



IFSC UNIVERSITY
OF SÃO PAULO
São Carlos Institute of Physics

Efeito Stark quadrático e dinâmico

Alejandra Ayulo Cumpalli

Disciplina : Fundamentos da Interação da Radiação com a Matéria 2022-1

Professor : Philippe Courteille

Índice de Conteúdo

Resumo

Introdução

- Objetivos

Fundamentação Teórica

Teoria de Perturbação Independente do Tempo

- Efeito Stark Linear do átomo de hidrogênio
 - Efeito Stark Quadrático do átomo de hidrogênio
 - Efeito Stark Dinâmico
-

Resumo

Neste seminário é obtido a segunda correção na teoria de perturbação independente do tempo no caso do efeito Stark no estado fundamental do átomo de hidrogênio e para o caso do efeito Stark dinâmico consideramos o efeito de Autler Townes ademais um modelo de dos níveis.

Além disso encontrando uma diferença no primer e segundo ordem e que varia linearmente com a intensidade do campo elétrico e a outra varia quadrática mente com a intensidade do campo.

Introdução



O efeito Stark consiste no deslocamento dos níveis de energia de um átomo quando um campo eléctrico externo é incidente sobre ele, e foi descoberto em 1913. No entanto, quando se trabalha com campos eléctricos estáticos, só pode ser descrito usando a teoria da perturbação independente do tempo [1].

Uma das principais características do efeito dinâmico de Stark é a relação entre frequências e intensidades, desde que o campo eléctrico seja encontrado com frequência, é conhecido como o efeito Autler-Townes[2].

Objetivos

- Analisar a diferença entre a primeira e a segunda perturbação de energia do átomo de hidrogênio.
- Cálculo do Efeito Stark dinâmico num modelo sintetizado .

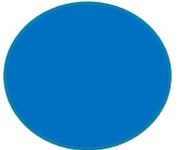
Fundamentação Teórica

Quando um campo eléctrico estático é aplicado a um átomo de hidrogênio, ocorre um deslocamento da nuvem electrónica em relação ao núcleo do átomo, gerando um dipolo eléctrico, onde o hamiltoniano entre o dipolo eléctrico e o campo eléctrico E pode ser representado como:

$$\omega s = -qER = -qEz \quad (2.1)$$

e começando com a teoria da perturbação independente do tempo é que vamos obter o termo de campo externo sobre as auto energias e auto estado do hamiltoniano não perturbado do átomo de hidrogênio.

Efeito Stark Linear do átomo de hidrogênio



A correção em primeira ordem pode ter contribuição não nula apenas para estados com degenerescência em l , pois a paridade das autofunções é dada por $(-1)^l$.

Então se temos a seguinte matriz de perturbação que tem componentes diferentes de zero apenas entre os estados operacionais temos que colocar paridade e considerando o nível 2 e os estados $l=0$ e $l=1$.

$$\langle n' l' m' | z | n l m \rangle = 0, \text{ para } l = l' \quad (2.2)$$

Além disso,

$$0 = \langle n' l' m' | [L_z, z] | n l m \rangle = (m - m') \langle n' l' m' | z | n l m \rangle \quad (2.3)$$

Nós deduzimos que

$$\langle n' l' m' | z | n l m \rangle = 0, \text{ para } m \neq m' \quad (2.4)$$

Por tanto, escolhendo as bases como $(2s, 2p, m=0, 2p, m=1, 2p, m=-1)$, onde obtemos a matriz:

$$W_s = \begin{bmatrix} 0 & \langle 2s|W|2p, m=0 \rangle & 0 & 0 \\ \langle 2p, m=0|W|2s \rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

Nós calculamos explicitando

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{200}|z|\Phi_{100} \rangle &= \frac{a_B}{32\pi} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r e^{\frac{-r}{2}} \cos \theta r \cos \theta (2-r) e^{\frac{-r}{2}} r^2 \sin \theta d\theta d\phi dr \\ &= \frac{a_B}{16} \int_{-1}^1 \cos^2 \theta d(\cos \theta) \int_0^\infty (2-r)r^4 e^{-r} dr \end{aligned} \quad (2.6)$$

