

AULA 23

MECÂNICA QUÂNTICA II

AULA 23

5) Interação entre Campo Eletromagnético e Átomo

A interação entre o campo eletromagnético quantizado e átomos leva a uma grande quantidade de consequências físicas importantes.

Considerações Gerais: para fornecer um tratamento completo do problema teríamos que quantizar ^{também} o campo do elétron atômico, mas como veremos é possível tratar o problema, em determinadas situações, no limite de e^- não relativísticos.

5.1) Interações e ordens de grandeza

Considereemos um sistema com N partículas carregadas com posição, momento, carga elétrica, massa e momento de dipolo magnético $\vec{r}_a, \vec{p}_a, q_a e, m_a$ e $\vec{\mu}_a$, respectivamente, $a=1, 2, \dots, N$.

Até a ordem $(v/c)^2$ o Hamiltoniano do sistema é

$$H = H_T + \sum_a \frac{1}{2m_a} \left(\vec{p}_a - \frac{q_a e}{c} \vec{A}_a \right)^2 - \sum_a \vec{\mu}_a \cdot \vec{B}_a + \frac{1}{8\pi} \sum_{a \neq b} \frac{q_a q_b e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|} \quad (50)$$

QED

onde $\vec{A}_a = \vec{A}(\vec{r}_a)$ e $\vec{B}_a = \vec{B}(\vec{r}_a)$ na descrição de Schrödinger

$$\vec{\mu}_a = \frac{e \hbar}{2m_a c} g_a \vec{S}_a \quad \text{com } g_a \text{ o fator giromagnético}$$

No gauge de Coulomb $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ definimos

$$H_M = \sum_a \frac{\vec{p}_a^2}{2m_a} - \frac{1}{8\pi} \sum_{a \neq b} \frac{q_a q_b e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|} \quad (51a)$$

$$H_I = - \sum_a \frac{q_a e}{m_a c} \vec{p}_a \cdot \vec{A}_a - \sum_a \vec{p}_a \cdot \vec{B}_a \quad (51b)$$

$$H_2 = \sum_a \frac{q_a^2 e^2}{2m_a c^2} |\vec{A}_a|^2 \quad (51c)$$

de forma que $H = H_T + H_M + \overbrace{H_I + H_2}^{H_{int}}$

Para estimar a ordem de grandeza dos termos de H_{int} lembremos que:

(i) para uma partícula confinada numa região de tamanho a

$$mv \sim \frac{\hbar}{a}$$

(ii) para um sistema ligado as diferenças de energia são da ordem de

$$mv^2 \sim m \left(\frac{\hbar}{ma} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

(iii) a frequência dos fótons interagindo com o sistema é

$$\hbar \omega \sim \frac{\hbar^2}{ma^2} \Rightarrow \omega \sim \frac{\hbar}{ma^2}$$

(iv) assumindo 1 γ por volume λ^3 leva a

$$B^2 \lambda^3 \Rightarrow B^2 \left(\frac{2\pi}{\omega} c \right)^3 \approx \hbar \omega \Rightarrow B^2 \approx \frac{\hbar \omega^4}{c^3}$$

esquecendo $\lambda_{\gamma}'s$

$$\Rightarrow B \sim \sqrt{\frac{\hbar}{c}} \frac{\omega^2}{c} \sim \sqrt{\frac{\hbar}{c}} \frac{\hbar^2}{m^2 a^4 c}$$

$$(v) \text{ como } B \sim \frac{A}{\lambda} \Rightarrow A \sim B \frac{2\pi c}{\omega} \Rightarrow A \sim \sqrt{\frac{\hbar}{c}} \omega \sim \sqrt{\frac{\hbar}{c}} \frac{\hbar}{ma^2}$$

