A INTERAÇÃO DE UM ÁTOMO COM UMA ONDA ELETROMAGNÉTICA (COMPLEMENTO A_{XIII})

O HAMILTONIANO DE UM ELÉTRON NUM ÁTOMO NA PRESENÇA DE CAMPOS ELETROMAGNÉTICOS É:

$$H = \frac{1}{2m}[\vec{P} - q\vec{A}(\vec{R},t)]^2 + V(R) - \frac{q}{m}\vec{S}\cdot\vec{B}(\vec{R},t)$$

AQUI, $V(R)$ É O POTENCIAL CENTRAL E OS CAMPOS ESTÃO DESCRITOS NUM CALIBRE EM QUE $\Phi(\vec{R},t) = 0$. O ÚLTIMO TERMO É A INTERAÇÃO DO MOMENTO MAGNÉTICO DEVIDO AO SPIN DO ELÉTRON COM O CAMPO MAGNÉTICO.

PARA DESCREVER UMA ONDA ELETROMAGNÉTICA QUE SE PROPAGA NA DIREÇÃO $\hat{y}$ COM POLARIZAÇÃO LINEAR NA DIREÇÃO $\hat{z}$, PODEMOS USAR:

$$\vec{A}(\vec{r},t) = A_z(\vec{r},t)\,\hat{z}$$

$$A_z(\vec{r},t) = \frac{E_0}{\omega}\sin(ky - \omega t)$$

TAL QUE:

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \Rightarrow \vec{E} = E_z(\vec{r},t)\,\hat{z}$$

$$E_z(\vec{r},t) = E_0 \cos(ky-\omega t)$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A} \Rightarrow \vec{B} = B_x(\vec{r},t)\,\hat{x}$$

$$B_x(\vec{r},t) = \frac{\partial A_z}{\partial y} = \frac{k}{\omega} E_0 \cos(ky-\omega t)$$

$$B_x(\vec{r},t) = \frac{E_0}{c}\cos(ky-\omega t)$$

ONDE $\omega = ck$. O VETOR DE POYNTING É DADO POR:

$$\vec{S} = \varepsilon_0 c^2 \vec{E}\times\vec{B} = \varepsilon_0 c E_0^2 \cos^2(ky-\omega t)\,\hat{y}$$

CUJA MÉDIA TEMPORAL É:

$$\vec{S} = \frac{\varepsilon_0 c}{2} E_0^2\,\hat{y}$$

EXPANDINDO O PRIMEIRO TERMO DO HAMILTONIANO:

$$\left[\vec{P} - q\vec{A}\right]^2 = \vec{P}^2 + q^2\vec{A}^2 - q\left(\vec{P}\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\vec{P}\right)$$

ONDE O ÚLTIMO TERMO É SIMETRIZADO PORQUE $\vec{P}$ NÃO COMUTA COM $\vec{R}$. MAS:

$$\vec{P}\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\vec{P} = P_z A_z + A_z P_z = 2 P_z A_z = 2\vec{P}\cdot\vec{A}$$

JÁ QUE A_z SÓ DEPENDE DE Y, QUE COMUTA COM P_z. ASSIM:

$$H = \overbrace{\frac{\vec{P}^2}{2m} + V(R)}^{H_0} - \frac{q}{m}\vec{P}\cdot\vec{A}(\vec{R},t) - \frac{q}{m}\vec{S}\cdot\vec{B}(\vec{R},t) + \frac{q^2}{2m}\vec{A}^2(\vec{R},t)$$

O ÚLTIMO TERMO, DE ORDEM QUADRÁTICA NO CAMPO E_0 PODE SER DESPREZADO PARA SITUAÇÕES USUAIS DE BAIXA INTENSIDADE. ASSIM:

$$W(t) = \overbrace{-\frac{q}{m}\vec{P}\cdot\vec{A}(\vec{R},t)}^{W_I(t)}\ \overbrace{-\frac{q}{m}\vec{S}\cdot\vec{B}(\vec{R},t)}^{W_{II}(t)}$$

O SEGUNDO TERMO É BEM MAIS FRACO QUE O PRIMEIRO.

