

4.5. El principio de correspondencia.

Ni la teoría de Bohr ni la teoría de probabilidades de transición de Einstein guardan una relación directa con la teoría clásica de absorción de un sistema de cargas eléctricas. Bohr confiaba en que debía existir una cierta equivalencia asintótica entre la teoría cuántica y la clásica que diera respuesta a la validez de la teoría clásica en ciertos casos, aunque él pensara durante toda su vida que ambas teorías eran irreconciliables. A partir de esta presunción, Bohr, entre 1918 y 1923, introduce el concepto de **principio de correspondencia** que ha servido de inestimable guía para los que posteriormente se dedicaron a la teoría cuántica.

El principio postula una correspondencia (relación) entre la teoría clásica y cuántica en el sentido de alguna condición límite. Con la ayuda de esta idea, vamos a trazar alguna conexión entre las frecuencias, intensidades y polarización de las líneas espectrales de la teoría cuántica, y las correspondientes cantidades de la teoría clásica.

Comencemos considerando la regla de correspondencia para las frecuencias. En teoría clásica las coordenadas q_k de un sistema multiperiodico pueden ser expresadas mediante una serie de Fourier

$$q_k = \sum_{\tau} a_k(\tau) e^{(2\pi\tau\nu t + \delta_k\tau)}, \quad (4.55)$$

donde a_k y δ_k son funciones de los enteros τ . Las frecuencias en dinámica clásica están dadas por $\nu_{cl} = \nu_i = \partial_{J_i} H$, y el armónico τ_i dado por $\nu_{cl} = \tau_i \nu_i = \tau_i \partial_{J_i} H$. Por simplicidad nos limitamos a sistemas multiperiodicos.

En la teoría cuántica las frecuencias son

$$\nu_{qu} = \nu_{m,n} = \frac{E_m - E_n}{h} \equiv \nu_{m,n} = \nu_{m,m-\tau}, \quad (4.56)$$

o bien $\nu_{m,m-\tau} = \frac{E_m - E_{m-\tau}}{h}$. Ahora bien la correspondiente acción cuántica es $J = mh$, de manera que en el proceso de emisión se produce una variación $\Delta J = (m - n)h = \tau h$, así que

$$\nu_{qu} = \frac{\Delta E}{\left(\frac{\Delta J}{\tau}\right)} = \tau \frac{\Delta E}{\Delta J}. \quad (4.57)$$

El principio de correspondencia para frecuencias puede escribirse como sigue; la frecuencia ν_{qu} de una transición $m - n = \tau$, donde $\tau \ll m, n$ corresponde al armónico τ de la frecuencia $\nu = \partial_J H$, o

$$\lim_{\Delta m \ll m} \nu_{qu} = \lim_{\Delta m \ll m} \tau \frac{\Delta E}{\Delta J} = \tau \partial_J E = \nu_{cl}. \quad (4.58)$$

Como ejemplo tomemos el átomo de hidrógeno, recordemos

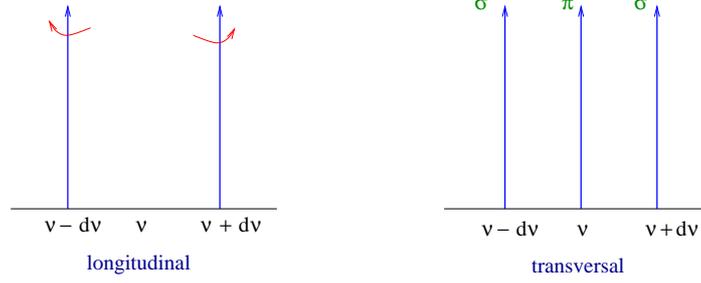


Figura 4.5: Esquema del desdoblamiento de las líneas espectrales al aplicar un campo magnético y se observa en la dirección paralela al campo (longitudinal) o perpendicular (transversal).

$$\nu_{cl} = \tau \partial_{J_r} H = \tau \frac{4\pi^2 \mu Z^2 e^4}{(J_r + J_\theta + J_\phi)^3} = \tau \frac{4\pi^2 \mu Z^2 e^4}{n^3 h^3}. \quad (4.59)$$

El resultado cuántico

$$\nu_{qu} = \nu_{m, m-\tau} = \frac{2\pi^2 \mu Z^2 e^4}{h^3} \left[\frac{1}{(m-\tau)^2} - \frac{1}{m^2} \right] \quad (4.60)$$

luego

$$\lim_{\tau \nu_{qu} \ll m} = \tau \frac{4\pi^2 \mu Z^2 e^4}{n^3 h^3}. \quad (4.61)$$