Temos o seguinte resultado :

$$\frac{a_B}{16} \frac{2}{3} (-72) = -3a_B \quad (2.7)$$

Onde a equação característica para TIPT degenerado é :

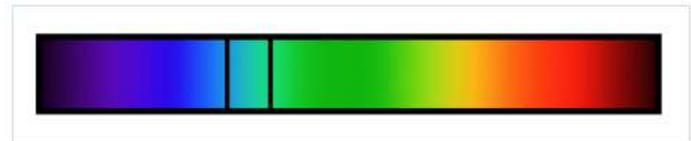
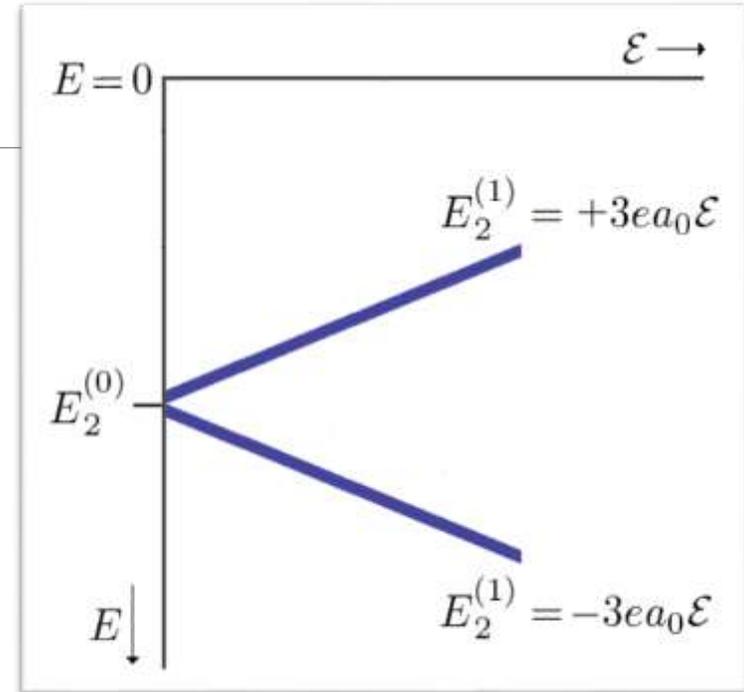
$$0 = \det(W_s - E\delta_{ll'}\delta_{mm'}) = E^2(E^2 - W_s^2) \quad (2.8)$$

de tal forma que obtemos quatro energias

$$E = 0 \quad (2.9)$$

$$E = +3ea_B|\vec{\epsilon}| \quad (2.10)$$

$$E = -3ea_B|\vec{\epsilon}| \quad (2.11)$$



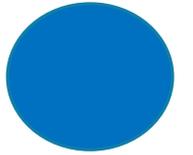
Se o elemento da matriz é linear em $|\vec{\epsilon}|$. Por tanto, essa correção é conhecida de efeito Stark linear. Transformando na base diagonalizando a perturbação, obtemos 4 vetores:

$$|2p, m = +1 \rangle \quad (2.12)$$

$$|2p, m = -1 \rangle \quad (2.13)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|2p, m = 0 \rangle + |2s, m = 0 \rangle \quad (2.14)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|2p, m = 0 \rangle - |2s, m = 0 \rangle \quad (2.15)$$



Efeito Stark Quadrático do átomo de hidrogênio

Se com a teoria de perturbação para o estado 1s do hidrogênio seu termo de energia em segundo ordem é dado por :

$$\varepsilon^{(2)} = e^2 E^2 \sum_{n \neq 1, l, m} \frac{|\langle 100 | z | nlm \rangle|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_n}$$

(2.16)

Não é nulo e terá uma contribuição negativa por $\varepsilon_1 - \varepsilon_n < 0$.