usando (i) - (v) temos então que

$$\begin{aligned} \frac{e}{c} \frac{p}{m} A &\sim \frac{e}{c} \frac{\hbar}{ma} \sqrt{\frac{\hbar}{c}} \frac{\hbar}{ma^2} \sim \frac{e}{c\sqrt{\hbar c}} \frac{\hbar^3}{m^2 a^3} \sim \frac{e}{c\sqrt{\hbar c}} m v^3 \\ &\sim \sqrt{\alpha} m v^2 (v/c) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mu B &\sim \frac{e}{mc} \hbar \sqrt{\frac{\hbar}{c}} \frac{\hbar^2}{m^2 a^4 c} \sim \frac{e}{c^2 \sqrt{\hbar c}} \frac{\hbar^4}{m^3 a^4} \sim \frac{e}{\sqrt{\hbar c}} \frac{1}{c^2} m v^4 \\ &\sim \sqrt{\alpha} m v^2 (v/c)^2 \end{aligned}$$

$$\frac{e^2}{m^2 c^2} A^2 \sim \frac{e^2}{m^2 c^2} \left(\sqrt{\frac{\hbar}{c}} \frac{\hbar}{ma^2} \right)^2 \sim \frac{e^2}{\hbar c^3} \frac{\hbar^4}{m^4 a^4} \sim \alpha v^2 (v/c)^2$$

Logo podemos concluir que:

- (1) 1º termo de H_1 é da ordem de $\sqrt{\alpha} m v^2 (v/c)$
- (2) 2º termo de H_1 é da ordem de $\sqrt{\alpha} m v^2 (v/c)^2$
- (3) H_2 é da ordem de $\alpha v^2 (v/c)^2$

$$\frac{\varphi(H_1)}{\varphi(H_{\text{Dirac}})} \sim \frac{\sqrt{\alpha} m v^2 (v/c)}{m v^2} \sim \sqrt{\alpha} (v/c) \Rightarrow \text{pequena correção}$$

p/v $\ll$ c

$$\frac{\lambda}{a} \sim \frac{c}{\omega a} \sim \frac{c}{\hbar} m a \sim \frac{\hbar}{m v} \frac{m c}{\hbar} \gg 1$$

$\Rightarrow$ a radiação é dominada pelo menor multipolo compatível com as regras de seleção de momento angular e paridade

$$\frac{\varphi(H_2)}{\varphi(H_1)} \sim \frac{\sqrt{\alpha}}{m} (v/c) \Rightarrow 1^\circ \text{ termo de } H_1 \text{ domina as correções!}$$

5.2) Taxas de Transição

O primeiro termo de H_1 domina em 1ª ordem, esse termo está associado à criação/destruição de 1 fóton. Logo escrevemos

$$H_1 = -\frac{e}{c} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar c}{2kV}} [J_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda} + h.c.] \quad (52)$$

onde

$$J_{\mathbf{k}\lambda} = \sum_a \left[\frac{q_a}{m_a} \vec{p}_a \cdot \vec{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda} + i \frac{e q_a}{2 m_a} g_a \vec{S}_a \cdot (\mathbf{k} \times \vec{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}) \right] e^{i \mathbf{k} \cdot \vec{r}_a} \quad (53)$$

onde $q_a = -1$ para elétrons.

Sabemos a taxa de transição, usando a aproximação de 1ª ordem, $T \approx H_1$, e' (teoria de espalhamento)

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | T | i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f) \quad (54)$$

EMISSÃO: Consideremos a emissão de um γ assumindo que existam n fótons com os mesmos valores de $\mathbf{k}$ e λ (30)

estado inicial :

$$|i; n_{\vec{k}\lambda}\rangle = |i\rangle \otimes |n_{\vec{k}\lambda}\rangle$$

estado final :

$$|f; n_{\vec{k}\lambda}+1\rangle = |f\rangle \otimes |n_{\vec{k}\lambda}+1\rangle$$

sabemos que

$$\langle n_{\vec{k}\lambda}+1 | a_{\vec{k}\lambda}^\dagger | n_{\vec{k}\lambda} \rangle = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\lambda,\lambda'} \sqrt{n_{\vec{k}\lambda}+1} \quad (55)$$

