)}|^2. \quad (5.21)$$

Una cantidad adimensional importante en el cálculo de las transiciones es la llamada **fuerza de oscilador**¹⁰ $f_{fi}^{(q)}$:

$$f_{fi}^{(q)} = (E_f - E_i) |p_{fi}^{(q)}|^2. \quad (5.22)$$

⁹En ingles *Dipole Strength*.

¹⁰En ingles *Oscillator Strength*

Y finalmente la *probabilidad de transición por unidad de tiempo* es

$$w_{fi}^{(q)} = \frac{1}{3\tau_0} (E_f - E_i)^3 |p_{fi}^{(q)}|^2. \quad (5.23)$$

Son precisamente estas tres cantidades, (5.21), (5.22) y (5.23), las que se calculan para el átomo de hidrógeno en un campo magnético.

5.4.1. Iones Hidrogenoides: He^+ , Li^{2+} , ...

Si consideramos el caso de iones hidrogenoides, es posible obtener expresiones para la fuerza dipolar, fuerza de oscilador y la probabilidad de transición en términos de aquellas para el átomo de hidrógeno. Comencemos calculando el elemento de matriz $p_{fi}^{(q)}$. Para ello recordemos que para obtener las expresiones de la energía y las funciones propias (ecuaciones (1.19) y (1.20)), realizamos un cambio de escala en la longitud de modo que $\mathbf{r} = \frac{\mathbf{r}'}{\mathcal{Z}}$. Así, el elemento de volumen es $d\mathbf{r} = \frac{d\mathbf{r}'}{\mathcal{Z}^3}$, y

$$\begin{aligned} p_{fi}^{(q)}(\mathcal{Z}, B) &= \langle \psi_f(\mathcal{Z}, B; \mathbf{r}) | r^{(q)} | \psi_i(\mathcal{Z}, B; \mathbf{r}) \rangle \\ &= \langle \mathcal{Z}^{\frac{3}{2}} \psi_f(\mathcal{Z} = 1, B/\mathcal{Z}^2; \mathbf{r}') | \frac{r'^{(q)}}{\mathcal{Z}} | \mathcal{Z}^{\frac{3}{2}} \psi_i(\mathcal{Z} = 1, B/\mathcal{Z}^2; \mathbf{r}') \rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \langle \psi_f(\mathcal{Z} = 1, B/\mathcal{Z}^2; \mathbf{r}') | r'^{(q)} | \psi_i(\mathcal{Z} = 1, B/\mathcal{Z}^2; \mathbf{r}') \rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} p_{fi}^{(q)}(\mathcal{Z} = 1, B/\mathcal{Z}^2), \end{aligned}$$

y finalmente

$$p_{fi}^{(q)}(\mathcal{Z}, B) = \frac{1}{\mathcal{Z}} p_{fi}^{(q)}(\mathcal{Z} = 1, B/\mathcal{Z}^2). \quad (5.24)$$

Por lo que la relación de escalamiento de la fuerza dipolar resulta ser

$$d_{fi}^{(q)}(\mathcal{Z}, B) = \mathcal{Z}^{-2} d_{fi}^{(q)}(\mathcal{Z} = 1, B/\mathcal{Z}^2). \quad (5.25)$$

Ahora, de la relación de escalamiento entre la energía del átomo de hidrógeno y el ión hidrogenoide (ec. (1.19)), junto con la expresión correspondiente de la fuerza dipolar (ec. (5.25)), obtenemos las expresiones de las relaciones de escalamiento para la fuerza de oscilador y la probabilidad de transición:

$$f_{fi}^{(q)}(\mathcal{Z}, B) = f_{fi}^{(q)}(\mathcal{Z} = 1, B/\mathcal{Z}^2), \quad (5.26)$$

$$w_{fi}^{(q)}(\mathcal{Z}, B) = \mathcal{Z}^4 w_{fi}^{(q)}(\mathcal{Z} = 1, B/\mathcal{Z}^2). \quad (5.27)$$

Así, a partir de los resultados que obtengamos para el átomo de hidrógeno, es posible, con las relaciones de escalamiento (5.25), (5.26) y (5.27) obtener las cantidades características de las transiciones radiativas para cualquier ión hidrogenoide

de número atómico Z . Un análisis un poco más minucioso nos muestra que estas relaciones tienen un sentido más profundo: el cálculo de alguna cantidad característica no tiene porqué comenzar con el átomo de hidrógeno y a partir de este obtener resultados para cualquier otro ión hidrogenoide. Podemos comenzar con cualquier ión hidrogenoide, utilizar las relaciones de escalamiento y obtener resultados para el átomo de hidrógeno; a partir de los cuales a su vez podemos, nuevamente con las relaciones de escalamiento, obtener las cantidades características para cualquier ión hidrogenoide, *i.e.* si obtenemos alguna cantidad característica para *cualquier* ión hidrogenoide podemos obtener esta misma para todo ión hidrogenoide.

5.5. Polarización de la Radiación

La dependencia en la coordenada angular φ de las funciones de prueba presentadas para los estados $1s_0$, $2p_0$ y $2p_{-1}$ (ecuaciones (3.13), (3.16) y (3.15)) es

$$\begin{aligned}\psi_{1s_0} &\propto 1, \\ \psi_{2p_m} &\propto e^{im\varphi}.\end{aligned}\tag{5.28}$$

Ahora, las componentes del vector de posición en coordenadas esféricas pueden escribirse en términos de los armónicos esféricos como

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} r \sin \theta \cos \varphi \\ r \sin \theta \sin \varphi \\ r \cos \theta \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} r \begin{pmatrix} (-Y_1^1 + Y_{-1}^1) \\ i(Y_1^1 + Y_{-1}^1) \\ \sqrt{2}r Y_1^0 \end{pmatrix}.$$

Al considerar una transición de un estado $2p_m$ al estado $1s_0$, poniendo atención en la dependencia de la variable φ , los elementos de matriz $\mathbf{D}_{fi} = \langle \psi_f | (-e\mathbf{r}) | \psi_i \rangle$ resultan

$$\mathbf{D}_{fi} = \gamma \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}}(-\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}) \\ \frac{i}{\sqrt{6}}(\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}) \\ \frac{1}{\sqrt{3}}\delta_{m,0} \end{pmatrix},\tag{5.29}$$

donde γ es una constante que resulta de la integración de las variables r y θ .

Por otra parte, la condición que el potencial vectorial \mathbf{A} (ec. (5.9)) este en la norma de Coulomb es equivalente a la condición de transversalidad:

$$\mathbf{k} \cdot \vec{\varepsilon} = 0,$$

con \mathbf{k} el vector de onda y $\vec{\varepsilon}$ un vector unitario en la dirección del potencial vectorial \mathbf{A} . Consideremos ahora una base $\vec{\varepsilon}_1$ y $\vec{\varepsilon}_2$ perpendicular al vector \mathbf{k} de modo que

$(\vec{\varepsilon}_1, \vec{\varepsilon}_2, \mathbf{k})$ formen un sistema derecho¹¹ (ver Figura 5.2).

$$\vec{\varepsilon}_1 = \begin{pmatrix} \cos \theta' \cos \varphi' \\ \cos \theta' \sin \varphi' \\ -\sin \theta' \end{pmatrix}; \quad \vec{\varepsilon}_2 = \begin{pmatrix} -\sin \varphi' \\ \cos \varphi' \\ 0 \end{pmatrix},$$

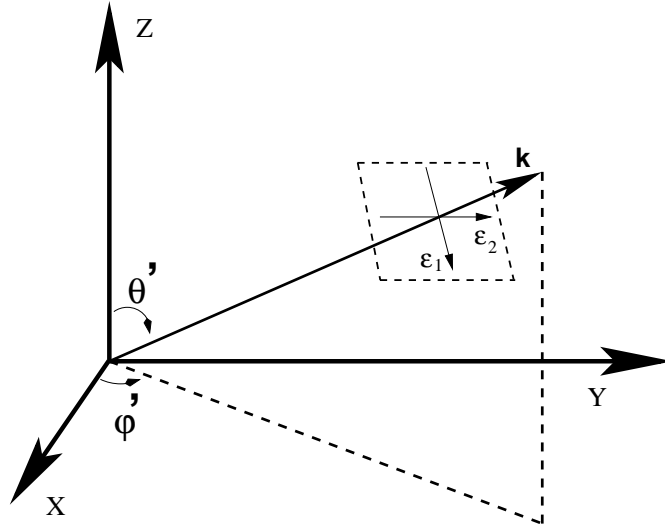


Figura 5.2: Orientación de los vectores base $\vec{\varepsilon}_1$, $\vec{\varepsilon}_2$ y \mathbf{k} . El vector $\vec{\varepsilon}$ se encuentra en el plano perpendicular a \mathbf{k} .

En esta base, el vector $\vec{\varepsilon}$ es $\vec{\varepsilon} = \vec{\varepsilon}_1 + \vec{\varepsilon}_2$. Y sustituyendo en la probabilidad de transición $\mathcal{W}_{i \rightarrow f}$ (ec. (5.17)), tenemos $\vec{\varepsilon} \cdot \mathbf{D}_{fi} = \vec{\varepsilon}_1 \cdot \mathbf{D}_{fi} + \vec{\varepsilon}_2 \cdot \mathbf{D}_{fi}$. Con el vector \mathbf{D}_{fi} ya obtenido (ec. (5.29)) se tiene

$$\vec{\varepsilon}_1 \cdot \mathbf{D}_{fi} = \gamma \left(-\frac{\delta_{m,1}}{\sqrt{6}} \cos \theta' e^{-i\varphi'} + \frac{\delta_{m,-1}}{\sqrt{6}} \cos \theta' e^{i\varphi'} - \frac{\delta_{m,0}}{\sqrt{3}} \sin \theta' \right), \quad (5.30)$$

$$\vec{\varepsilon}_2 \cdot \mathbf{D}_{fi} = \gamma \left(-\frac{i\delta_{m,1}}{\sqrt{6}} e^{-i\varphi'} + \frac{i\delta_{m,-1}}{\sqrt{6}} e^{i\varphi'} \right). \quad (5.31)$$

Entonces, si el estado inicial es $2p_{-1}$ ($2p_1$), los términos diferentes de cero son aquellos que contienen el factor $\delta_{m,-1}$ ($\delta_{m,1}$), los cuales son proporcionales a $e^{i\varphi'}$ ($e^{-i\varphi'}$), por lo que la radiación emitida es *polarizada circularmente izquierda* (derecha). Si el estado inicial es $2p_0$, solamente el término proporcional a $\delta_{m,0}$ es diferente de cero, y la luz es *polarizada linealmente* en la dirección del eje z .

¹¹Estas coordenadas θ' y φ' corresponden al vector de onda \mathbf{k} .

5.7 Reglas de Selección

Si consideramos $|\vec{\varepsilon} \cdot \mathbf{D}_{fi}|^2$ obtenemos

$$|\vec{\varepsilon} \cdot \mathbf{D}_{fi}|^2 = \frac{\gamma^2}{3} \left(\frac{\delta_{m,1}}{2} (\cos^2 \theta' + 1) + \frac{\delta_{m,-1}}{2} (\cos^2 \theta' + 1) + \delta_{m,0} \sin^2 \theta' \right), \quad (5.32)$$

que nos da la distribución angular de la radiación. En resumen

Transición	Polarización	Distribución angular
$1s_0 \leftrightarrow 2p_0$	Lineal	$\sin^2 \theta'$
$1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$	Circular Izquierda	$1 + \cos^2 \theta'$
$1s_0 \leftrightarrow 2p_1$	Circular Derecha	$1 + \cos^2 \theta'$

Por lo tanto, en la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_0$ la radiación es linealmente polarizada, mientras que para la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$ la radiación esta polarizada circularmente izquierda.

5.6. Reglas de Selección

La dependencia en la variable φ de las componentes esféricas del vector de posición pueden ser escritas de manera genérica como (ec. (5.19))

$$r^{(q)} \propto e^{iq\varphi}.$$

Así también las funciones de prueba (ec. (5.28))

$$\psi_{2p_m} \propto e^{im\varphi}.$$

Si consideramos solo la dependencia de esta variable en el elemento de matriz $p_{if}^{(q)}$ (ec. (5.20)) tenemos

$$\begin{aligned} p_{fi}^{(q)} &\propto \langle \psi_f | r^{(q)} | \psi_i \rangle, \\ &\propto \int_0^{2\pi} e^{-im_f\varphi} e^{iq\varphi} e^{im_i\varphi} d\varphi. \end{aligned}$$

El cual es diferente de cero si $-m_f + q + m_i = 0$. Es decir en la aproximación dipolar eléctrica ocurre una transición sólo si

$$\Delta m = m_f - m_i = q = 0, \pm 1.$$

5.7. Comportamiento de las Transiciones en los Casos Límite

Para verificar cualitativamente los cálculos de las cantidades características de las transiciones radiativas, analizamos el comportamiento de estas para los casos límites de campos magnéticos débiles e intensos. De esta forma podemos hacer una comparación con los resultados obtenidos a partir de los cálculos variacionales.