Autovalores da base $|nlm\rangle$

Considerando um limite superior da energia que pode ser obtida $|\varepsilon_1 - \varepsilon_2| \geq \Delta\varepsilon$, onde $\Delta\varepsilon = |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|$

$$|\varepsilon^{(2)}| \leq \frac{e^2 E^2}{\Delta\varepsilon} \sum_{n \neq 1, l, m} \langle 100 | z | nlm \rangle \langle nlm | z | 100 \rangle$$

(2.17)

$$|\epsilon^{(2)}| \leq \frac{e^2 E^2}{\Delta \epsilon} \langle 100 | z [\sum_{n \neq 1, l, m} |nlm\rangle \langle nlm|] z | 100 \rangle \quad (2.18)$$

da equação 2.18 , então vamos usar a relação da base $[|nlm\rangle]$, temos o seguinte :

$$\sum_{n \neq 1, l, m} |nlm\rangle \langle nlm| = I - |100\rangle \langle 100| \quad (2.19)$$

então da equação 2.19 também pode ser escrito como

$$|\epsilon^{(2)}| \leq \frac{e^2 E^2}{\Delta \epsilon} [\langle 100 | z^2 | 100 \rangle - (\langle 100 | z | 100 \rangle)^2] \quad (2.20)$$

Se $\langle 100 | z | 100 \rangle$ é igual a zero o outro termo da equação 2.20 pode ser calculado assim :

$$\langle 100 | z^2 | 100 \rangle = \int d\Omega \sin \theta \cos^2 \theta \int r^4 \left(\frac{e^{-\frac{r}{a_0}}}{\sqrt{\pi} a_0^3} \right)^2 dr = a_0^2 \quad (2.21)$$

Onde o valor $\Delta\epsilon = \frac{3e^2}{32\pi\epsilon_0 a_0}$, pode ser substituído e a energia do seguinte modo :

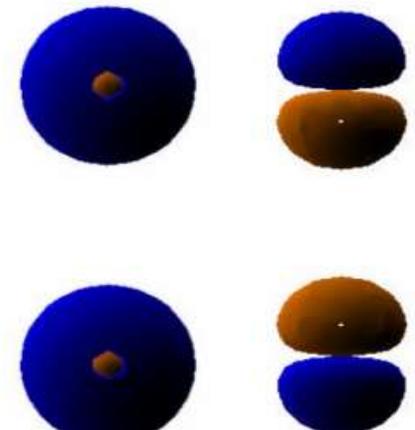
$$|\epsilon^{(2)}| \leq \frac{32\pi}{3} \epsilon_0 a_0^3 E^2 \approx 10,667\pi\epsilon_0 a_0^3 E^2 \quad (2.22)$$

Então para encontrar a correcção da energia da equação 2.16, os elementos da matriz de z precisam de ser calculados:

$$\langle 100|z|nlm \rangle = \int d^3r R_{nl}^* Y_{lm}^*(\theta, \varphi) (r \cos \theta) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{10}(r) \quad (2.23)$$

Lembrando que os termos de $\cos \theta$ pode ser escritos dos harmônicos esféricos

$$\langle r|nlm \rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad \text{e} \quad \cos \theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}(\theta, \varphi)$$



e considerando a parte angular dos harmônicos esféricos pode ser expressada como

$$\langle 100|z|nlm \rangle = \frac{\delta_{l1}\delta_{m0}}{\sqrt{3}} \int dr r^3 R_{nl}^*(r) R_{10}(r) \quad (2.24)$$

a correcção de energia de segunda ordem sendo dada por

$$\varepsilon^{(2)} = \frac{-8\pi\varepsilon_0 a_0 E^2}{3} \sum_{n \neq 1} \left[\left(\int r^3 R_{n1}^*(r) R_{10}(r) dr \right)^2 \left(\frac{n^2}{n-1} \right) \right] \quad (2.25)$$

ao desenvolver os primeiros termos das funções radicais, podemos obter os cálculos dos integrais radicais [4].

$$R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (2.26)$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad (2.27)$$

$$R_{31}(r) = \frac{4}{81\sqrt{6a_0^3}} \left[6 - \frac{r}{a_0} \right] \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}} \quad (2.28)$$

$$R_{41}(r) = \frac{1}{8\sqrt{15a_0^3}} \left[\frac{r^2}{8a_0^2} - \frac{5r}{2a_0} + 10 \right] \quad (2.29)$$