logo

$$\langle f | H_1 | i \rangle = \langle f; n_{\vec{k}\lambda}+1 | H_1 | i; n_{\vec{k}\lambda} \rangle = \frac{-e}{c} \sqrt{\frac{\hbar c}{2kV}} \sqrt{n_{\vec{k}\lambda}+1}$$

$$\langle f | J_{\vec{k}\lambda}^\dagger | i \rangle \quad (56)$$

$$\text{agora } \int dE_\gamma \rho_\gamma^f \omega_{i \rightarrow f} \Rightarrow d\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | T | i \rangle|^2 \rho_\gamma^f$$

$$\text{onde } \rho_\gamma^f = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d^3 p_\gamma}{dE_\gamma} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\hbar^3 k^2 dk}{\hbar c} d\Omega_\gamma \quad \left(\begin{array}{l} \text{densidade de} \\ \text{estados} \\ \text{finais} \end{array} \right)$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{k^2}{\hbar c} d\Omega_\gamma \quad \text{com a conservação de energia levando a}$$

$$\hbar\omega = \hbar kc = E_i - E_f$$

$$\frac{d\Gamma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_\gamma} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{k^2}{\hbar c} \left| \frac{-e}{c} \sqrt{\frac{\hbar c}{2kV}} \sqrt{n_{\vec{k}\lambda}+1} \langle f | J_{\vec{k}\lambda}^\dagger | i \rangle \right|^2 \cdot \frac{2\pi}{\hbar}$$

$$\frac{d\Gamma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_{\gamma}} = \frac{\alpha}{2\pi} k |\langle f | J_{\vec{k}, \lambda}^+ | i \rangle|^2 (n_{\vec{k}, \lambda} + 1) \quad (56)$$

de fótons com mom $\vec{k}$ e polarização λ ! ($\hbar = c = 1$)

Chamamos de emissão espontânea quando $n_{\vec{k}, \lambda} \equiv 0$ e estimulada (induzida) se $n_{\vec{k}, \lambda} \neq 0$. Note que a probabilidade de transição cresce com o número de fótons presentes!

A largura total é definida como

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \sum_f \sum_{\lambda} d\Omega_{\gamma} \frac{d\Gamma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_{\gamma}} \quad (57)$$

$\uparrow$ membros do multipletto $\uparrow$ polarização
 $E_i - E_f = \hbar k c$

Se o estado $|i\rangle$ pode decair emitindo γ , seu tempo de vida é

$$\tau_i = \hbar / \Gamma_{i \rightarrow f}$$

Absorção Nesse caso o estado final é discreto e devemos usar as expressões que obtivemos antes mas sem somar sobre o estado final. Por outro lado, o estado inicial é contínuo e podemos somar eles para eliminar o $\delta(E_i - E_f)$!

$$\Gamma_{I \rightarrow f} = \int dE_i \rho_i \omega_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_1 | i \rangle|^2 \rho_i \quad (58)$$

onde a densidade de estados iniciais é

$$\rho_i = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{k^2 d\Omega_r}{\hbar c}$$

Nesse caso

$$\langle f; n_{\vec{k},\lambda}-1 | H_1 | i; n_{\vec{k},\lambda} \rangle = -\frac{e}{c} \sqrt{\frac{\hbar c}{2\hbar\nu}} \langle f | J_{\vec{k},\lambda} | i \rangle \sqrt{n_{\vec{k},\lambda}} \quad (59)$$

analogamente

$$\frac{d\Gamma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_r} = \frac{\alpha}{2\pi} k |\langle f | J_{\vec{k},\lambda} | i \rangle|^2 n_{\vec{k},\lambda} \quad (60) \quad (\hbar c = 1)$$

por reversão temporal temos

$$|\langle f | J_{\vec{k},\lambda} | i \rangle|^2 = |\langle i | J_{\vec{k},\lambda}^+ | f \rangle|^2 \quad (61)$$

levando a

$$\boxed{\frac{d\Gamma_{\text{abs}}}{d\Gamma_{\text{emissão}}} = \frac{n_{\vec{k},\lambda}}{n_{\vec{k},\lambda} + 1}} \quad (62)$$

Resultado obtido por
Einstein usando termodinâmica!