5.7.1. Teoría de Perturbaciones: B pequeño

Como primera parte consideremos el caso de campos magnéticos débiles. La forma general de la expansión de las funciones de onda es $\Psi = \mathcal{N}(\psi^{(0)} + \lambda\psi^{(1)} + \dots)$. En la tesis limitamos nuestras consideraciones a los dos primeros términos de la expansión¹², *i.e.* $\Psi = \mathcal{N}(\psi^{(0)} + \lambda\psi^{(1)})$. Por otra parte, recordemos que en los cálculos perturbativos, el potencial de perturbación¹³ fue $V_1 = \frac{\rho^2}{4}$, mientras que el término constante mB fue absorbido por la energía. Sin embargo, en los cálculos de la fuerza de oscilador $f_{fi}^{(a)}$ y la probabilidad de transición $w_{fi}^{(a)}$ es necesario considerar explícitamente esta constante. Incluyendo este término en la energía total y utilizando los resultados del Capítulo 2 (ecuaciones (2.19), (2.21) y (2.21)), la forma final de las funciones de onda y la energía total, hasta orden B^2 , es

$$\begin{aligned} E_{1s_0} &= -1 + \frac{B^2}{2} & ; & \quad m = 0, \\ \psi_{1s_0}(r, \theta) &= \left[1 + \frac{B^2}{12} \left\{ \left(\frac{r^2}{2} + \frac{r^3}{3} \right) P_2^0(\theta) - \left(r^2 + \frac{r^3}{3} \right) P_0^0(\theta) \right\} \right] e^{-r}, \end{aligned} \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} E_{2p_{-1}} &= -\frac{1}{4} - B + 6B^2 & ; & \quad m = -1, \\ \psi_{2p_{-1}}(r, \theta) &= \left[1 + \frac{B^2}{18} \left\{ P_2^0(\theta) (4r^2 + r^3) - P_0^0(\theta) (17r^2 + r^3) \right\} \right] \rho e^{-i\varphi} e^{-\frac{1}{2}r}, \end{aligned} \quad (5.34)$$

$$E_{2p_0} = -\frac{1}{4} + 3B^2 & ; & \quad m = 0, \quad (5.35)$$

¹²Es este caso, a primer orden en $\lambda = B^2$, el factor de normalización \mathcal{N} toma la forma:

$$\mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt{\int (\psi^{(0)*} \psi^{(0)} + B^2 (\psi^{(0)*} \psi^{(1)} + \psi^{(1)*} \psi^{(0)})) d\mathbf{r}}}.$$

¹³Con $\lambda = B^2$ como parámetro de perturbación

5.7 Comportamiento de las Transiciones en los Casos Límite

$$\psi_{2p_0}(r, \theta) = \left[1 + \frac{B^2}{18} \left\{ P_2^0(\theta)(4r^2 + r^3) - P_0^0(\theta)(7r^2 + r^3) \right\} \right] z e^{-\frac{1}{2}r},$$

con los factores de normalización:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{1s_0} &= \frac{1}{\sqrt{\pi(1 - \frac{11}{12}B^2)}} \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{11}{24}B^2 \right), \\ \mathcal{N}_{2p_{-1}} &= \frac{1}{\sqrt{64\pi(1 - 94B^2)}} \approx \frac{1}{\sqrt{64\pi}} \left(1 + 47B^2 \right), \\ \mathcal{N}_{2p_0} &= \frac{1}{\sqrt{32\pi(1 - 32B^2)}} \approx \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(1 + 16B^2 \right). \end{aligned} \quad (5.36)$$

Ahora, es posible calcular el elemento de matriz $p_{fi}^{(q)}$ (ec. (5.20)) entre un estado final Ψ_f y un estado inicial Ψ_i . De manera general $\Psi = \psi^{(0)} + \lambda\psi^{(1)} + \dots$, y a primer orden en λ resulta

$$\begin{aligned} p_{fi}^{(q)} &\simeq \langle \mathcal{N}_f(\psi_f^{(0)} + \lambda\psi_f^{(1)}) | r^{(q)} | \mathcal{N}_i(\psi_i^{(0)} + \lambda\psi_i^{(1)}) \rangle \\ &= \mathcal{N}_f \mathcal{N}_i \left\{ \langle \psi_f^{(0)} | r^{(q)} | \psi_i^{(0)} \rangle + \lambda \left(\langle \psi_f^{(0)} | r^{(q)} | \psi_i^{(1)} \rangle + \langle \psi_f^{(1)} | r^{(q)} | \psi_i^{(0)} \rangle \right) \right\}. \end{aligned}$$

Un cálculo directo nos conduce a los elementos de matriz y a partir de estos obtenemos la fuerza dipolar $d_{fi}^{(q)} = |p_{fi}^{(q)}|^2$, obteniendo los siguientes resultados

- $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$

$$p_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)} = 0.7449 + 19.9857 B^2, \quad (5.37)$$

$$p_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(0,-1)} = 0,$$

$$d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)} = 0.5549 + 29.7761 B^2, \quad (5.38)$$

$$d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(0,-1)} = 0.$$

- $1s_0 \leftrightarrow 2p_0$

$$p_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)} = 0.7449 + 6.3009 B^2, \quad (5.39)$$

$$p_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(\pm 1)} = 0,$$

$$d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)} = 0.5549 + 9.3875 B^2, \quad (5.40)$$

$$d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(\pm 1)} = 0.$$

Es importante notar que en ambas transiciones, tanto p_{fi} como d_{fi} son funciones crecientes de B^2 .

Para calcular la fuerza de oscilador y la probabilidad de transición¹⁴ utilizamos las expresiones de la energía total (ecuaciones (5.33), (5.34) y (5.35)). Obteniendo, hasta orden B^2

- $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$

$$f_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)} = 0.4162 - 0.5549B + 25.841 B^2, \quad (5.41)$$

$$w_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)} = (6.2664 - 25.0655B + 171.2801 B^2) \times 10^8 \text{sec}^{-1}. \quad (5.42)$$

- $1s_0 \leftrightarrow 2p_0$

$$f_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(+1)} = 0.4162 + 8.4280 B^2, \quad (5.43)$$

$$w_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(+1)} = (6.2664 + 126.8938 B^2) \times 10^8 \text{sec}^{-1}. \quad (5.44)$$

Aquí notamos un comportamiento diferente al presentado por la fuerza dipolar. Para la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$, la fuerza de oscilador y la probabilidad de transición, comienzan decreciendo hasta cierto valor del campo magnético a partir del cuál su comportamiento cambia a ser creciente con el campo magnético B . La transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_0$ por el contrario, tiene un comportamiento creciente como función del campo magnético para la fuerza de oscilador y la probabilidad de transición.

5.7.2. Comportamiento Asintótico: $B \rightarrow \infty$

Cuando el campo magnético presente es muy intenso, $B \gg 1$, la parte de los orbitales de Landau es dominante. Aun así, la interacción del electrón con el protón es determinante para mantener al electrón en una región finita del espacio¹⁵. Para campos magnéticos muy intensos el sistema adquiere una forma alargada y se puede considerar que se trata de un sistema unidimensional con una interacción de Coulomb efectiva. Ya que se eligió el eje z como la dirección del campo magnético, el potencial Coulombiano unidimensional está en esta misma dirección. Por estas razones resulta adecuado considerar como función de prueba el producto del orbital de Landau del estado base $N = m = 0$ por las funciones del átomo de hidrógeno con el reemplazo $r \rightarrow |z|$. Teniendo en cuenta el factor de normalización se tiene

¹⁴Ya que éstas se obtienen a partir de $d_{fi}^{(q)}$, solo consideramos las componentes diferentes de cero en cada transición.

¹⁵Sin la interacción Coulombiana, la trayectoria del electrón es una hélice con su eje paralelo al campo magnético.

5.7 Comportamiento de las Transiciones en los Casos Límite

- $1s_0$

$$\Psi_{1s_0} = \mathcal{N}_{1s_0} e^{-|z|} e^{-\frac{B}{4}\rho^2} = \sqrt{\frac{B}{2\pi}} e^{-|z|} e^{-\frac{B}{4}\rho^2}. \quad (5.45)$$

- $2p_{-1}$

$$\Psi_{2p_{-1}} = \mathcal{N}_{2p_{-1}} \rho e^{-i\varphi} e^{-\frac{|z|}{2}} e^{-\frac{B}{4}\rho^2} = \frac{B}{\sqrt{8\pi}} \rho e^{-i\varphi} e^{-\frac{|z|}{2}} e^{-\frac{B}{4}\rho^2}. \quad (5.46)$$

- $2p_0$

$$\Psi_{2p_0} = \mathcal{N}_{2p_0} z e^{-\frac{|z|}{2}} e^{-\frac{B}{4}\rho^2} = \sqrt{\frac{B}{8\pi}} z e^{-\frac{|z|}{2}} e^{-\frac{B}{4}\rho^2}. \quad (5.47)$$

A partir de estas funciones, se calculan las cantidades características de las transiciones radiativas. El resultado es

- $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$

$$p_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)} = \sqrt{\frac{8}{9B}}, \quad (5.48)$$

$$d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)} = \frac{8}{9B}. \quad (5.49)$$

- $1s_0 \leftrightarrow 2p_0$

$$p_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)} = \frac{16}{27}, \quad (5.50)$$

$$d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)} = 0.3511. \quad (5.51)$$

Podemos ver que para la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$, la fuerza dipolar $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}$ es una función decreciente del campo magnético B . Y si recordamos que en el límite $B \rightarrow 0$ esta misma cantidad es una función creciente, debería esperarse que $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}$ presente al menos un máximo en la región intermedia de campos magnéticos. La transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_0$ por su parte, cae asintóticamente a la recta horizontal $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)} = 0.3511$, mientras que para campos magnéticos débiles presenta un comportamiento creciente, por lo que también esperamos al menos un máximo en la región intermedia de campos magnéticos.

Para los estados excitados $2p_{\pm 1,0}$ no tenemos una expresión para el comportamiento asintótico de la energía, por ello no presentamos expresiones para la fuerza de oscilador y la probabilidad de transición.

Resultados

En este capítulo se presentan los resultados de los cálculos para las transiciones dipolares eléctricas entre los estados ligados más bajos $1s_0$, $2p_{-1}$ y $2p_0$ del átomo de hidrógeno en un campo magnético constante $B \in (0.235 - 44140.0) \times 10^9$ Gauss, dentro de la aproximación de Born-Oppenheimer de orden cero. Éstos resultados se han obtenido usando funciones de onda variacionales elegidas adecuadamente junto con sus energías correspondientes de los estados inicial y final en las transiciones.

Las cantidades calculadas son la fuerza dipolar $d_{fi}^{(q)}$, la fuerza de oscilador $f_{fi}^{(q)}$ y la probabilidad de transición $w_{fi}^{(q)}$ para las transiciones permitidas: $2p_{-1} \longleftrightarrow 1s_0$ y $2p_0 \longleftrightarrow 1s_0$. Con las reglas de selección $\Delta m = 0, \pm 1$ resulta que estas transiciones son diferentes de cero solo para la componente $q = +1$ en la transición $2p_{-1} \longleftrightarrow 1s_0$ ($\Delta m = 1$ con polarización circular). En la transición $2p_0 \longleftrightarrow 1s_0$, por su parte, la única componente que es distinta de cero es $q = 0$ ($\Delta m = 0$ con polarización lineal).

El estudio consistió de dos partes: (i) con las funciones de onda propuestas para los estados $1s_0$, $2p_{-1}$ y $2p_0$, y utilizando el procedimiento variacional se obtuvo la parte correspondiente del espectro del átomo de hidrógeno en un campo magnético (discutido en la Parte I), (ii) posteriormente se calcularon los elementos de matriz del operador dipolar eléctrico con las funciones de onda variacionales obtenidas. Finalmente, con éstos dos elementos se obtuvieron resultados para la fuerza dipolar $d_{fi}^{(q)}$, la fuerza de oscilador $f_{fi}^{(q)}$ y la probabilidad de transición $w_{fi}^{(q)}$ para las transiciones $2p_{-1} \longleftrightarrow 1s_0$ y $2p_0 \longleftrightarrow 1s_0$. Éstos resultados se presentan en la tablas siguientes junto con algunos gráficos en donde se observa el comportamiento de estas cantidades para el rango de campos magnéticos $B \in (0.235 - 44140.0) \times 10^9$ Gauss. Para hacer una comparación de nuestros cálculos, se incluyen los resultados obtenidos por Ruder y Wunner [7], indicados como R&W.

6.1. Transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_{-1}$

A continuación presentamos los resultados de las cantidades características de la transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_{-1}$ (Tabla 6.1). La elección del valor del campo magnético para $B < 2.35 \times 10^9$ es debida a que en unidades atómicas éstos corresponden a $B = 0.1a.u., 0.2a.u., \dots$

	Fuerza dipolar $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}$		Fuerza de oscilador $f_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}$		Probabilidad de transición $w_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}$	
$B \times 10^9 G$	R&W		R&W		R&W	
0.0	5.5493E-01		4.1620E-01		6.2664	
0.235	6.4837E-01	6.484E-01	4.4955E-01	4.496E-01	5.7849	5.7852
0.47	7.1152E-01	7.116E-01	4.8361E-01	4.837E-01	5.9801	5.9807
0.705	7.1674E-01	-	4.8752E-01	-	6.0374	-
0.94	6.9456E-01	6.948E-01	4.7682E-01	4.770E-01	6.0151	6.0170
1.0	6.8681E-01	-	4.7295E-01	-	6.0030	-
1.175	6.6194E-01	-	4.6036E-01	-	5.9601	-
1.41	6.2670E-01	6.268E-01	4.4218E-01	4.423E-01	5.8941	5.8958
1.645	5.9190E-01	-	4.2407E-01	-	5.8265	-
1.88	5.5922E-01	-	4.0678E-01	-	5.7611	-
2.115	5.2901E-01	-	3.9060E-01	-	5.6996	-
2.35	5.0133E-01	5.015E-01	3.7558E-01	3.757E-01	5.6423	5.6437
10.0	1.8073E-01	-	1.8089E-01	-	4.8509	-
23.5	8.5760E-02	8.584E-02	1.0678E-01	1.069E-01	4.4305	4.4313
100.0	2.1987E-02	-	4.0464E-02	-	3.6683	-
235.0	9.5808E-03	9.591E-03	2.2118E-02	2.214E-02	3.1552	3.1587
1000.0	2.2956E-03	-	7.6110E-03	-	2.2355	-
2350.0	9.8365E-04	9.847E-04	3.9640E-03	3.985E-03	1.7231	1.7474
10000.0	2.3253E-04	-	1.2670E-03	-	1.0068	-
23500.0	9.9165E-05	-	6.3441E-04	-	0.6950	-
44140.0	5.2852E-05	-	3.7774E-04	-	0.5165	-

Tabla 6.1: Resultados de los cálculos para la transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_{-1}$ en el átomo de hidrógeno en un campo magnético B . Las unidades de la probabilidad de transición son 10^8seg^{-1} . Se presentan también los resultados obtenidos por R&W [7].

6.1.1. Fuerza Dipolar: $1s_0 \longleftrightarrow 2p_{-1}$

La fuerza dipolar fue definida como el cuadrado del elemento de matriz del operador dipolar eléctrico (ec. (5.21)). Para la transición entre el estado base $1s_0$ ($m = 0$) y el primer estado excitado $2p_{-1}$ ($m = -1$), la única componente que es diferente de cero corresponde a $q = 1$, *i.e.* $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}$.

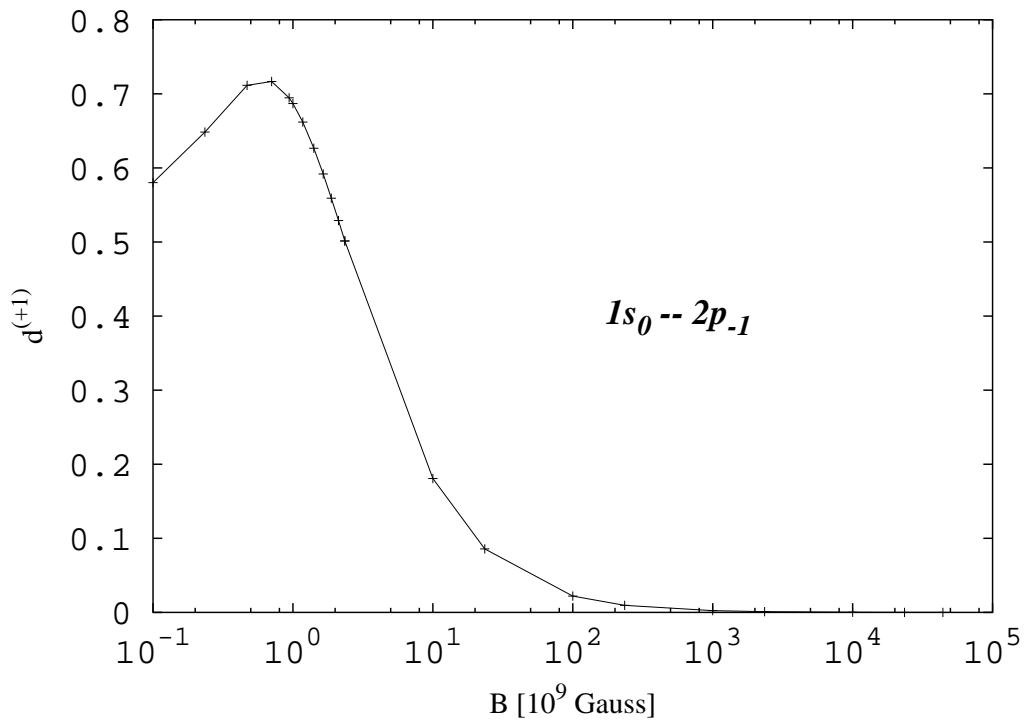


Figura 6.1: Fuerza dipolar $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}$ como función del campo magnético B para la transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_{-1}$. Para $B = 0$ su valor es $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}(B = 0) = 5.5493 \times 10^{-1}$. La escala vertical en unidades atómicas.