E calculando para cada um desses termos as integrais que vamos ter são :

$$\int_0^{\infty} r^3 R_{21}(r) R_{10}(r) dr = \frac{2^8}{3^4 \sqrt{6}} a_0 \quad (2.30)$$

$$\int_0^{\infty} r^3 R_{31}(r) R_{10}(r) dr = \frac{3^4}{2^6 \sqrt{6}} a_0 \quad (2.31)$$

$$\int_0^{\infty} r^3 R_{41}(r) R_{10}(r) dr = \frac{2^8 3^3}{5^5 \sqrt{15}} a_0 \quad (2.32)$$

A partir das equações 2.30 ,2.31 e 2.32 , o deslocamento de energia será

$$\epsilon^{(2)} \approx \frac{-8\pi\epsilon_0 a_0^3 E^2}{3} (2,220 + 0,300 + 0,157) \approx -7,139\pi\epsilon_0 a_0^3 E^2 \quad (2.33)$$

Finalmente a correção da energética é igual a $9\pi\epsilon_0 a_0^3 E^2$

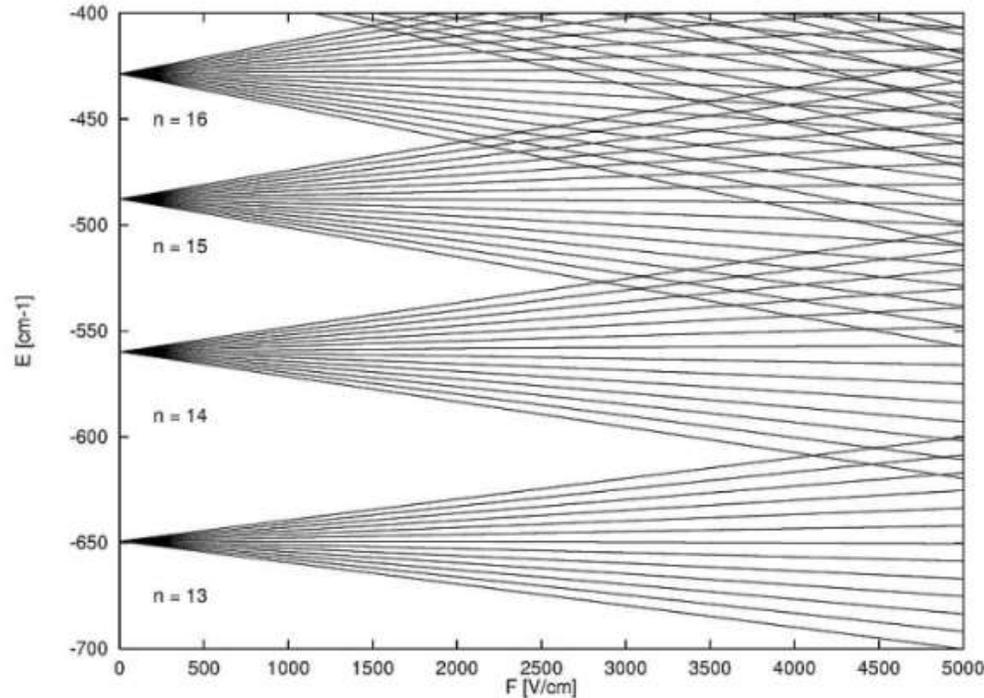
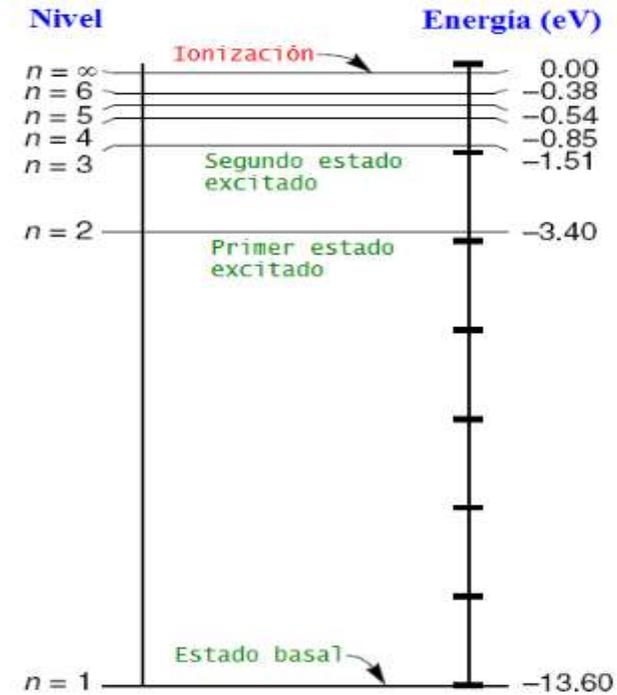
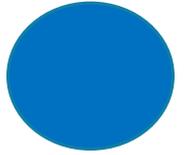