~~Revisão~~ (5.3) Transições Dipolares

Quando o comprimento de onda da radiação emitida (λ) é maior que as dimensões características do sistema (atômico) podemos expandir $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_a}$ na expressão para $J_{\vec{k},\lambda}$:

(33)

$$J_{\vec{k}\lambda} = \sum_a \left[\frac{q_a}{m_a c} \vec{p}_a \cdot \vec{E}_{\vec{k}\lambda} + i e \frac{q_a}{2m_a} \vec{p}_a \cdot (\vec{k} \times \vec{E}_{\vec{k}\lambda}) \right] e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_a}$$

1

desprezível por ser
de ordem superior

$$\cong \sum_a \frac{q_a}{m_a c} \vec{p}_a \cdot \vec{E}_{\vec{k}\lambda} \quad (63)$$

Escrevendo:

$$\frac{\vec{p}_a}{m_a} = \frac{-i}{\hbar} [\vec{r}_a, H_n] \Rightarrow \langle f | \frac{\vec{p}_a}{m_a} | i \rangle = \frac{-i}{\hbar c} \langle f | [\vec{r}_a, H_n] | i \rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar c} (E_f - E_i) \langle f | \vec{r}_a | i \rangle = \pm i k \langle f | \vec{r}_a | i \rangle \quad (64)$$

onde $+$ ($-$) é para absorção (emissão)

Portanto no limite de grande comprimento de onda λ

$$|\langle f | J_{\vec{k}\lambda}^+(t) | i \rangle|^2 = |\pm i k \langle f | \sum_a q_a \vec{r}_a | i \rangle \cdot \vec{E}_{\vec{k}\lambda}^*|^2$$

para emissão espontânea temos usando (56)

$$\frac{d\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{esp}}}{d\Omega_{\gamma}} = \frac{\alpha}{2\pi} k^3 |\langle f | \vec{D} \cdot \vec{E}_{\vec{k}\lambda}^* | i \rangle|^2 \quad (65)$$

onde definimos

$$\vec{D} = \sum_a q_a \vec{r}_a \quad (66)$$

que é o momento de dipolo elétrico a menos de um
um fator e

$\vec{D}$ é um vetor polar. Transições entre estados $|i, t\rangle$ que sejam auto-estados de momento angular e paridade devem satisfazer as regras de seleção do dipolo elétrico (operador vetorial)

$$\begin{aligned} |j_f - j_i| &= 0, 1 \\ |m_f - m_i| &= 0, 1 \end{aligned}, \text{ mudança de paridade}$$

essas são chamadas de transições permitidas.

Praticamente todas as linhas de emissão e absorção observadas no espectro atômico usual são transições E1 (Eq. (65)). Estados que não satisfazem as regras de seleção podem ser conectados por múltiplos mais elevados que requerem taxas de transição mais lentas (por alguma potência de $(ka)^2$). O próximo termo é o dipolo magnético M1, com as mesmas regras de seleção, exceto que ^{não} deve haver mudança de paridade nesse caso. Esse termo tem contribuição do termo que acopla com $\vec{B}$ em $T_{\vec{k}\lambda}$ e da primeira conexão para $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \simeq 1 + i\vec{k}\cdot\vec{r}$, ambas amplitudes são menores que E1 de um fator ka . $\Rightarrow$ taxa mais lenta por um fator $(ka)^2$. Como $\vec{A}$ e $\vec{B}$ são vetores polar e axial, respectivamente, a regra geral é:

E1: mudança de paridade = $(-1)^L$
M1: mudança de paridade = $-(-1)^L$ (regra de reflexão oposta)