El comportamiento de la fuerza dipolar como función del campo magnético, es un punto importante para nosotros ya que: (i) es a partir de ésta, que las demás cantidades están definidas y (ii) en cierto sentido, nos indica la calidad de las funciones de onda utilizadas¹.

Ahora bien, al comparar nuestros resultados de la fuerza dipolar $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}$ con los obtenidos por R&W [7], vemos que ambos están en excelente acuerdo (ver Tabla 6.1). Esta coincidencia es mayor para campos magnéticos pequeños en donde la diferencia

¹Ésto porque diferentes funciones pueden dar energías variacionales similares, mientras que los valores de expectación de alguna cantidad pueden resultar muy diferentes.

relativa es de 10^{-5} y disminuye de una manera no monótona en función del campo magnético hasta una diferencia relativa de 10^{-3} (para un campo magnético de $B = 2350.0 \times 10^{13}$ Gauss). Dada la pequeña diferencia relativa, las funciones de prueba Ψ_{1s_0} (ec. (3.13)) y $\Psi_{2p_{-1}}$ (ec. (3.15)) con solo siete parámetros variacionales, resultan ser adecuadas para el estudio de los estados $1s_0$ y $2p_{-1}$ y la transición entre éstos.

Como vimos en el Capítulo 5, para campos magnéticos débiles, la fuerza dipolar crece con el campo magnético, mientras que para campos magnéticos intensos ésta decrece. Además, ya que $d_{fi}^{(g)}$ es una función positiva (ver ec. (5.21)) es de esperar que la fuerza dipolar presente al menos un máximo en la región de campos magnéticos $B \in (0.0 - 4.414) \times 10^{13}$ Gauss. Al graficar los resultados de la Tabla 6.1 encontramos un comportamiento como el esperado (Figura 6.1), *i.e.* para valores $B \ll 1$, la fuerza dipolar aumenta con el campo magnético, mientras que para $B \gg 1$, la fuerza dipolar decrece. El máximo de la fuerza dipolar, $d_{max}^{(+1)} \approx 0.72$, se encuentra para el campo magnético $B_{d_{max}^{(+1)}} \approx 0.7 \times 10^9$ Gauss.

6.1.2. Fuerza de Oscilador: $1s_0 \longleftrightarrow 2p_{-1}$

Consideremos ahora la fuerza de oscilador $f_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}$, la cual es una cantidad adimensional. Esta contiene dos elementos importantes: (i) la diferencia de la energía de amarre de los estados $1s_0$ y $2p_{-1}$ y (ii) los elementos de matriz (al cuadrado) del operador dipolar eléctrico (ec. (5.22)).

La coincidencia de nuestros resultados con los de R&W también es muy buena para campos magnéticos pequeños en donde la diferencia relativa es de 10^{-5} . Conforme el campo magnético aumenta, esta coincidencia disminuye de manera no monótona, y la diferencia relativa crece a 10^{-3} , para campos magnéticos intensos $B = 2350.0 \times 10^9$ Gauss.

Del análisis presentado en el Capítulo 5 esperamos un comportamiento decreciente con el aumento del campo magnético (ec. (5.41)). En los resultados (Tabla 6.1) y la Figura 6.2 ésto no es claro, al menos hasta el menor valor de campo magnético calculado ($B = 0.235 \times 10^9$ Gauss). Sin embargo en [7] se presentan resultados para valores pequeños del campo magnético, los cuales coinciden con lo esperado en el análisis del Capítulo 5. La fuerza de oscilador, como ocurrió con la fuerza dipolar, también presenta un máximo en $f_{max}^{(+1)} \approx 0.49$ para el campo magnético $B_{f_{max}^{(+1)}} \approx 0.7 \times 10^9$ Gauss.

6.1 Transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$

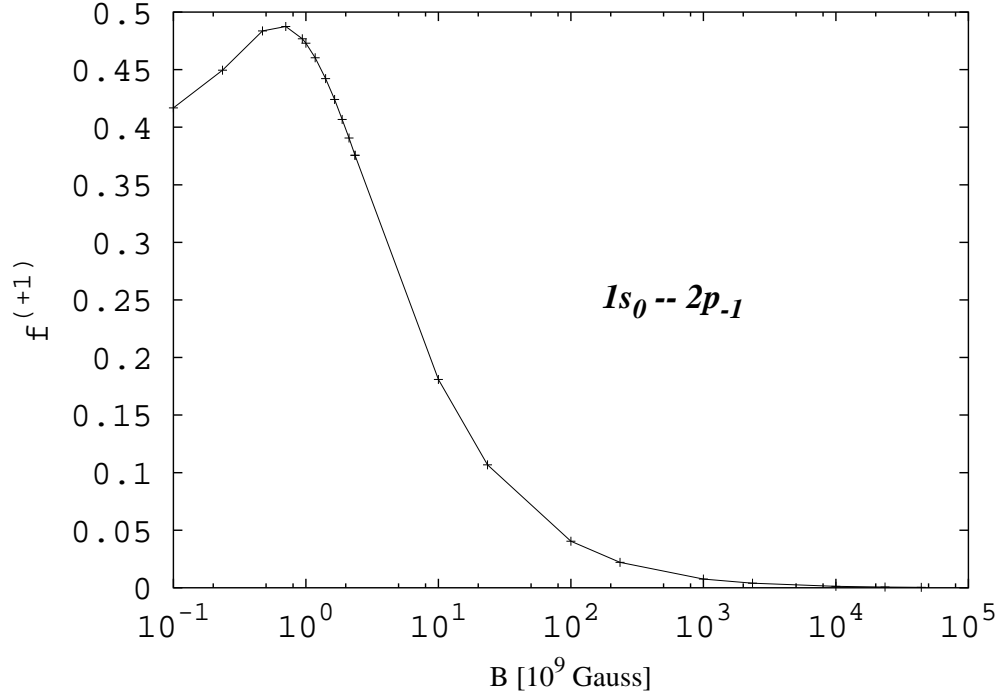


Figura 6.2: Fuerza de oscilador $f_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}$ como función del campo magnético B para la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$. Esta es una cantidad adimensional. Para $B = 0$ el valor de la fuerza de oscilador es $f_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}(B = 0) = 4.1620 \times 10^{-1}$.

6.1.3. Probabilidad de Transición: $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$

Los resultados de la probabilidad de transición por unidad de tiempo, también presentados en la Tabla 6.1, nos dejan ver que éstos están en buen acuerdo con los obtenidos por R&W. Para campos magnéticos débiles, la diferencia relativa es de 10^{-5} , aumentando a medida que se incrementa la intensidad del campo magnético hasta $B = 2350.0 \times 10^9$ Gauss en donde la diferencia relativa resulta ser de 10^{-2} .

Del análisis realizado en el Capítulo 5 para campos magnéticos débiles, se esperaba que la probabilidad de transición $w_{fi}^{(q)}$ tuviera un comportamiento decreciente con el aumento del campo magnético (ec. (5.42)). En la Tabla 6.1 este comportamiento decreciente es claro pues

$$w_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}(B = 0) > w_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}(B = 0.235 \times 10^9 \text{ Gauss}) .$$

Por otra parte notemos que la diferencia de la energía de amarre entre los estados $1s_0$ y $2p_{-1}$ disminuye lentamente (Figura 4.6) a medida que la intensidad del campo magnético aumenta. Así, dada la dependencia de la probabilidad de transición

de esta diferencia de energía ($f_{fi}^{(0)} \propto (E_i - E_f)^3$), esperamos que probabilidad de transición tienda a cero para campos magnéticos intensos. Ésto es lo que se encontró y se presenta en la Figura 6.3. La curva obtenida, también presenta un máximo que ocurre para $B_{w_{max}^{(+1)}} \approx 0.7 \times 10^9$ Gauss, en donde el valor de la probabilidad de transición es $w_{max}^{(+1)} \approx 6.0 \times 10^8 \text{ seg}^{-1}$.

En esta transición se emite radiación polarizada circular izquierda (ver Sección 5.5).

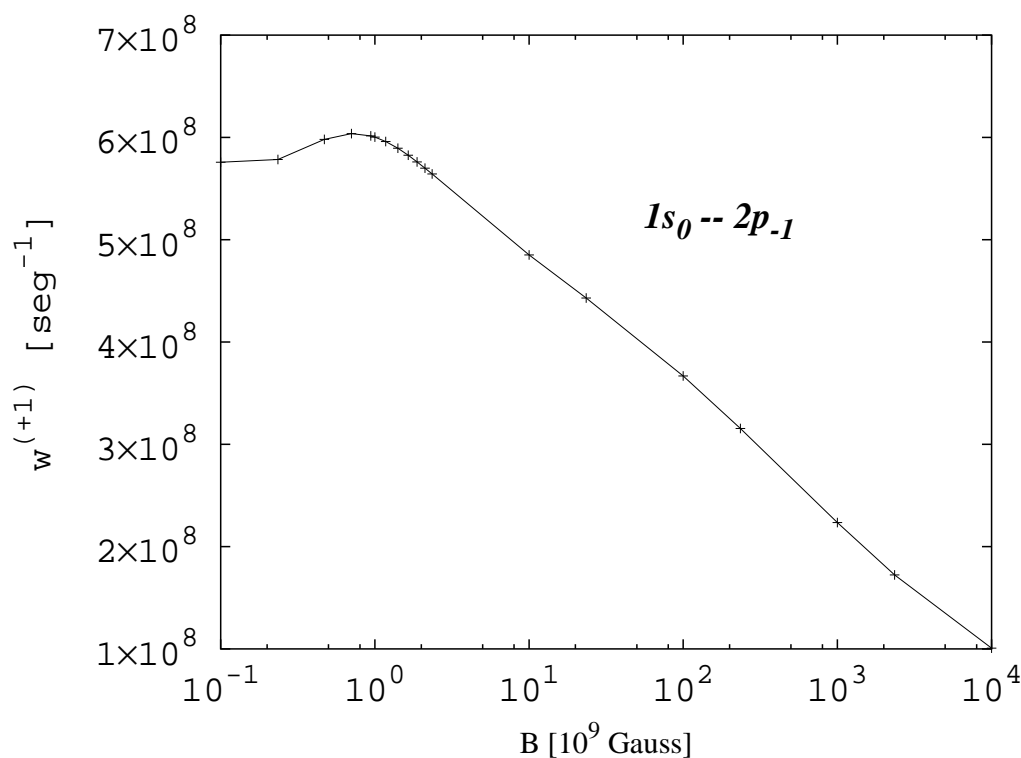


Figura 6.3: Probabilidad de transición $w_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}$ en función del campo magnético B para la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$. Para $B = 0$, el valor de la probabilidad de transición es $w_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}(B = 0) = 6.2664 \times 10^8 \text{ seg}^{-1}$, el cuál no se presenta en la figura debido a la escala utilizada. Es por esta misma razón que la curva presenta una aparente falta de suavidad en los primeros dos puntos.

De modo general podemos observar que para la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$ nuestros resultados esta en muy buen acuerdo con aquellos presentados por R&W. Un hecho importante resulta del comportamiento sistemático de nuestros resultados: el valor de la fuerza dipolar $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}$, la fuerza de oscilador $f_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}$ y la probabilidad de transición $w_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}$, se encuentran debajo del valor de aquellos presentados por R&W, aunque claro ésto no nos dice nada sobre cuál de los dos resultados es mejor.

6.2. Transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$

En esta parte consideramos los resultados de los cálculos para la transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$. La elección del valor del campo magnético para $B < 2.35 \times 10^9$ se debe a que en unidades atómicas éstos corresponden a $B = 0.1a.u., 0.2a.u., \dots$

$B \times 10^9 G$	Fuerza dipolar $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)}$		Fuerza de oscilador $f_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)}$		Probabilidad de transición $w_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)}$	
	R&W		R&W		R&W	
0.0	5.5493E-01		4.1620E-01		6.2664E08	
0.235	6.0843E-01	6.083E-01	4.6864E-01	4.685E-01	7.4417E08	7.4401E8
0.47	6.5745E-01	6.577E-01	5.3280E-01	5.330E-01	9.3660E08	9.3694E8
0.705	6.7529E-01	-	5.7763E-01	-	1.1312E09	-
0.94	6.7478E-01	6.761E-01	6.0777E-01	6.089E-01	1.3197E09	1.3223E9
1.0	6.7290E-01	-	6.1377E-01	-	1.3668E09	-
1.175	6.6500E-01	-	6.2838E-01	-	1.5018E09	-
1.41	6.5078E-01	6.533E-01	6.4271E-01	6.452E-01	1.6779E09	1.6843E9
1.645	6.3471E-01	-	6.5288E-01	-	1.8490E09	-
1.88	6.1807E-01	-	6.6012E-01	-	2.0156E09	-
2.115	6.0161E-01	-	6.6535E-01	-	2.1782E09	-
2.35	5.8565E-01	5.902E-01	6.6905E-01	6.742E-01	2.3372E09	2.3549E9
4.7	4.6404E-01	-	6.7251E-01	-	3.7807E09	-
10.0	3.3129E-01	-	6.4189E-01	-	6.4499E09	-
23.5	2.1101E-01	2.252E-01	5.7621E-01	6.149E-01	1.1501E10	1.2269E10
100.0	8.8027E-02	-	4.2551E-01	-	2.6612E10	-
235.0	5.0464E-02	6.217E-02	3.3502E-01	4.135E-01	3.9524E10	4.8956E10
1000.0	1.9169E-02	-	2.0893E-01	-	6.6429E10	-
2350.0	1.0898E-02	1.585E-02	1.5522E-01	2.273E-01	8.4282E10	12.5081E10
10000.0	4.3462E-03	-	9.3697E-02	-	1.1656E11	-

Tabla 6.2: Resultados de los cálculos para la transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$ en el átomo de hidrógeno en un campo magnético. Para comparar, se presentan los resultados obtenidos por R&W [7].

6.2.1. Fuerza Dipolar: $1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$

El único elemento de la fuerza dipolar $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(q)}$ que es diferente de cero en la transición entre el estado base $1s_0$ y el segundo estado excitado $2p_0$ es el correspondiente a $q = 0$.

Al comparar los resultados de la fuerza dipolar con los obtenidos por R&W [7] para la fuerza dipolar, vemos que ambos están en buena correspondencia (ver Tabla 6.2). Para campos magnéticos pequeños, la diferencia relativa es de 10^{-4} , mejor que para campos magnéticos intensos en donde la diferencia relativa crece de manera monótona con el campo hasta 10^{-1} para $B = 2350.0 \times 10^{13}$ Gauss.