Figura 2.3: Gráfico do efeito Stark quadrático da perturbação de segundo ordem [5]



A figura ao lado mostra os níveis de energia do átomo de hidrogênio na presença de um campo elétrico (em função da intensidade). Além do deslocamento dos níveis (shifting) há o desdobramento dos níveis degenerados (splitting).



Efeito Stark Dinâmico

O efeito Autler-Townes é um tipo de efeito Stark dinâmico correspondente ao caso em que um campo eléctrico oscilante (por exemplo, o de um laser) é sintonizado em ressonância (ou próximo) da frequência de transição de uma dada linha espectral, e resulta numa alteração da forma dos espectros de absorção/emissão dessa linha espectral[5, 6].

Seu Hamiltoniano do sistema será:

$$H = H_0 - d \cdot E \cos(\omega t) \quad (2.34) \quad \text{Caso específico } \omega = \omega_0$$

pode ser satisfeita para cada um dos estados $|i\rangle$ com o hamiltoniano $H_0|i\rangle = \epsilon_i|i\rangle$,

na equação Schroedinger dependente do tempo, teremos para um estado

$$|\Psi(t)\rangle = c_1(t)e^{-i\omega_1 t}|1\rangle + c_2(t)e^{-i\omega_2 t}|2\rangle$$

$$H |\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dc_1}{dt} = \frac{i\Omega^*}{2} e^{-i\Delta t} c_2(t) \quad (2.35) \\ \frac{dc_2}{dt} = \frac{i\Omega^*}{2} e^{-i\Delta t} c_1(t) \quad (2.36) \end{array} \right.$$

E considerando o método de aproximação de onda rotativa (RWA) que não considera as oscilações rápidas como $(\omega + (\omega_2 - \omega_1))$ e que se segue

$$\Delta = \omega - (\omega_2 - \omega_1)e\Omega = \frac{\langle 2|d \cdot E|1 \rangle}{2} \quad (2.37)$$

tendo as condições iniciais de $C_1(0)=1$ e $C_2(0)=0$ com a função ansatz $c_1(t) = e^{irt}$

no caso de ressonância para

$$\Delta = 0$$

$$c_1(t) = \frac{1}{2}(e^{\frac{i\Omega t}{2}} + e^{-\frac{i\Omega t}{2}}) \quad (2.38)$$

$$c_2(t) = \frac{1}{2}(e^{\frac{i\Omega t}{2}} - e^{-\frac{i\Omega t}{2}}) \quad (2.39)$$

da equação 2.37 podemos obter as seguintes quatro soluções:

$$\omega_1 = \omega_1 + \frac{\Omega}{2} \quad (2.40)$$

$$\omega_1 = \omega_1 - \frac{\Omega}{2} \quad (2.41)$$

$$\omega_2 = \omega_2 + \frac{\Omega}{2} \quad (2.42)$$

$$\omega_2 = \omega_2 - \frac{\Omega}{2} \quad (2.43)$$

o que nos permite ter 4 níveis de energia com 3 frequências de transição $\omega_0 = \omega_2 - \omega_1, \omega_0 + \Omega, \omega_0 - \Omega$ sendo da seguinte forma :