Se $J^\pm$ for o momento angular e paridade de um estado, $4^- \rightarrow 1^+$ é E3, $4^+ \rightarrow 1^+$ é M3

se l é a ordem do multipolo

$$|j_i - j_f| \leq l \leq j_i + j_f$$

(Wigner - Eckart)

assim as taxas de transição para

El variam como k^{2l+1}

Ml " " k^{2l+3}

5.4) Espalhamento de Fótons

Na QED, assim como na eletrodinâmica clássica, o espalhamento de luz é um processo de 2º ordem. A razão é que há um único fóton no estado inicial e final, enquanto que o termo dominante em H_1 na interação entre o campo e as fontes cria ou destrói um único fóton e logo só pode conectar os estados inicial e final em 2º ordem. O termo H_2 é quadrático no potencial vetor e logo pode conectar os estados inicial e final em 1º ordem.

De acordo com o que aprendemos na teoria de espalhamento o operador T em ordem mais baixa para descrever o processo é

$$T = H_2 + H_1 \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} H_1 \quad (67)$$

onde $H_0 = H_r + H_M$ é a energia do campo e da matéria sem interação.

Considere a colisão de um fóton de momento $\vec{k}$ e helicidade λ com o estado inicial da matéria $|i\rangle$ produzindo um estado final com um fóton espalhado $(\vec{k}', \lambda')$ e o alvo no estado $|f\rangle$

$$|i\rangle \otimes |\vec{k} \lambda\rangle \longrightarrow |f\rangle \otimes |\vec{k}' \lambda'\rangle$$

Os estados inicial e final são:

$$|\Phi_{i, \vec{k} \lambda}\rangle \equiv |i; \vec{k} \lambda\rangle = a_{\vec{k} \lambda}^+ |i; 0\rangle$$

$$|\Phi_{f, \vec{k}' \lambda'}\rangle \equiv |f; \vec{k}' \lambda'\rangle = a_{\vec{k}' \lambda'}^+ |f; 0\rangle$$

com $E = E_i + \hbar k c = E_f + \hbar k' c$

A taxa de colisão é

$$d\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Phi_{f, \vec{k}' \lambda'} | T | \Phi_{i, \vec{k} \lambda} \rangle|^2 \rho_{k'}^{(\sigma)} \quad (68)$$

onde $\rho_{k'}^{(\sigma)}$ é a densidade de estados finais de fótons

$$\rho_f^{(\sigma)} = \frac{V}{(2\pi)^3 \hbar c} k^2 d\Omega$$

O elemento de matriz de interação quadrática H_2 entre esses estados é facilmente avaliado: apenas

(37)

temos $a_1^+ a_2$ e $a_2 a_1^+$ que contribuem para o processo, assim

$$|\vec{A}(\vec{r})|^2 \Rightarrow \sum_{k_1 k_2} \frac{\hbar c}{\sqrt{2k_1 V} \sqrt{2k_2 V}} (\vec{E}_{k_1} \cdot \vec{E}_{k_2}^*) e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} (a_{k_1} a_{k_2}^+ + a_{k_2}^+ a_{k_1})$$

$$= \frac{1}{2V} \sum_k \frac{\hbar c}{k} + \frac{\hbar c}{V} \sum_{k_1 k_2} \frac{1}{\sqrt{k_1 k_2}} (\vec{E}_{k_1} \cdot \vec{E}_{k_2}^*) e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} a_{k_2}^+ a_{k_1}$$

onde $\sum_k$ implica soma em polarização também. O 1º termo não cause transição, assim o elemento de matriz que precisamos calcular é

$$\langle 0 | a_{k'} a_{k_2}^+ a_{k_1} a_k^+ | 0 \rangle = \delta_{k, k_1} \delta_{k', k_2}$$

$$\langle f, \vec{k}' \lambda' | H_2 | i; \vec{k} \lambda \rangle = \frac{e^2 \hbar}{2V} \frac{1}{\sqrt{k k'}} A_2 \quad (68)$$

onde

$$A_2 = (\vec{E}_{\vec{k}' \lambda'}^* \cdot \vec{E}_{\vec{k} \lambda}) \frac{1}{m} \sum_a \langle f | e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}_a} | i \rangle$$

$$= \frac{\vec{E}_{\vec{k}' \lambda'}^* \cdot \vec{E}_{\vec{k} \lambda}}{m} F_{fi}(\vec{q}) \quad (69)$$

$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ e o
momento transferido

$F_{fi}(\vec{q})$ é o fator de forma que já vimos antes.