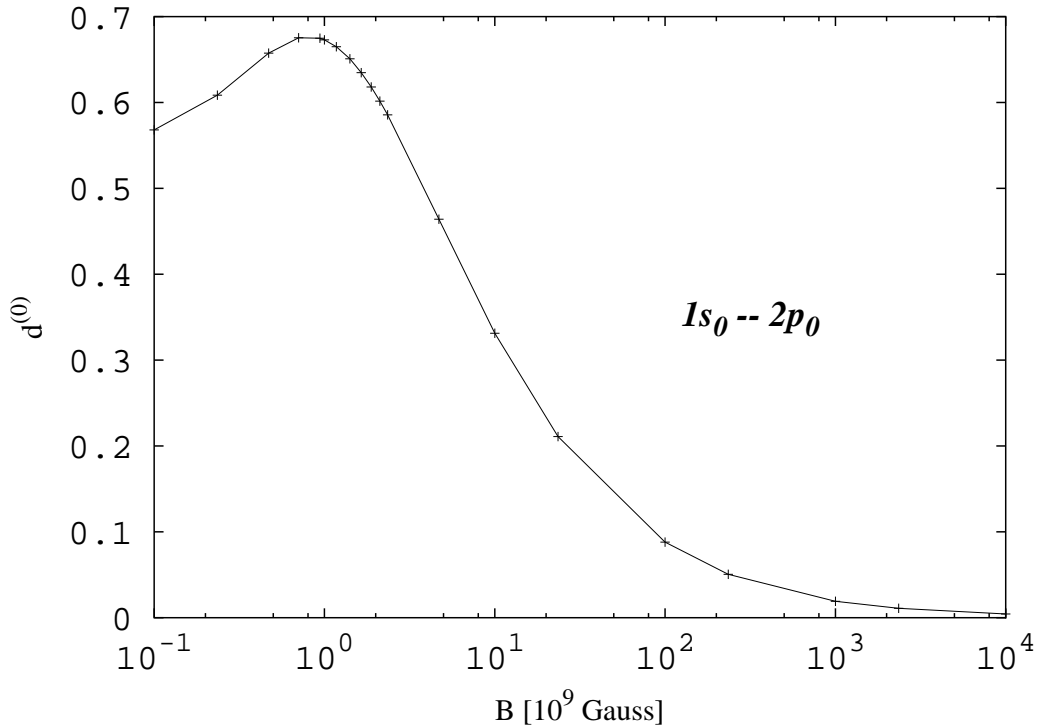


Figura 6.4: Fuerza dipolar en unidades atómicas $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)}$ como función del campo magnético B para la transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$. Para $B = 0$, el valor de la fuerza dipolar es $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)}(B = 0) = 5.5493 \times 10^{-1}$.

El comportamiento de la fuerza dipolar $d_{fi}^{(q)}$ en el dominio de campos magnéticos pequeños fue discutida en el Capítulo 5. Lo que se obtuvo fue que la fuerza dipolar $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)}$ debería de ser una función creciente del campo magnético B (ec. (5.40)). También en el Capítulo 5 se analizó el comportamiento asintótico concluyendo que para campos magnéticos intensos, el valor de la fuerza dipolar debería alcanzar un valor constante (ec. (5.51)). De éstos dos comportamientos y del hecho que la fuerza

6.2 Transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$

dipolar es una función positiva (ver ec. (5.21)), se espera que en la región intermedia exista al menos un punto máximo. Al graficar los valores de la fuerza dipolar de la Tabla 6.2, el comportamiento es como el esperado (Figura 6.4). Con sorpresa encontramos que el máximo se encuentra para el valor del campo magnético $B_{d_{max}^{(0)}} \approx 0.7 \times 10^9$ Gauss, el mismo que para la transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_{-1}$ (ver Sección 6.1). La razón de esta coincidencia es algo que no es claro. El máximo de la fuerza dipolar es de $d_{max}^{(0)} \approx 0.67$, menor que el correspondiente al de la transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_{-1}$.

6.2.2. Fuerza de Oscilador: $1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$

Cuando comparamos nuestros resultados de la fuerza de oscilador $f_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)}$ (ver Tabla 6.2) con los obtenidos por R&W [7], se encuentra que para campos magnéticos débiles la coincidencia es buena, ya que el error relativo es de 10^{-4} , incrementándose monótonamente conforme la intensidad del campo magnético es mayor, siendo de 10^{-1} para un campo magnético de $B = 2350.0 \times 10^9$ Gauss.

La discrepancia en los valores de la fuerza de oscilador entre nuestros resultados y los obtenidos por R&W para campos magnéticos intensos en esta transición, es mayor que aquellos para la transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_{-1}$. Como ya hicimos notar, la fuerza de oscilador contiene dos ingredientes que son muy importantes: la diferencia de las energías de amarre entre los estados final e inicial y el elemento de matriz del operador dipolar eléctrico. Por ello esperaríamos que alguno de éstos dos elementos contuviera el mayor error lo que explicaría esta discrepancia. Si consideramos la diferencia de energía entre los estados final e inicial, y calculamos el error relativo entre los resultados de nuestros cálculos variacionales y los presentados por R&W, *i.e.* el error relativo entre ΔE_b^{Var} y $\Delta E_b^{R\&W}$, obtenemos los resultados presentados en la Tabla 6.3.

Estados	ΔE_b [Ry]		Diferencia absoluta [Ry]	Diferencia relativa
	Variacional	R&W		
$1s_0 : 2p_{-1}$	4.02989	4.04729	1.74×10^{-2}	4.3×10^{-3}
$1s_0 : 2p_0$	14.24275	14.33911	9.64×10^{-2}	6.8×10^{-3}

Tabla 6.3: Diferencia de la energía de amarre entre los estados indicados en la primera columna para nuestros resultados y los presentados por R&W (segunda y tercera columna respectivamente) para un campo magnético $B = 2350.0 \times 10^9$ Gauss. En la cuarta columna se calcula la diferencia absoluta $|\Delta E_b^{R\&W} - \Delta E_b^{Var}|$, y en la última la diferencia relativa $\frac{|\Delta E_b^{R\&W} - \Delta E_b^{Var}|}{\Delta E_b^{R\&W}}$. En ésta última el resultado es muy similar si en el denominador se toma ΔE_b^{Var} .

Ahora bien, la diferencia relativa de la fuerza dipolar entre nuestros resultados y aquellos de R&W en un campo magnético $B = 2350.0 \times 10^9$ Gauss, para las dos transiciones consideradas, se presentan en la Tabla 6.4.

Transición	Fuerza dipolar $d_{fi}^{(q)}$		Diferencia absoluta	Diferencia relativa
	Variacional	R&W		
$1s_0 \longleftrightarrow 2p_{-1}$	9.8365×10^{-4}	9.847×10^{-4}	1.05×10^{-5}	10^{-3}
$1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$	1.0898×10^{-2}	1.585×10^{-2}	4.95×10^{-3}	10^{-1}

Tabla 6.4: Para las transiciones indicadas en la primera columna, los resultados de la fuerza dipolar obtenidos en nuestros cálculos y los presentados por R&W para $B = 2350.0 \times 10^9$ Gauss se muestran en la segunda y tercera columna respectivamente. En la cuarta y quinta columna presentamos la diferencia absoluta $|\Delta E_b^{R\&W} - \Delta E_b^{Var}|$ y la diferencia relativa $\frac{|\Delta E_b^{R\&W} - \Delta E_b^{Var}|}{\Delta E_b^{R\&W}}$ entre nuestros resultados y los presentados por R&W. En la diferencia relativa el resultado es muy similar si en el denominador se toma ΔE_b^{Var} .

Si ponemos nuestra atención solo en las diferencias relativas indicadas en las Tablas 6.3 y 6.4, vemos que la mayor de ellas ocurre para la fuerza dipolar correspondiente a la transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$. Ahora, la fuerza de oscilador es el producto entre la diferencia de las energías de amarre entre los estados inicial y final por la fuerza dipolar. Notemos además que los resultados para la fuerza de oscilador con el mayor error relativo ocurren para la transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$, por lo que parece natural pensar que la principal diferencia proviene del cálculo del elemento de matriz del operador dipolar eléctrico. Aunado al hecho de que no existe un método que establezca criterios para obtener resultados adecuados en los cálculos de elementos de matriz, no es posible establecer cuáles resultados son *mejores*, si los obtenidos con las funciones de onda utilizadas aquí, o los presentados por R&W.

La fuerza de oscilador como función del campo magnético se presenta en la Figura 6.5. En esta transición, el valor del campo magnético para el cual ocurre el máximo de la fuerza de oscilador no es el mismo que para el máximo de la fuerza dipolar, como ocurrió en la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$. En este caso, tenemos $B_{f_{max}^{(0)}} \approx 2.3 \times 10^9$ Gauss, y el valor de la fuerza de oscilador es $f_{max}^{(0)} \approx 0.67$.

6.2 Transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$

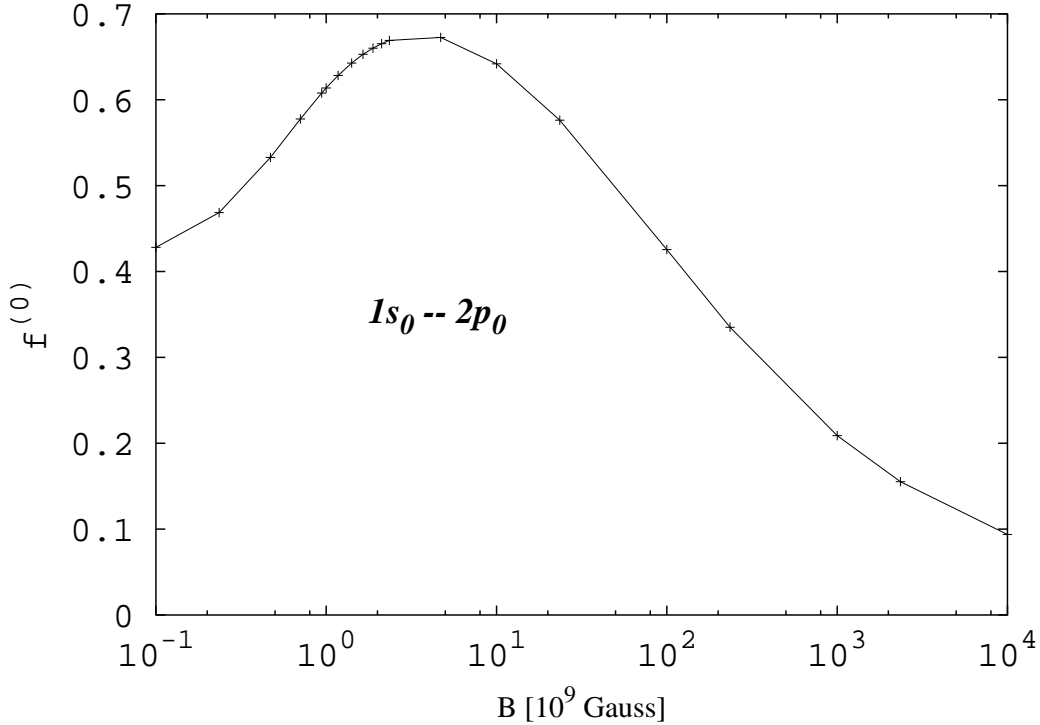


Figura 6.5: Fuerza de oscilador $f_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)}$ en función del campo magnético B para la transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$. Para $B = 0$, el valor de la fuerza de oscilador es $f_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)}(B = 0) = 4.1620 \times 10^{-1}$.

6.2.3. Probabilidad de Transición: $1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$

Para la probabilidad de transición, tal como ocurrió para la fuerza dipolar y la fuerza de oscilador, la coincidencia con los resultados de R&W es mucho mejor para campos magnéticos débiles que intensos. En el primer caso el error relativo es de 10^{-4} , incrementándose con el campo magnético hasta llegar a 10^{-1} para $B = 2350.0 \times 10^9$ Gauss.

La probabilidad de transición $w_{fi}^{(q)}$ es una función del cubo de la diferencia de la energía de amarre entre los estados inicial i y final f (ec. (5.23)). Como podemos ver de la Figura 4.6, esta diferencia de la energía de amarre de los estados $1s_0$ y $2p_0$ tiende a aumentar a medida que la intensidad del campo magnético se incrementa. Es por ello que esperamos que la probabilidad de transición sea una función creciente del campo magnético. Este comportamiento es lo que se encontró y se presenta en la Figura 6.6.

En esta transición se emite radiación con polarización lineal (ver Sección 5.5).

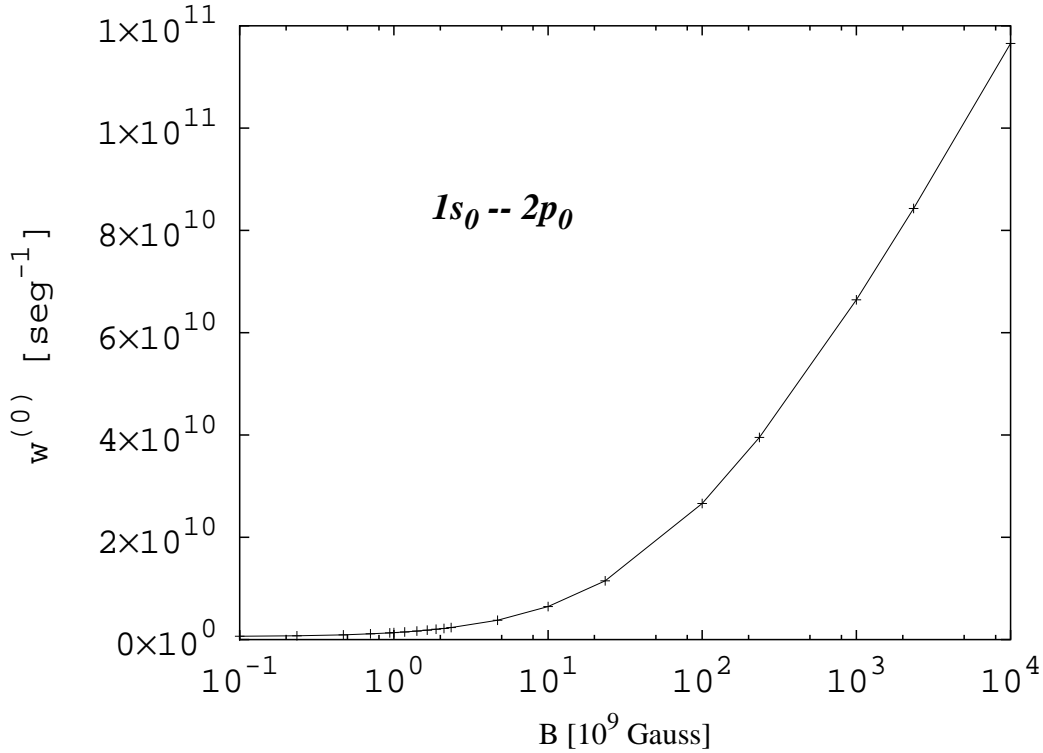


Figura 6.6: Probabilidad de transición $w_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)}$ en función del campo magnético B para la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_0$. El valor de la probabilidad de transición para $B = 0$ es $w_{1s_0 \leftrightarrow 2p_0}^{(0)}(B = 0) = 6.2664 \times 10^8 \text{seg}^{-1}$.