Con este proceso al límite el principio de correspondencia es satisfecho. De acuerdo con el principio de correspondencia si aparece el armónico τ de la serie de Fourier correspondiente al momento eléctrico en la teoría clásica del sistema, se puede esperar la transición $(m, n) = (m, m - \tau)$ en la teoría cuántica. Esto se expresa como la regla de selección $\Delta m = m - n = \tau$. Para ilustrar el papel del principio de correspondencia abordamos el problema de polarización de las líneas espectrales en el efecto Zeeman. Los resultados experimentales se resumen en la Figura 4.5. En esencia se ilustra que cuando se observa en una dirección paralela al campo magnético $\vec{\mathcal{H}}$ encontramos dos líneas espectrales polarizadas circularmente de frecuencias $\nu \pm \Delta\nu$ con $\Delta\nu = \frac{e\mathcal{H}}{4\pi\mu c}$. Cuando se observa en la dirección perpendicular a $\vec{\mathcal{H}}$ la línea ν aparece linealmente polarizada, con el campo eléctrico paralelo a $\vec{\mathcal{H}}$ y además dos líneas polarizadas linealmente de frecuencia $\nu \pm \Delta\nu$ con el campo eléctrico perpendicular a $\vec{\mathcal{H}}$.

La teoría cuántica del efecto Zeeman normal es como sigue: La energía de interacción ΔE debida al acoplamiento entre el momento magnético del electrón y el campo magnético aplicado, debido a su movimiento orbital en el átomo, es

$$\Delta E = -\frac{e\hbar}{2\mu c} (\vec{L} \cdot \vec{\mathcal{H}}) = -m \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} \hbar. \quad (4.62)$$

La energía de un estado definido por (n, ℓ, m) es independiente de ℓ , el momento angular total, y viene dada por

$$E_{n,m} = -\frac{Z^2 R h c}{n^2} - m h \left(\frac{e \mathcal{H}}{4\pi \mu c} \right). \quad (4.63)$$

La frecuencia de una transición $(n, m) \rightarrow (n', m')$ es entonces

$$\nu + \Delta\nu = \nu_{nn'} + (m - m') \left(\frac{e \mathcal{H}}{4\pi \mu c} \right). \quad (4.64)$$

Esta última relación está de acuerdo con los resultados experimentales si $\Delta m = m - m'$ toma los valores $\Delta m = 0, \pm 1$. Esta regla de selección puede ser demostrada teniendo en cuenta la conservación de momento angular, y que el fotón emitido es dipolar eléctrico.

En la teoría clásica el electrón tiene respecto de un punto dado del espacio un momento dipolar eléctrico $e\vec{r}$. Si el electrón está en movimiento y le aplicamos un campo magnético $\vec{\mathcal{H}}$ a lo largo del eje-z, el teorema de Larmor establece que el electrón precesiona alrededor del eje-z con una frecuencia ω que se conoce como frecuencia de Larmor, de manera que las ecuaciones del movimiento son

$$\begin{aligned} z &= r \cos(\omega t) = \frac{r}{2} \left(e^{i2\pi\nu t} + e^{-i2\pi\nu t} \right), \\ x \pm iy &= r \sin(\omega t) e^{\pm i\psi t} = r e^{\pm i2\pi(\nu \pm \sigma)t}. \end{aligned} \quad (4.65)$$

Ahora si miramos estas relaciones como la aportación al correspondiente desarrollo de Fourier por el acoplamiento con el campo magnético, el principio de correspondencia indica que las reglas de selección son $\Delta m = 0$ para la componente z del momento dipolar eléctrico del electrón, y $\Delta m = \pm 1$ para la componente x e y de este momento. Esta construcción también explica la polarización de la radiación observada.

El principio de correspondencia postula la siguiente relación general respecto de la intensidad de las líneas espectrales: En la teoría cuántica las intensidades de la radiación de frecuencia $\nu_{m,n}$ están determinadas por cuan a menudo la transición $m \rightarrow n$ tiene lugar, esto es por la probabilidad de la transición. Estas probabilidades se corresponden con los cuadrados de las amplitudes de las componentes de Fourier $\tau = m - n$ del momento eléctrico en la teoría clásica. La validez de esta idea fue verificada por H A Kramers, y también por W Kossel y A Sommerfeld. El principio de correspondencia ha servido de guía en otras áreas distintas a la espectroscopía. Con él Ladenberg, Kramers y Heisenberg abordan el problema de la dispersión en la teoría cuántica, y Heisenberg lo toma como referencia para el desarrollo de la denominada mecánica de matrices.