(38)

O termo de 2º ordem em H_1 e

$$T_2 = \sum_c \frac{\langle f; k' \lambda' | H_1 | \phi_c \rangle \langle \phi_c | H_1 | i; k \lambda \rangle}{E - E_c + i\epsilon} \quad (70)$$

e envolve dois tipos distintos de estados intermediários e denominadores:

1) aqueles devidos ao operador de aniquilação de H_1 atuando em $|i; k \lambda\rangle$. Esse operador terá o mesmo k e λ do fóton inicial e deixará ϕ fótons no estado intermediário. Nesse caso

$$|\phi_c\rangle = |n; 0\rangle \quad E - E_c = E_i + \hbar k_c - E_n$$

onde n designa algum estado do alvo com energia E_n

2) aqueles devido ao operador de criação de H_1 atuando em $|i; k \lambda\rangle$ que produz um estado intermediário $|\phi_c\rangle$ com 2 fótons, um sendo o γ incidente e outro com números quânticos (k_1, λ_1) não conhecidos. Então em

$$\langle f; k' \lambda' | H_1 | \phi_c \rangle$$

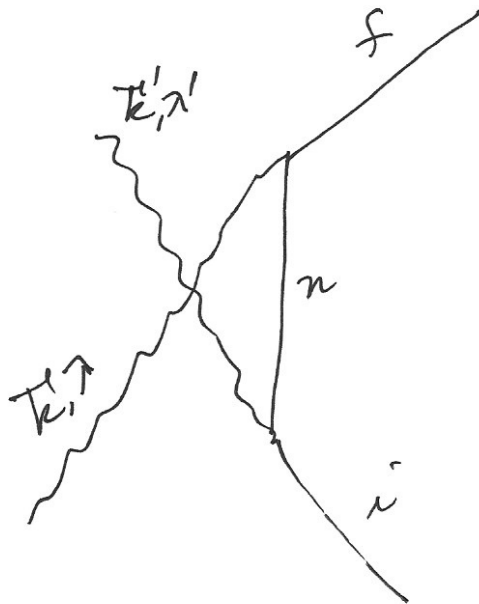
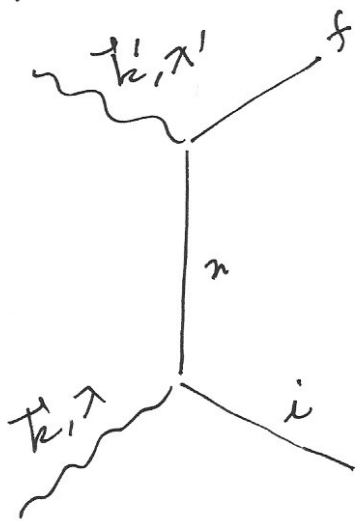
os operadores de aniquilação em H_1 precisam remover o γ incidente de $|\phi_c\rangle$ o

que requer que $k_1 = k'$ e $\lambda_1 = \lambda'$

$$|\phi_c\rangle = |n; k, \lambda, k', \lambda'\rangle$$

$$E = E_c = E_i + k\hbar c - (E_n + k'\hbar c + k'\hbar c) \\ = E_i - E_n - \hbar c k'$$

As duas contribuições para a amplitude de espalhamento podem ser representadas pelos diagramas



As 2 contribuições para o processo

$$|i, k, \lambda\rangle \xrightarrow{H_1} |\phi_c\rangle \xrightarrow{H_1} |f, k', \lambda'\rangle$$