6.3. Longitud de Onda

El comportamiento de la longitud de onda de la radiación electromagnética emitida o absorbida conforme la intensidad del campo magnético aumenta, puede ser obtenida a través de la expresión²

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\Delta E_T}{2\pi \hbar c} = \frac{\alpha}{2\pi} \Delta E_T ,$$

donde ΔE_T es la diferencia de la energía total E_T entre los estados inicial y final de la transición que produce dicha radiación. En la Figura (6.7) se presentan gráficamente los resultados obtenidos.

²Ya que en unidades atómicas la velocidad de la luz es $c = \frac{1}{\alpha}$, donde α es la constante de estructura fina: $\alpha \approx \frac{1}{137}$.

6.3 Longitud de Onda

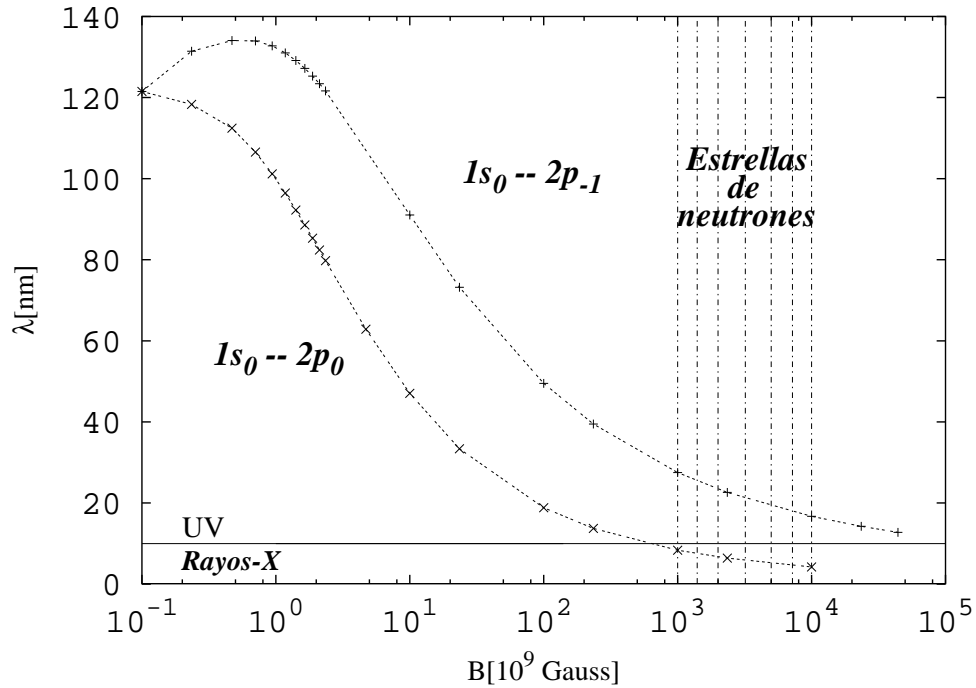


Figura 6.7: Longitud de onda de la radiación emitida por el átomo de hidrógeno en función del campo magnético. La línea horizontal en ~ 10 nm indica la separación entre dos zonas de radiación: radiación UV y Rayos-X. Se indica la región de campos magnéticos para las estrellas de neutrones.

Como podemos ver, para ambas transiciones, la longitud de onda de la radiación disminuye a medida que la intensidad del campo magnético aumenta. Para campos magnéticos del orden de $B \sim 10^{12}$ Gauss la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_0$ inclusive comienza a caer dentro de la región de Rayos-X. En la Figura 6.7 también indicamos la región de campos magnéticos característicos de las estrellas de neutrones.

Conclusiones

El punto central de este trabajo fue el cálculo de la fuerza dipolar $d_{fi}^{(q)}$, la fuerza de oscilador $f_{fi}^{(q)}$ y la probabilidad de transición $w_{fi}^{(q)}$ de las transiciones radiativas del átomo de hidrógeno en presencia de un campo magnético en el rango $B \in (0 - 4.414 \times 10^{13})$ Gauss. Ello dentro de la aproximación dipolar eléctrica. En este estudio, se consideraron las transiciones $1s_0 \longleftrightarrow 2p_{-1}$ y $1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$.

Las funciones de onda y el valor de la energía total para los estados mas bajos $1s_0$, $2p_{-1}$ y $2p_0$ del átomo de hidrógeno en el rango de campos magnéticos $B \in (0 - 4.414 \times 10^{13})$, se obtuvieron utilizando el método variacional considerando la aproximación de Born-Oppenheimer a orden cero. Las funciones de prueba propuestas son físicamente adecuadas, ya que reproducen correctamente el comportamiento para pequeñas y grandes distancias, además de ser funciones simples con solo siete parámetros variacionales. Los resultados obtenidos para la energía de amarre³ se compararon con los resultados obtenidos por G. Wunner y H. Ruder [7] y Y. Kravchenko y Liberman [11]. En general, con las sencillas funciones de onda propuestas, los resultados de nuestros cálculos están de acuerdo con los resultados de los autores con los cuales se hace la comparación. El error relativo en la energía de amarre crece con el incremento del campo magnético de 10^{-7} a 10^{-2} para el estado $1s_0$, de 10^{-7} a 10^{-1} para $2p_{-1}$ y de 10^{-6} a 10^{-2} para $2p_0$.

Con la forma explícita de las funciones de onda aproximadas para los estados $1s_0$, $2p_{-1}$ y $2p_0$, se realizó el cálculo de las transiciones electrónicas entre los estados ligados $1s_0 \longleftrightarrow 2p_{-1}$ y $1s_0 \longleftrightarrow 2p_0$. Para $B = 0$, la probabilidad de transición es la misma para las dos transiciones estudiadas: $w_{fi} = 6.2664 \times 10^8 \text{seg}^{-1}$. A medida que

³Diferencia entre la energía de un electrón libre colocado en un campo magnético y la energía total del átomo de hidrógeno en presencia del mismo valor del campo magnético.

el campo magnético se incrementa, los valores de las probabilidades de transición se separan: para la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$, $w_{fi}^{(+1)}$ decrece con el campo magnético B . En la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_0$, por el contrario, la probabilidad de transición es una función creciente del campo magnético B . Llegando a diferir en tres órdenes de magnitud (10^3) cuando el valor del campo magnético es de $B = 10^{13}$ Gauss (Figura 6.8). Los resultados muestran que en todo el rango de campos magnéticos estudiado, las transiciones más probables corresponden a la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_0$.

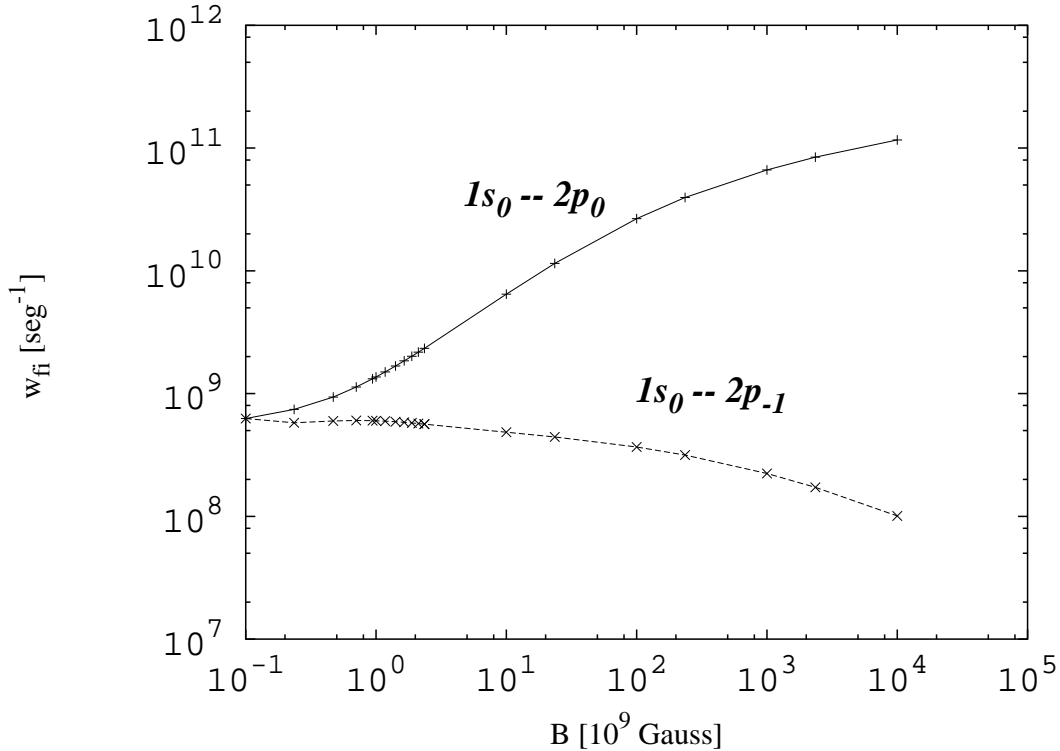


Figura 6.8: Comportamiento de la probabilidad de transición $w_{fi}^{(q)}$ como función del campo magnético B para las transiciones $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$ y $1s_0 \leftrightarrow 2p_0$. Los resultados de nuestros cálculos se indican por cruces. Para tener una mejor imagen, los resultados se unieron con líneas rectas.

Es importante enfatizar la propiedad de polarización de la radiación electromagnética emitida en una transición radiativa. Para la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_0$, el átomo emite radiación polarizada linealmente en la dirección z del campo magnético, mientras que para la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$ la radiación emitida es circularmente polarizada izquierda.

Conclusiones

Cualitativamente, obtuvimos resultados comparables con los obtenidos por Ruder y Wunner [7] para las cantidades características de las transiciones radiativas $d_{fi}^{(q)}$, $f_{fi}^{(q)}$ y $w_{fi}^{(q)}$, en todo el rango de campos magnéticos. Por ejemplo:

- En campos magnéticos débiles ($B = 0.235 \times 10^9$ Gauss), la coincidencia con los resultados reportados por Ruder y Wunner [7] para la fuerza de oscilador $f_{fi}^{(q)}$ es muy buena, con una diferencia relativa de:
 - 10^{-5} para la transición $1s_0 \iff 2p_{-1}$
 - 10^{-4} para la transición $1s_0 \iff 2p_0$
- En campos magnéticos intensos ($B = 2350.0 \times 10^9$ Gauss) la diferencia relativa para ambas transiciones aumenta hasta:
 - 10^{-3} para la transición $1s_0 \iff 2p_{-1}$
 - 10^{-1} para la transición $1s_0 \iff 2p_0$

La pérdida de precisión para campos magnéticos intensos, específicamente en la transición $1s_0 \iff 2p_0$ al parecer proviene del cálculo del elemento de matriz del operador dipolar eléctrico. Por lo cual resulta decisivo obtener una correcta evaluación de este elemento de matriz. Sin embargo, hasta el momento todavía *no es claro* cómo establecer un criterio para comparar resultados de cálculos para los elementos de matriz y por lo tanto para la fuerza dipolar $d_{fi}^{(q)}$, la fuerza de oscilador $f_{fi}^{(q)}$ y la probabilidades de transición $w_{fi}^{(q)}$. Por ello no es posible determinar cuáles resultados son mas precisos.

De las posibles transiciones entre los diferentes niveles del átomo de hidrógeno en presencia de un campo magnético B , las que se estudiaron corresponden a aquellas entre los estados más bajos: $1s_0$, $2p_{-1}$ y $2p_0$. Es importante mencionar que en los resultados presentados por Ruder y Wunner [7], las transiciones $1s_0 \iff 2p_{-1}$ y $1s_0 \iff 2p_0$, tienen la mayor probabilidad de transición para campos magnéticos débiles ($B \lesssim 10^9$ Gauss). Para $B \gtrsim 10^9$ por el contrario, algunas otras presentan mayor probabilidad de transición que las dos anteriores.

Un caso importante es la transición $1s_0 \iff 2p_1$, ya que ésta presenta la mayor probabilidad de transición para campos magnéticos intensos (ver Apéndice A). Ahora bien, la energía necesaria para poblar un estado excitado $2p$ resulta de la diferencia en la energía de amarre entre dicho estado y el estado base $1s_0$. Si limitamos nuestra atención a la región de campos magnéticos presente en una estrella de neutrones, $B \in (10^{12} - 10^{13})$ Gauss, esta energía necesaria, en unidades de grados Kelvin⁴ se presenta en la Tabla 6.5.

⁴Las equivalencias se muestran en el Apéndice C.4.

$B[\text{G}]$	$E_b^{1s_0} - E_b^{2p_{-1}}$ [K]	$E_b^{1s_0} - E_b^{2p_0}$ [K]	$E_b^{1s_0} - E_b^{2p_1}$ [K]
10^{12}	5.23×10^5	1.72×10^6	1.34×10^8
10^{13}	8.60×10^5	3.40×10^6	1.34×10^9

Tabla 6.5: Diferencia de la energía de amarre entre el estado base $1s_0$ y los estados excitados $2p_{-1}$, $2p_0$ y $2p_1$ en unidades de grados Kelvin [K].

Si consideramos ahora la temperatura en la superficie de una estrella de neutrones, la cual se encuentra entre $T \approx (5 \times 10^5 - 2 \times 10^6) \text{ K}$, esta resulta insuficiente para poblar el estado $2p_1$, ya que para ello es necesaria una temperatura entre 10^8 K y 10^9 K (ver Tabla 6.5). No ocurriendo esto para las transiciones $1s_0 \iff 2p_{-1}$ y $1s_0 \iff 2p_0$, ya que las diferencias en la energía de amarre están dentro de la región de temperaturas presentes en una estrella de neutrones, haciendo posible que los estados $2p_{-1}$ y $2p_0$ logren estar poblados para permitir que el átomo de hidrógeno emita radiación electromagnética.

Aunque parece que las transiciones $1s_0 \iff 2p_{-1}$ y $1s_0 \iff 2p_0$ son dominantes en la superficie de una estrella de neutrones, es importante aclarar que entre los sistemas con un solo electrón en presencia de un campo magnético B , el átomo de hidrógeno es el sistema con la mayor energía total, por lo que es poco probable que la radiación emitida por una estrella de neutrones sea debida a transiciones electromagnéticas en el átomo de hidrógeno.

Apéndice A

El Estado $2p_1$

El cálculo de la energía de amarre para el estado $2p_1$ puede ser deducido directamente de los resultados del estado $2p_{-1}$. Así mismo, las cantidades características para la transición $1s_0 \iff 2p_1$, se pueden obtener a partir de la fuerza de oscilador $d_{fi}^{(q)}$ de la transición $1s_0 \iff 2p_{-1}$.