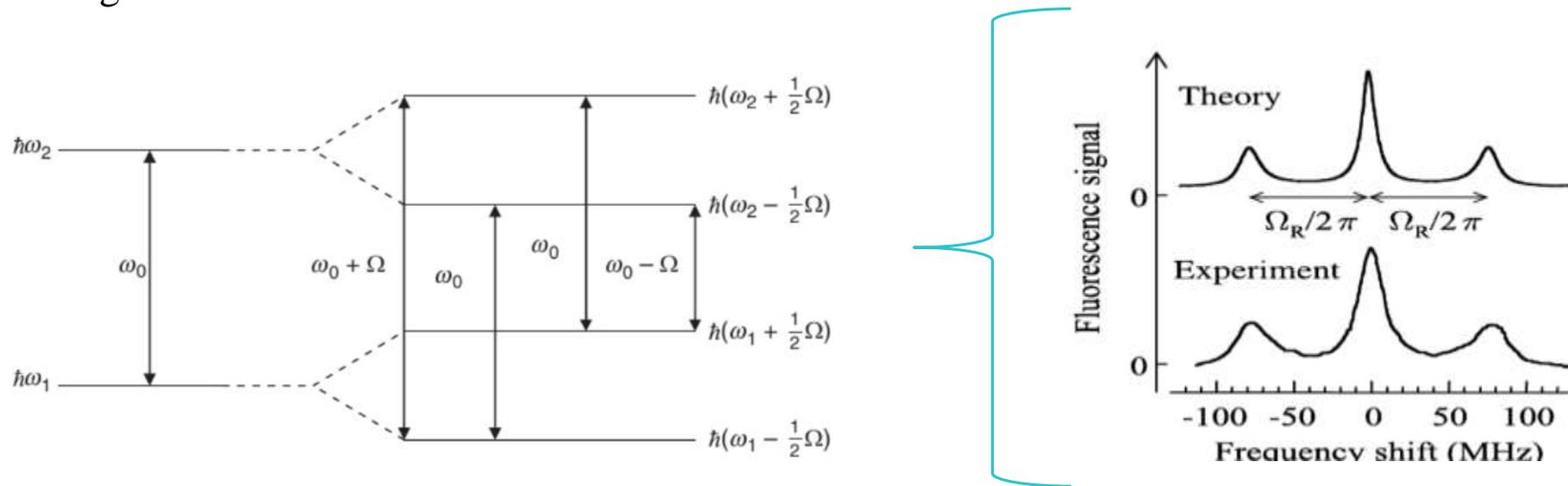


Figura 2.4 Triplete de Mollow no efeito Stark dinâmico [9]

Conclusões

A partir da teoria de perturbação independente do tempo foi obtida uma aproximação de o efeito stark quadrático no estado fundamental do átomo de hidrogênio e assim como o efeito Autler-Townes foi desenvolvido como parte dos cálculos do efeito dinâmico num sistema de dois níveis .

Além disso, esse efeito é o deslocamento e à divisão de linhas espectrais de átomos e moléculas diante de um campo elétrico externo .Uma diferença no primer e segundo ordem e que varia linearmente com a intensidade do campo elétrico e a outra varia quadrática mente com a intensidade do campo .

O alargamento das linhas espectrais também pode ser explicadas pelas partículas carregadas, onde para cada número quântico principal n tem $n-1$ níveis degenerados e com a mesma energia que com a presença de um campo elétrico quebra essa degeneração como se mostra na figura 2.3.

Bibliografía

- [1] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloe. Quantum Mechanics, Wiley. 1 ed., 1991.
- [2] Stephen C. Rand, Lectures on Light. Oxford University Press. 2010.
- [3] Benjamim J. Sussman. Am. J. Phys. 79 (5). 477-484 (2011).
- [4] Robert Eisberg, Robert Resnick. Quantum Physics, John Wiley Sons. 2 ed., 1985.
- [5] Hans A. Bethe, Edwin E. Salpeter. Quantum Mechanics of One- and Two-electron Atoms, Springer-Verlag. 1 ed., 1957.
- [6] Delone, NB; Krainov, Vladimir P (31 de julio de 1999) "Cambio de AC Stark de los niveles de energía atómica". Física-Uspekhi . Diario Uspekhi Fizicheskikh Nauk (UFN) 42(7):669–687.
- [7] Schuda, F; Stroud, CR; Hercher, M (11 de mayo de 1974). "Observación del efecto Stark resonante en frecuencias ópticas". Revista de Física B: Física Atómica y Molecular. doi:10.1088/0022-3700/7/7/002. ISSN0022-3700.
- [8] Fox, Mark. Óptica Cuántica: una introducción: una introducción. Vol. 15. Oxford University Press, 2006.
- [9] Barnett, Stephen y Paul M. Radmore. Métodos en óptica cuántica teórica. Vol. 15. Oxford University Press, 2002.