A.1. La Energía de Amarre

Las funciones de prueba utilizadas para los estados $1s_0$, $2p_{-1}$ y $2p_0$, se obtuvieron siguiendo la estructura de las funciones de onda del átomo de hidrógeno sin campo magnético. Para los estados $2p$, estas funciones son

$$\Psi_{2,1,\pm 1}(r, \theta, \varphi) = \mp \frac{A}{\sqrt{2}} \rho e^{\pm i\varphi} e^{-\frac{r}{2a_0}},$$

donde A es un factor de normalización y a_0 el radio de Bohr. Así, la función de prueba propuesta para el estado $2p_{-1}$ fue (ec. (3.15))

$$\Psi_{2p_{-1}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \rho e^{-i\varphi} e^{-\phi_0} = \frac{x - iy}{\sqrt{2}} e^{-\phi_0}, \quad (\text{A.1})$$

con ϕ_0 dado por (3.14). Por lo tanto es natural considerar como función de prueba para el estado $2p_1$ la función

$$\Psi_{2p_1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \rho e^{i\varphi} e^{-\phi_0} = \frac{x + iy}{\sqrt{2}} e^{-\phi_0}. \quad (\text{A.2})$$

Con esta función de prueba, el potencial V_p (ec. (3.18)) y por lo tanto la energía total son las mismas que las correspondientes al estado $2p_{-1}$, *i.e.* $E_T^{2p_1} = E_T^{2p_{-1}}$. La

diferencia viene de la energía de amarre. Para el estado $2p_1$, $N = 0$ y $m = 1$, por lo cual¹

$$\begin{aligned} E_b^{2p_1} &= B(2N + 1 + |m| + m) - E_T^{2p-1} \\ &= 3B - E_T^{2p-1}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Así, los resultados de la energía de amarre del estado $2p_1$ los obtenemos a partir de la energía total del estado $2p_{-1}$. Los resultado se presentan en la Tabla A.1.

	Presente Trabajo		R&W [7]
$B \times 10^9 G$	E_T (Ry)	E_b (Ry)	
0.235	-0.30169120	0.60169120	0.6016913
0.47	-0.30107721	0.90107721	0.9010782
0.705	-0.27818235	1.17818235	1.178185
0.94	-0.24270465	1.44270465	1.4427096
1.0	-0.23220481	1.50880056	-
1.175	-0.19894673	1.69894673	-
1.41	-0.14923612	1.94923612	1.9492475
1.645	-0.09499310	2.19499310	-
1.88	-0.03715712	2.43715712	-
2.115	0.02361346	2.67638654	-
2.35	0.08683673	2.91316327	2.9131941
10.0	2.6412847	10.124673	-
23.5	7.7502810	22.249719	22.250845
100.0	38.680175	88.979399	-
235.0	94.744196	205.25580	205.26948
1000.0	416.97459	859.62116	-
2350.0	988.80274	2011.1973	2011.27681
10000.0	4238.2155	8527.7419	-
23500.0	9978.4426	20021.557	-
44140.0	18757.623	37591.313	-

Tabla A.1: Resultados de la energía total y la energía de amarre para el estado excitado $2p_1$ del átomo de hidrógeno en un campo magnético B .

Al comparar con lo resultados presentados por R&W [7] encontramos una muy buena coincidencia, ya que la diferencia relativa crece de manera monótona de 10^{-7} a 10^{-5}

¹El campo magnético en unidades atómicas.

A.2 La Transición $1s_0 \iff 2p_1$

en el rango de campo magnéticos $B \in (0.235 - 44140.0) \times 10^9$ Gauss. Como podemos ver de la Figura A.1, la energía de amarre del estado $2p_1$ crece rápidamente con el campo magnético, por lo que este estado está muy fuertemente ligado para campos magnéticos intensos.

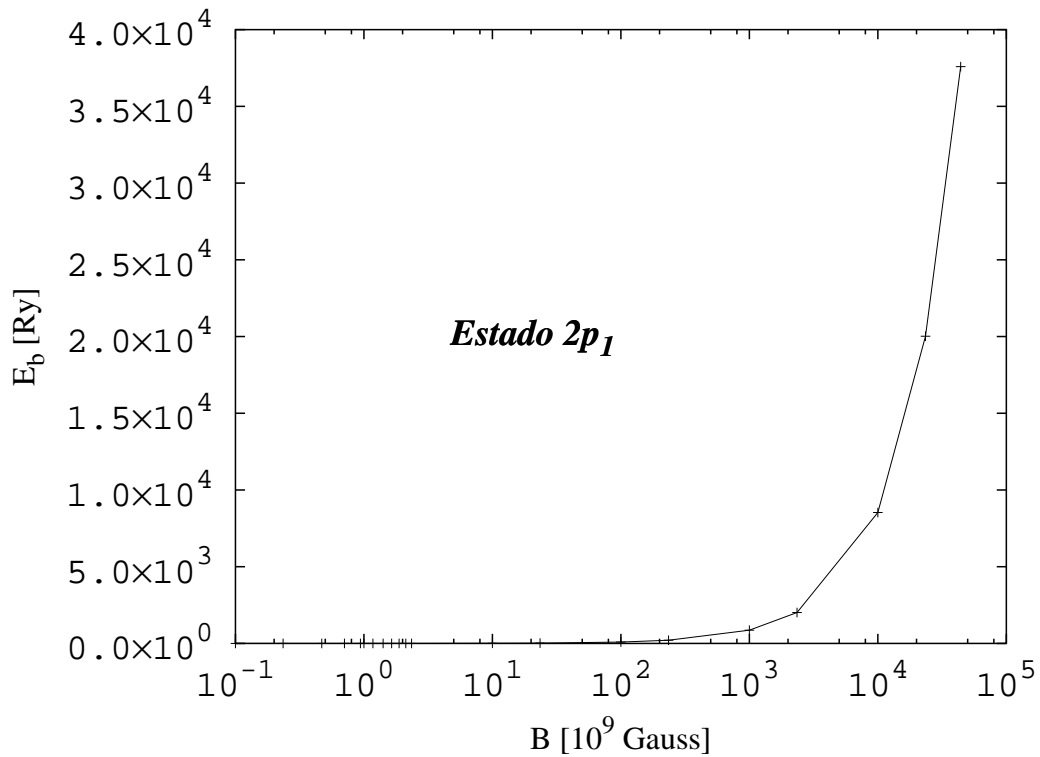


Figura A.1: Energía de amarre del estado excitado $2p_1$ del átomo de hidrógeno en función del campo magnético B . El resultado de los cálculos se muestran con cruces mientras que las líneas simplemente unen estos puntos.

A.2. La Transición $1s_0 \iff 2p_1$

Para el cálculo de las cantidades características de las transiciones radiativas es necesario calcular el elemento de matriz del vector de posición (ec. (5.20))

$$r^{(q)} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_1^q(\theta, \varphi); \quad q = 0, \pm 1,$$

entre los estados $1s_0$ y $2p_1$

$$\langle \Psi_{1s_0} | r^{(q)} | \Psi_{2p_1} \rangle. \quad (\text{A.4})$$

Ahora bien, la diferencia en las funciones de prueba de los estados $2p_1$ y $2p_{-1}$ esta solo en el factor de fase $e^{\pm im\varphi}$ (ecuaciones (A.1) y (A.2)). Por ello, el valor del elemento de matriz (A.4) es el mismo que el obtenido en la transición $1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}$ y por lo tanto también es igual el valor de la fuerza dipolar, salvo que ahora el único elemento diferente de cero es $q = -1$.

$$d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_1}^{(-1)} = d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_{-1}}^{(+1)}. \quad (\text{A.5})$$

Ya que conocemos el valor de la fuerza dipolar y la energía de amarre de los estados $1s_0$ y $2p_1$, la fuerza de oscilador y la probabilidad de transición se calculan directamente de las ecuaciones (5.22) y (5.23) respectivamente. El resultado se presenta en la Tabla A.2.

A.2 La Transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_1$

	Fuerza dipolar $d_{1s_0 \leftrightarrow 2p_1}^{(-1)}$		Fuerza de oscilador $f_{1s_0 \leftrightarrow 2p_1}^{(-1)}$		Probabilidad de transición $w_{1s_0 \leftrightarrow 2p_1}^{(-1)}$	
$B \times 10^9 G$	R&W		R&W		R&W	
0.0	5.5493E-01		4.1620E-01		6.2664E8	
0.235	6.4837E-01	6.484E-01	3.1988E-01	3.1990E-01	2.0841E8	2.0842E8
0.47	7.1152E-01	7.116E-01	1.9900E-01	1.9902E-01	4.1667E7	4.1671E7
0.705	7.1674E-01	-	0.5748E-01	-	9.8930E5	-
0.94	6.9456E-01	6.948E-01	0.7883E-01	0.7886E-01	2.7179E6	2.7191E6
1.0	6.8681E-01	-	1.1157E-01	-	7.8806E6	-
1.175	6.6194E-01	-	2.0158E-01	-	5.0037E7	-
1.41	6.2670E-01	6.268E-01	3.0973E-01	3.0984E-01	2.0258E8	2.0265E8
1.645	5.9190E-01	-	4.0459E-01	-	5.0600E8	-
1.88	5.5922E-01	-	4.8797E-01	-	9.9451E8	-
2.115	5.2901E-01	-	5.6163E-01	-	1.6944E8	-
2.35	5.0133E-01	5.015E-01	6.2708E-01	6.2730	2.6261E9	2.6271E9
10.0	1.8073E-01	-	1.3572	-	2.0488E11	-
23.5	8.5760E-02	8.584E-02	1.6084	1.6099	1.5143E12	1.5158E12
100.0	2.1987E-02	-	1.8307	-	3.3975E13	-
235.0	9.5808E-03	9.591E-03	1.8941	1.8961	1.9813E14	1.9835E14
1000.0	2.2956E-03	-	1.9478	-	3.7469E15	-
2350.0	9.8365E-04	9.847E-04	1.9633	1.9654	2.0936E16	2.0958E16
10000.0	2.3253E-04	-	1.9777	-	3.8293E17	-
23500.0	9.9165E-05	-	1.9827	-	2.1214E18	-
44140.0	5.2852E-05	-	1.9851	-	7.4954E18	-

Tabla A.2: Resultados de los cálculos para la transición $1s_0 \longleftrightarrow 2p_1$ en el átomo de hidrógeno en un campo magnético B . Se presentan también los resultados obtenidos por R&W [7].

Apéndice B

Orbitales de Landau

Clásicamente la trayectoria de una partícula de carga q , masa m y velocidad \mathbf{v} en un campo magnético \mathbf{B} constante y homogéneo (en la dirección \mathbf{z} de nuestro sistema de referencia) se obtiene a partir de resolver un sistema de ecuaciones dado por la ecuación de Newton en el cual sobre la partícula cargada actúa la fuerza de Lorentz $\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$. Se encuentra que la partícula se mueve con velocidad constante en la dirección del campo, mientras que en el plano transversal a las líneas del campo el movimiento es sobre una circunferencia de radio $\rho = \frac{mv}{qB}$ (radio ciclotrónico), frecuencia $\omega = \frac{qB}{m}$ (frecuencia ciclotrónica) y energía $E = \frac{q^2 \rho^2 B^2}{2m}$. Es decir el movimiento de la partícula es sobre una hélice. A continuación se aborda el mismo problema, pero desde un punto de vista cuántico.

Como ya se mencionó, nuestro sistema consiste de una partícula de carga q y masa m colocada en un campo magnético constante y homogéneo $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, cuyo hamiltoniano es simplemente: ¹

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2}{2m_e}.$$

El campo magnético queda bien descrito por el potencial vectorial $\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$, con el cual $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, es decir $\hat{\mathbf{p}}$ y \mathbf{A} conmutan, por lo que desarrollando el hamiltoniano, usando este hecho, y además identificando el término $\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ con la componente z del momento angular \hat{l}_z se tiene:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta + \frac{eB}{2m_e} \hat{l}_z + \frac{e^2 B^2}{8m_e} \rho^2, \quad (\text{B.1})$$

donde $\rho^2 = x^2 + y^2$. De la ecuación (B.1) se obtiene que $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{p}_z] = 0$ y $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{l}_z] = 0$ por lo cual las eigenfunciones correspondientes a estos operadores, es decir $\psi_{\hat{p}_z} =$

¹Se tratará el caso en el cual la partícula es un electrón, de modo que $m = m_e$ y $q = -e$.

$e^{\frac{i}{\hbar}zp_z}$ y $\psi_{\hat{l}_z} = e^{im\varphi}$ respectivamente, son también eigenfunciones del hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$. De estas dos eigenfunciones vemos que $\psi_{\hat{p}_z}$ corresponde a una función de onda de una partícula moviéndose libremente en la dirección z , mientras que de $\psi_{\hat{l}_z}$ sus eigenvalores son $m\hbar$ con $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ es decir, tenemos, como se esperaba, una simetría axial, por lo que parece conveniente trabajar en el sistema de coordenadas cilíndricas en vez del sistema cartesiano. Ambos sistemas están relacionados por $x = \rho \cos \varphi$, $y = \rho \sin \varphi$ y $z = z$, donde φ es el ángulo que forma la proyección del vector posición en el plano x, y con el eje x positivo. Recordando además que en el sistema de coordenadas cilíndricas

$$\begin{aligned}\hat{l}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ \Delta &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.\end{aligned}$$

Así que se busca resolver

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi, \quad (\text{B.2})$$

con

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{-\hbar^2}{2m_e} \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} - \frac{i\hbar e B}{2m_e} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2 B^2}{8m_e} \rho^2,$$

que con las consideraciones hechas anteriormente, parece posible utilizar la técnica de separación de variables, para lo cual se propone como solución de (B.2)

$$\Psi = e^{im\varphi} e^{\frac{i}{\hbar}zp_z} R(\rho),$$

sustituyendo esta solución en (B.2) y después de multiplicar por $\frac{1}{\Psi}$, se obtiene la siguiente ecuación, la cual debe satisfacer $R(\rho)$

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} R(\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} R(\rho) + \left\{ \frac{1}{\hbar^2} \left(2m_e E - p_z^2 \right) - \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} \rho^2 - \frac{emB}{\hbar} - \frac{m^2}{\rho^2} \right\} R(\rho) = 0. \quad (\text{B.3})$$

En la cual se hace $\xi = \frac{eB}{2\hbar} \rho^2$, y definiendo $\beta = \frac{(2m_e E - p_z^2)}{2e\hbar B} - \frac{m}{2}$, se tiene que $R(\xi)$ debe satisfacer

$$\xi R''(\xi) + R'(\xi) + \left\{ -\frac{1}{4}\xi + \beta - \frac{m^2}{4\xi} \right\} R = 0. \quad (\text{B.4})$$

Para obtener la solución de esta última ecuación se analiza el comportamiento asintótico de $R(\xi)$. Así cuando $\xi \rightarrow \infty$ (entonces $\rho \rightarrow \infty$) sólo conservamos los términos dominantes de (B.4), esto es ²

²Realmente la solución es de la forma $R = e^{\pm \frac{\xi}{2}}$, sin embargo lo que se busca es una solución convergente, es por eso que se toma la solución con signo negativo.

B. Orbitales de Landau

$$\xi R''(\xi) - \frac{1}{4}\xi R = 0 \quad \Rightarrow \quad R = e^{-\frac{\xi}{2}}.$$

Mientras que cuando $\xi \rightarrow 0$ lo que se tiene es³

$$R'' + \frac{1}{\xi}R' - \frac{m^2}{4\xi^2}R = 0 \quad \Rightarrow \quad R = \xi^{\frac{|m|}{2}}.$$

Lo que resta es buscar una solución que sea una interpolación entre los dos casos anteriores: $\xi \rightarrow \infty$ y $\xi \rightarrow 0$. Para ello la solución que se propone es $R = e^{-\frac{\xi}{2}}\xi^{\frac{|m|}{2}}\omega(\xi)$, y al substituir en (B.4) obtenemos

$$\xi\omega'' + \{|m| + 1 - \xi\}\omega' - \left\{\frac{|m| + 1}{2} - \beta\right\}\omega = 0, \quad (\text{B.5})$$

que corresponde a la ecuación diferencial⁴ que es satisfecha por la función hipergeométrica confluyente, la cual es definida por una serie.⁵ Pero lo que se busca son soluciones finitas así que se pide que la serie tenga sólo un número finito de términos, con lo cual las soluciones son los polinomios generalizados de Laguerre $L_N^{|m|}(\xi)$, y con ello $\beta - \frac{|m|+1}{2} = N$, siendo $N = 0, 1, 2, \dots$. Así la solución para R es

$$R(\rho) = e^{-\frac{eB}{4\hbar}\rho^2} \left(\frac{eB}{2\hbar}\rho^2\right)^{\frac{|m|}{2}} L_N^{|m|}\left(\frac{eB}{2\hbar}\rho^2\right).$$

Obteniendo que finalmente la solución para el electrón en un campo magnético homogéneo y constante en la dirección z es

$$\Psi(x, \varphi, z) = e^{im\varphi} e^{\frac{i}{\hbar}zp_z} e^{-\frac{x^2}{2}} x^{|m|} L_N^{|m|}(x^2), \quad (\text{B.6})$$

donde

$$x = \left[\frac{eB}{2\hbar}\right]^{\frac{1}{2}} \rho,$$

y de la condición $N = 0, 1, 2, \dots$ se obtiene

$$E = \frac{|e|\hbar B}{m_e} \left(N + \frac{1}{2} + \frac{|m| + m}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m_e}, \quad (\text{B.7})$$

³En este caso la solución es $R = \xi^{\frac{\pm m}{2}}$ pero lo que se busca es que la solución en el origen sea finita, es por ello que se elige la solución con signo positivo.

⁴ $zu'' + (\gamma - z)u' - \alpha u = 0$

⁵ $F(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots$

donde m toma valores enteros, es decir $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, y además, de (B.7) se ve que para valores de $m \leq 0$ existe una degeneración infinita en la energía, mientras que para un valor dado de $m > 0$ (aquí el término $\frac{p_z^2}{2m_e}$, corresponde a la componente paralela al eje z de la energía cinética, el cual tiene un valor constante), $\frac{|e|\hbar B}{m_e} \left(\frac{|m|+m}{2}\right)$ es una constante, que al igual que $\frac{p_z^2}{2m_e}$ lo que hace es cambiar el nivel de referencia de la energía, quedando, como función de N , la energía de un oscilador armónico con la ya definida frecuencia ciclotrónica $\omega = \frac{|e|B}{m_e}$.

Apéndice C

Unidades

C.1. Unidades Átomicas

Cada vez resulta mas común encontrar que en muchas áreas de ciencia e ingeniería se recurra al SI (sistema internacional de medidas) al momento de definir las unidades. En este sistema, las unidades básicas para la longitud, masa, tiempo e intensidad de corriente eléctrica, son el metro, kilogramo, segundo y ampere respectivamente. Sin embargo, algunas veces resulta necesario y conveniente definir algunas otras unidades para las magnitudes básicas, recomendándose que los valores de unidades derivadas se calculen en el SI y este valor sea el que se tome como unidad en el sistema definido.

Veamos por ejemplo que la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno, considerando al protón como infinitamente pesado tiene la forma

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\} \Psi = E\Psi, \quad (\text{C.1})$$

en la cual,

$$\begin{aligned} m_e &= 9.109553 \times 10^{-31} \text{ kg} \\ e &= 1.60210 \times 10^{-19} \text{ C} \\ \hbar &= 1.05459 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \\ \epsilon_0 &= 8.854187817 \times 10^{-12} \text{ C}^2/\text{J} \cdot \text{m} \end{aligned}$$

son la masa del electrón, carga del electrón, la constante de Planck dividida por 2π y la permitividad del vacío respectivamente, todas tomadas en el SI. Resultando engorroso al momento de hacer manipulaciones algebraicas y cálculos, el tener tantas constantes y de magnitud tan pequeña. Por ello es que al estudiar sistemas atómicos

y moleculares, resulta conveniente trabajar en el llamado sistema de unidades atómicas (a.u. por sus siglas en inglés), en el cual $m_e = e = \hbar = 4\pi\epsilon_0 = 1$, resultando con ello que el radio de Bohr $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 1$, y la energía del estado base del átomo de hidrógeno $E_0 = -\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{m_e}{2\hbar^2} = -\frac{1}{2}$, se tomen como unidades atómicas de distancia y energía respectivamente (esta última denominada Hartree). Por lo que se tiene que en el sistema de unidades atómicas, las unidades básicas son

$$\begin{aligned} m_e &\equiv 1 \text{ a.u. de masa} \\ e &\equiv 1 \text{ a.u. de carga} \\ \hbar &\equiv 1 \text{ a.u. de momento angular} \\ 4\pi\epsilon_0 &\equiv 1 \text{ a.u. de permitividad} \\ a_0 &\equiv 1 \text{ a.u. de longitud} \\ 2E_0 &\equiv - \text{ a.u. de energía} = -\text{hartree} \end{aligned}$$

Así en el sistema de unidades atómicas, la ecuación (C.1) toma la forma

$$\left\{ -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r} \right\} \Psi = E\Psi. \quad (\text{C.2})$$

Resultando aun mas simple si (C.2) se multiplica por dos, con lo cual se obtiene

$$\left\{ -\Delta - \frac{2}{r} \right\} \Psi = 2E\Psi. \quad (\text{C.3})$$

y la energía ahora se ve multiplicada por un factor de dos, a la cual se le denomina Rydberg. Teniéndose que $1 \text{ hartree} = 2 \text{ Rydbergs}$.

Veamos algunos valores en este sistema de unidades. Por ejemplo la masa del protón ($1.6726 \times 10^{-27} \text{ kg}$) en unidades atómicas resulta ser de 1836.15 a.u. .Y como la constante de estructura fina en el sistema *MKS* es $\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c}$, resulta que la velocidad de la luz en el sistema de unidades atómicas es $\alpha^{-1} = 137.0359895$.

A continuación se muestran valores numéricos de algunas cantidades en unidades atómicas.¹

¹Es importante remarcar que el valor numérico que corresponde a estas cantidades, se evalúa en el sistema *MKS* con todas las cantidades allí presentes, y este es el valor que se toma en unidades atómicas. Así por ejemplo el radio de Bohr en unidades atómicas resulta de calcular a_0 en el sistema *MKS*, es decir $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529177 \times 10^{-10} \text{ m}$.

C.3 Constantes (SI)

Cantidad	Unidad	Valor
Longitud	a_0	0.529177×10^{-10} m
Masa	m_e	0.910938×10^{-30} kg
Tiempo	$\frac{\hbar}{E_h}$	2.418884×10^{-17} s
Velocidad	v_B	2.187691×10^6 m/s
Energía	E_h	4.359748×10^{-18} J
Campo Eléctrico	$\frac{E_h}{ea_0}$	0.514220×10^{12} V/m
Campo Magnético	$\frac{E_h}{ea_0\alpha c}$	2.350518×10^5 tesla
		2.350518×10^9 Gauss

C.2. Constantes (SI)

En la siguiente tabla, presentamos algunas constantes básicas en el Sistema Internacional de Medidas (SI).

Cantidad	Símbolo	Valor
Carga del electrón	e	$1.60217646 \times 10^{-19} C$
Constante de estructura fina	$\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c}$	$\frac{1}{137.035999679}$
Radio de Bohr	$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$	5.2918×10^{-11} m
Energía de Rydberg	$E_\infty = \frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2$	13.605 eV

C.3. Armónicos Esféricos

$$\begin{aligned}
 Y_1^{-1}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi} \\
 Y_1^0(\theta, \varphi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta \\
 Y_1^1(\theta, \varphi) &= \frac{-1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} \\
 Y_2^{-2}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\varphi}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}Y_2^{-1}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi} \\Y_2^0(\theta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \\Y_2^1(\theta, \varphi) &= \frac{-1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi} \\Y_2^2(\theta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\varphi}\end{aligned}$$

C.4. Factores de Conversión

$$\begin{aligned}1 Ry &= 13.6 eV \\1 eV &= 11604.5 K\end{aligned}$$

Apéndice D

Cálculos

D.1. Teoría de Perturbaciones Dependiente del Tiempo

Consideremos un sistema descrito por un hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$ del que conocemos sus soluciones $\psi^{(0)}$, las cuales forman un conjunto completo, *i.e.* satisfacen la ecuación de Schrödinger

$$\hat{\mathcal{H}}_0 \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(0)} . \quad (\text{D.1})$$

Si inicialmente el sistema se encuentra en cierto estado $\psi_i^{(0)}$, y al tiempo $t = 0$ actúa una perturbación dependiente del tiempo $V(t)$, el nuevo hamiltoniano es $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + V(t)$. Como resolver este nuevo sistema con el hamiltoniano dependiente del tiempo ?

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(t) = [\hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda V(t)] \Psi(t) , \quad (\text{D.2})$$

condicionado por $\Psi(t = 0) = \psi_i^{(0)}$, donde λ es un parámetro auxiliar para los cálculos.

Como punto de partida consideramos una solución de la forma

$$\Psi(t) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n(t) \psi_n^{(0)} . \quad (\text{D.3})$$

Utilizando la notación convencional para una derivada temporal $\dot{X}(t)$ de una función dependiente del tiempo $X(t)$, al sustituir en D.2 tenemos

$$i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} \dot{C}_n(t) \psi_n^{(0)} = [\hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda V(t)] \sum_{n=0}^{\infty} C_n(t) \psi_n^{(0)} \quad (\text{D.4})$$

D.1 Teoría de Perturbaciones Dependiente del Tiempo

Por conveniencia, en adelante utilizaremos la notación de Dirac, en donde la ecuación (D.1) tiene la forma $\hat{\mathcal{H}}_0|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n|\psi_n^{(0)}\rangle$. Multiplicando la ec. (D.4) por $\langle\psi_m^{(0)}|$ y utilizando la propiedad de ortonormalidad de las funciones de onda: $\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = \delta_{nm}$ se tiene

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} \dot{C}_n(t)\delta_{nm} &= \sum_{n=0}^{\infty} C_n(t)\langle\psi_m^{(0)}|\hat{\mathcal{H}}_0|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda C_n(t)\langle\psi_m^{(0)}|V(t)|\psi_n^{(0)}\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} C_n(t)E_n\delta_{nm} + \lambda C_n(t)V_{mn} , \end{aligned}$$

donde V_{mn} denota el elemento de matriz $\langle\psi_m^{(0)}|V(t)|\psi_n^{(0)}\rangle$. Los términos que contienen la función Delta de Dirac δ_{nm} son diferentes de cero solo si $n = m$. En el segundo término del lado derecho, n es un índice de suma por lo que podemos redefinirlo como k , con lo cual

$$i\hbar\dot{C}_n(t) = C_n(t)E_n + \lambda \sum_{k=0}^{\infty} C_k(t)V_{nk} , \quad (\text{D.5})$$

Cuando $\lambda = 0$ la solución resulta que resulta es $C_n(t) = b_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$, con b_n una constante de integración. El resultado es natural ya que $C_n(t)\psi_n^{(0)} = e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}\psi_n^{(0)}$ es la solución completa para el hamiltoniano sin perturbación $\hat{\mathcal{H}}_0$, es decir $\lambda = 0$ en la ecuación (D.2).

Para el caso $\lambda \neq 0$, buscamos una solución como la obtenida para el caso $\lambda = 0$, salvo que ahora tomamos los coeficientes b_n como funciones dependientes del tiempo

$$C_n(t) = b_n(t)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} .$$

Al sustituir en la ecuación (D.5) se obtiene

$$i\hbar\dot{b}_n(t) = \lambda \sum_{k=0}^{\infty} e^{i\omega_{nk}t} V_{nk} b_k(t)$$

donde se define $\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}$. Ahora, con un desarrollo en serie de los coeficientes $b_n(t)$ en potencias del parámetro λ como

$$b_n(t) = b_n^{(0)}(t) + \lambda b_n^{(1)}(t) + \lambda^2 b_n^{(2)}(t) + \dots$$

se obtiene una ecuación homogénea en potencias de λ . Para obtener la solución, igualamos cada coeficiente de $\lambda^{(r)}$ a cero. La forma general de estos coeficientes es

$$r = 0 \quad i\hbar\dot{b}_n^{(0)}(t) = 0 \quad \Rightarrow b_n^{(0)}(t) = \text{const} \quad (\text{D.6})$$

$$r \neq 0 \quad i\hbar\dot{b}_n^{(r)}(t) = \sum_{k=0}^{\infty} e^{i\omega_{nk}t} V_{nk} b_k^{(r-1)}(t) \quad (\text{D.7})$$

D.1 Teoría de Perturbaciones Dependiente del Tiempo

Si colocamos en una sola expresión las expansiones que hemos realizado la función de onda $\Psi(t)$ tiene la forma

$$\Psi(t) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n^{(0)}(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \psi_n + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} b_n^{(l)}(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \psi_n .$$

Como se dijo al principio, la perturbación se inicia al tiempo $t = 0$, antes de lo cual el sistema se encontraba en un estado bien definido, independiente del tiempo. Digamos, el estado $\psi_i^{(0)}$. En la ecuación anterior, para $t = 0$ se tiene

$$\Psi(t = 0) = \psi_i^{(0)} = \sum_{n=0}^{\infty} b_n^{(0)}(t = 0) \psi_n^{(0)} + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} b_n^{(l)}(t = 0) \psi_n^{(0)} .$$

Ahora, las soluciones $b_n^{(r)}(t)$ independientes del tiempo ocurren solo si $r = 0$ por lo que solo la primera suma se debe de considerar. Sin embargo aun es necesario tomar el término $n = i$ y eliminar el resto. Esto lo hacemos introduciendo la función Delta de Dirac en las condiciones iniciales sobre los coeficientes $b_n^{(0)}(t)$.

$$\begin{aligned} b_n^{(0)}(t = 0) &= \delta_{ni} \\ b_n^{(r)}(t = 0) &= 0 \quad r > 0 \end{aligned} \tag{D.8}$$

Estas condiciones iniciales, son precisamente las soluciones a la ecuación (D.6) ya que los coeficientes $b_n^{(0)}(t)$ son constantes. A primer orden en λ ($r = 1$) de la ecuación (D.6) se tiene

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{b}_n^{(1)}(t) &= \sum_{k=0}^{\infty} e^{i\omega_{nk}t} V_{nk} b_k^{(0)}(t) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} e^{i\omega_{nk}t} V_{nk} \delta_{ki} \\ &= e^{i\omega_{ni}t} V_{ni} \end{aligned}$$

Y la solución de esta ecuación es

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} V_{ni} dt'$$

donde el intervalo $[0, t]$ es el tiempo durante el cual actúa la perturbación sobre el sistema. Cuando la perturbación deja de actuar, el sistema se encuentra en algún estado $\psi_f^{(0)}$ del sistema original, con una amplitud de probabilidad $P = |C_f(t)|^2 = |b_f^{(1)}(t) e^{-i\frac{E_f t}{\hbar}}|^2 = |b_f^{(1)}(t)|^2$. Ya que el sistema va de un estado inicial $\psi_i^{(0)}$ a un estado

final $\psi_f^{(0)}$ durante el tiempo en el cual actúa la perturbación, $|b_n(t)|^2$ es la probabilidad de que el sistema realice una transición entre estos dos estados cuando sobre este actúa una perturbación $V(t)$ en un intervalo de tiempo $[0, t]$

$$P_{i \rightarrow f} = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} \langle \psi_f | V(t) | \psi_i \rangle dt \right|^2, \quad (\text{D.9})$$

con la ya definida $\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$.

D.2. Emisión y Absorción de Radiación (Norma del Potencial Vectorial)

Los campos eléctrico y magnético descritos en términos del potencial escalar ϕ y el potencial vectorial \mathbf{A} están dados por

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \\ \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A}. \end{aligned}$$

Si ahora consideramos que el potencial escalar es cero y el campo magnético es descrito por un potencial vectorial \mathbf{A}

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0^* e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}, \quad (\text{D.10})$$

donde \mathbf{A}_0 un vector en la dirección de \mathbf{A} , y $|\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c}$ el vector de onda. Los campos eléctrico y magnético tienen la forma

$$\mathbf{E} = -i\omega\mathbf{A}_0^* e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + i\omega\mathbf{A}_0 e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}, \quad (\text{D.11})$$

$$\mathbf{B} = -i\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0^* e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + i\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}. \quad (\text{D.12})$$

Por otro lado, la energía almacenada en este campo de radiación por unidad de volumen es

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \left(\epsilon_0 |\mathbf{E}|^2 + \frac{1}{\mu_0} |\mathbf{B}|^2 \right). \quad (\text{D.13})$$

Al calcular la norma al cuadrado de los campos (D.11) y (D.12) se tiene

$$|\mathbf{E}|^2 = 2\omega^2 \mathbf{A}_0^* \mathbf{A}_0 - \omega^2 \mathbf{A}_0 \mathbf{A}_0 e^{2i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} - \omega^2 \mathbf{A}_0^* \mathbf{A}_0^* e^{-2i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)},$$

$$|\mathbf{B}|^2 = 2k^2 \mathbf{A}_0^* \mathbf{A}_0 - (k \times \mathbf{A}_0) \cdot (k \times \mathbf{A}_0) e^{2i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} - (k \times \mathbf{A}_0^*) \cdot (k \times \mathbf{A}_0^*) e^{-2i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}.$$

Lo que tenemos que hacer ahora es promediar en un período de tiempo. Para hacer esto recordemos que dada una cantidad \mathcal{O} , el promedio en un periodo T está dado por $\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \mathcal{O} dt$. Al integrar, las partes oscilatorias son cero, resultando

$$\begin{aligned} \langle |\mathbf{E}|^2 \rangle &= 2\omega^2 \mathbf{A}_0^* \mathbf{A}_0, \\ \langle |\mathbf{B}|^2 \rangle &= 2k^2 \mathbf{A}_0^* \mathbf{A}_0. \end{aligned}$$

D.3 Emisión y Absorción de Radiación (Norma del Potencial Vectorial)

Utilizando la identidad $c^2 = \frac{1}{\mu_0 \epsilon_0}$, la expresión de la energía (ec. (D.13)) es

$$\mathcal{E} = 2\omega^2 \epsilon_0 \mathbf{A}_0 \mathbf{A}_0^* .$$

Si consideramos que el sistema esta confinado dentro de un volumen \mathcal{V} , la energía total en el campo electromagnético resulta ser

$$\int dV \mathcal{E} = 2\omega^2 \epsilon_0 |\mathbf{A}_0|^2 \mathcal{V} ,$$

si además, esta energía es transportada por N fotones cada uno con energía $\hbar\omega$, se tiene que $N\hbar\omega = 2\omega^2 \epsilon_0 |\mathbf{A}_0|^2 \mathcal{V}$, de donde

$$A_0 = \sqrt{\frac{N\hbar}{2\omega\epsilon_0\mathcal{V}}} .$$

Definiendo el vector unitario $\vec{\epsilon}$ en la dirección del potencial vectorial, este tiene la forma

$$\mathbf{A}_0 = A_0 \vec{\epsilon} = \sqrt{\frac{N\hbar}{2\omega\epsilon_0\mathcal{V}}} \vec{\epsilon} .$$

Así, la forma final del potencial vectorial es (ec. (D.10))

$$\mathbf{A} = \underbrace{\sqrt{\frac{N\hbar}{2\omega\epsilon_0\mathcal{V}}} e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \vec{\epsilon}}_{\text{Emisión}} + \underbrace{\sqrt{\frac{N\hbar}{2\omega\epsilon_0\mathcal{V}}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \vec{\epsilon}}_{\text{Absorción}} . \quad (\text{D.14})$$

El primer término de la ec. (D.14) esta relacionado con la emisión de radiación por parte del sistema, el cual es inducido por la presencia de un foton externo. Para que este proceso, conocido como *emisión inducida*, se lleve a cabo, es necesario que $N \neq 0$. Por otra parte si el sistema absorbe radiación el proceso se conoce como *absorción* y es descrito por el segundo término del potencial vectorial (D.14). Al igual que en caso de emisión inducida, es necesario que $N \neq 0$. Sin embargo, existe un proceso mas en el cual el sistema emite radiación aun cuando no hay fonotes presentes. Este otro proceso es conocido como *emisión espontanea*. Las correcciones provienen de la electrodinámica cuántica, en la cual se considera que siempre existe un *punto cero* del potencial vectorial, es decir, nunca es igual a cero. Considerando esto, la forma final del potencial vectorial es

$$\mathbf{A} = \underbrace{\sqrt{\frac{(N+1)\hbar}{2\omega\epsilon_0\mathcal{V}}} e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \vec{\epsilon}}_{\text{Emisión}} + \underbrace{\sqrt{\frac{N\hbar}{2\omega\epsilon_0\mathcal{V}}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \vec{\epsilon}}_{\text{Absorción}} . \quad (\text{D.15})$$

D.3. Integral

A continuación mostraremos que para tiempos grandes, se tiene

$$\left| \int_0^t e^{i(\omega_{fi} \pm \omega)t'} dt' \right|^2 = 2\pi t \delta(\omega_{fi} \pm \omega) . \quad (\text{D.16})$$

Para ello, calculamos primero el valor de la integral definiendo $\Omega = \omega_{fi} \pm \omega$,

$$\begin{aligned} \int_0^t e^{i\Omega t'} dt' &= \frac{1}{i\Omega} (e^{i\Omega t} - 1) \\ &= \frac{2e^{i\frac{\Omega t}{2}} e^{i\frac{\Omega t}{2}} - e^{-i\frac{\Omega t}{2}}}{\Omega \cdot 2i} \\ &= \frac{2e^{i\frac{\Omega t}{2}} \sin \frac{\Omega t}{2}}{\Omega} . \end{aligned}$$

Tomando la norma al cuadrado de esta última ecuación

$$\left| \int_0^t e^{i(\omega_{fi} \pm \omega)t'} dt' \right|^2 = 4 \left(\frac{\sin \frac{\Omega t}{2}}{\Omega} \right)^2 .$$

Por otra parte, una representación de la función Delta de Dirac es

$$\delta(x) = \frac{2}{\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \frac{xt}{2}}{tx^2} ,$$

con lo cual para t grande

$$4 \left(\frac{\sin \frac{\Omega t}{2}}{\Omega} \right)^2 \longrightarrow 2\pi t \delta(\Omega) .$$

La suposición de t grande es válida, pues la función $\frac{4}{\Omega^2} (\sin \frac{\Omega t}{2})^2$ se hace más aguda alrededor de $\Omega = 0$ conforme el parámetro $\frac{t}{2}$ aumenta. Esto se muestra en la Figura D.1. Escribiendo el resultado en las variables originales $\Omega = \omega_{fi} \pm \omega$, se tiene finalmente el resultado (D.16).

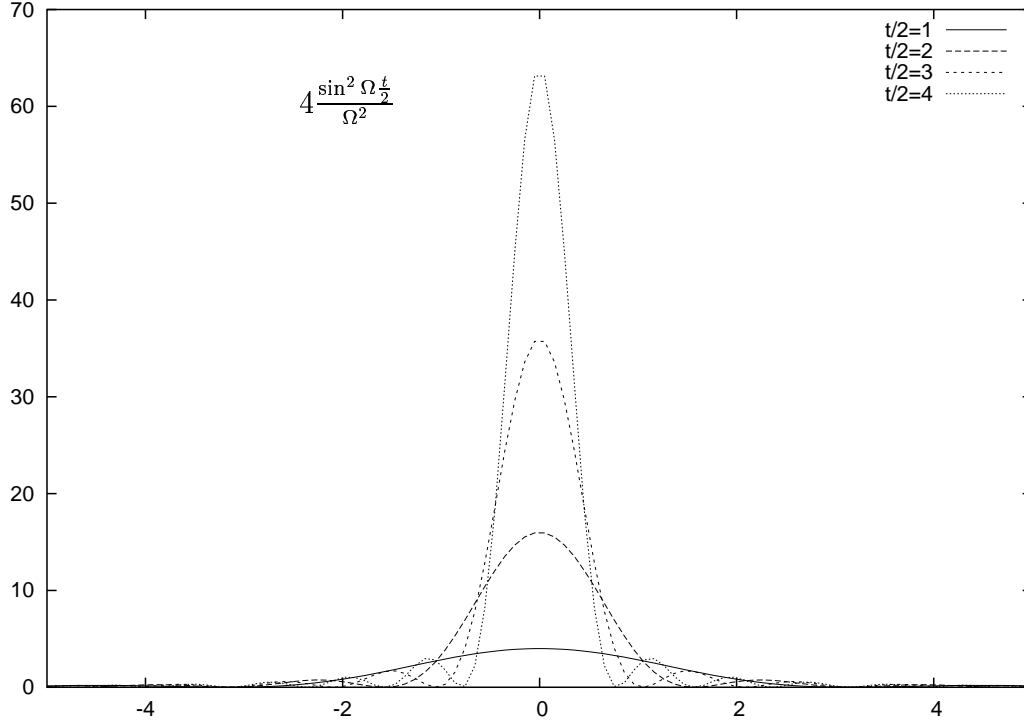


Figura D.1: Comportamiento de la función $\frac{4}{\Omega^2} \left(\sin \frac{\Omega t}{2}\right)^2$, para diferentes valores del parámetro $\frac{t}{2}$. Aquí se observa como rápidamente crece el valor de la función en $x = 0$, y disminuye el ancho conforme el parámetro $\frac{t}{2}$ aumenta.

D.4. Densidad de Estados

Si tenemos un sistema de radiación electromagnética descrita por un potencial vectorial \mathbf{A}

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + \mathbf{A}_0^* e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} . \quad (\text{D.17})$$

Buscamos calcular el número de estados de los fotones en el campo de radiación que se encuentran en el intervalo $\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}$. Para ello consideramos que el sistema esta contenido en una caja de lados L . Pidiendo condiciones periódicas en las fronteras, el potencial vectorial debe cumplir que $\mathbf{A}(x, y, z) = \mathbf{A}(x + L, y, z)$, o de manera explícita, considerando solo la parte espacial de (D.17)

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &= e^{i(k_x, k_y, k_z)\cdot(x+L, y, z)} \\ &= e^{iLk_x} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} , \end{aligned}$$

por lo que $e^{iLk_x} = 1$, *i.e.* $Lk_x = 2\pi n_x$ con n_x un número entero. Lo mismo para k_y y para k_z . Entonces reescribimos el intervalo $\Delta \mathbf{k}$ en términos de los números n_x , n_y y n_z .

$$\Delta \mathbf{k} = \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z .$$

Ahora es posible en vez de sumar sobre \mathbf{k} , $\sum_{\Delta \mathbf{k}}$, sumar sobre \mathbf{n} , $\sum_{\Delta \mathbf{n}}$, con $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$. Si además suponemos que el volumen es grande, de modo que tengamos estados densos, se tiene

$$\begin{aligned} \sum_{\Delta \mathbf{n}} &\longrightarrow \int d^3 n \\ &= \int \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 d^3 k . \end{aligned}$$

Con la relación $|\mathbf{k}| = \frac{w}{c}$, y en un sistema coordenado esférico donde $r = \frac{w}{c}$

$$\int \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 d^3 k = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3} \int d\Omega \left(\frac{w}{c} \right)^2 d \left(\frac{w}{c} \right) \hbar^3 .$$

En esta ultima relación, $L^3 = \mathcal{V}$, el volumen ocupado por el sistema. Así finalmente tenemos

$$\sum_{\Delta \mathbf{k}} \longrightarrow \frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3} \int d\Omega \left(\frac{w}{c} \right)^2 d \left(\frac{w}{c} \right) \hbar^3 .$$

Bibliografía

- [1] W. Becker and G.Pavlov, Pulsars and isolated neutron stars, in The Century of Space Science Vol. 1, Edited by Johan A. M. Bleeker, Johannes Geiss and Martin C. E. Huber, Kluwer Academic Publishers (2001), astro-ph/208356.
- [2] D. Sanwal, G. G. Pavlov, V. E. Zavlin, and M. A. Teter, Discovery of absorption features in the X-ray spectrum of an isolated neutron star, *ApJ* **574** (2002) L61-L64.
- [3] A. V. Turbiner and J. C. López Vieyra, One-electron molecular systems in a strong magnetic field, *Phys. Repts.* **424** (2006) 309.
- [4] A. V. Turbiner, A helium-hydrogenic molecular atmosphere of neutron star, *astro-ph/0506677* (2005).
- [5] A. V. Turbiner and J. C. López Vieyra, A hydrogenic molecular atmosphere of a neutron star, *Modern Physics Letters A* **19** (2004) 19191923.
- [6] G. Wunner and H. Ruder, Electromagnetic transitions for the hydrogen atom in strong magnetic fields, *ApJ* **242** (1980) 828-842.
- [7] H. Ruder, G. Wunner, H. Herold and F. Geyer, Atoms in strong magnetic fields, Springer-Verlag, (1994).
- [8] A. Y. Potekhin, Hydrogen atom moving across a strong magnetic field: analytical approximations, *J. Phys. B* **31** (1998) 49-63.
- [9] G.Pavlov and V.Bezchastnov Once-ionized helium in superstrong magnetic fields, *ApJ* **635** (2005), L61L64.
- [10] I. I. Sobel'man, *Introduction To The Theory Of Atomic Spectra*, (Pergamon Press Oxford - New York - Toronto - Sydney - Paris - Braunschweig 1972).
- [11] Yu. P. Kravchenko and M. A. Liberman, Exact solution for a hydrogen atom in a magnetic field of arbitrary strength, *Phys. Rev. A* **54** (1996) 278.

- [12] R. H. Garstang, Atoms in high magnetic fields, *Rep. Prog Phys* **40** (1976) 105.
- [13] A. V. Turbiner, Zeeman effect in hydrogen: New outlook on old perturbation theory, *Z. Phys. A* **308** (1982) 111.
- [14] N. L. Khvingia and A.V.Turbiner, The Zeeman effect revisited, *J. Phys. B* **25** (1992) 343.
- [15] A.Y.Potekhin and A.V.Turbiner, Hydrogen atom in a magnetic field: The quadrupole moment, *Phys. Rev. A* **63** (2001) 065402 .
- [16] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, (Pergamon Press Oxford - New York - Toronto - Sydney - Paris - Frankfurt 1977).