DE FATO, SUA RAZÃO É:

$$\frac{W_I}{W_{II}} \sim \frac{pA}{sB} \sim \frac{p\,E_0/\omega}{\hbar\,E_0/c} = \frac{p}{\hbar\omega/c} = \frac{p}{\hbar k} \sim \frac{\lambda}{a_0} >> 1$$

PARA TRANSIÇÕES ÓPTICAS ($\lambda \sim 4000-7000$ Å) VAMOS, PORTANTO, FOCAR NO PRIMEIRO TERMO POR ENQUANTO.

$$W_I(t) = -\frac{q}{m}\frac{E_0}{\omega} P_z \sin(kY - \omega t)$$

$$= -\frac{qE_0}{2m\omega i} P_z \left[e^{ikY} e^{-i\omega t} - e^{-ikY} e^{i\omega t}\right]$$

COMO $ky \sim \frac{a_0}{\lambda} << 1$, PODEMOS EXPANDIR AS EXPONENCIAIS:

$$e^{\pm ikY} \cong 1 \pm ikY - \frac{k^2Y^2}{2} + \dots$$

O TERMO DE ORDEM MAIS BAIXA NOS DÁ:

$$W_{DE}(t) = \frac{qE_0}{m\omega} P_z \sin\omega t$$

ESSE É O TERMO DE "DIPOLO ELÉTRICO" CUJO NOME FICARÁ MAIS CLARO ADIANTE.

ESSE TERMO TEM A FORMA JÁ ESTUDADA. PARA TRANSIÇÕES ENTRE ESTADOS $|\varphi_i\rangle$ E $|\varphi_f\rangle$, PRECISAMOS CALCULAR $\langle\varphi_f|P_z|\varphi_i\rangle$. PARA ISSO É CONVENIENTE CALCULAR:

$$[z, H_0] = \left[z, \frac{\vec{P}^2}{2m}\right] = \frac{1}{2m}[z, P_z^2] = \frac{i\hbar}{m} P_z$$

TOMANDO O ELEMENTO DE MATRIZ ENTRE OS ESTADOS FINAL E INICIAL:

$$\langle\varphi_f|[z, H_0]|\varphi_i\rangle = i\frac{\hbar}{m}\langle\varphi_f|P_z|\varphi_i\rangle$$

MAS:

$$\langle\varphi_f|[z, H_0]|\varphi_i\rangle = \langle\varphi_f|(zH_0 - H_0 z)|\varphi_i\rangle$$

$$= (E_i - E_f)\langle\varphi_f|z|\varphi_i\rangle = -\hbar\,\omega_{fi}\langle\varphi_f|z|\varphi_i\rangle$$

FINALMENTE: $\langle\varphi_f|P_z|\varphi_i\rangle = i m\,\omega_{fi}\langle\varphi_f|z|\varphi_i\rangle$

$$\Rightarrow \langle\varphi_f|W|\varphi_i\rangle = \frac{qE_0}{m\omega}(i m \omega_{fi})\langle\varphi_f|z|\varphi_i\rangle$$

$$\langle\varphi_f|W|\varphi_i\rangle = i\,qE_0\,\frac{\omega_{fi}}{\omega}\langle\varphi_f|z|\varphi_i\rangle$$

SE TOMARMOS AUTOFUNÇÕES DE POTENCIAIS CENTRAIS:

$$\langle \vec{r} | \varphi_i \rangle = R_{n_i l_i}(r) Y_{l_i m_i}(\Omega)$$

$$\langle \vec{r} | \varphi_f \rangle = R_{n_f l_f}(r) Y_{l_f m_f}(\Omega)$$

E LEMBRANDO QUE $z = r\cos\theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, r\, Y_{10}(\Omega)$

TEMOS QUE:

$$\langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle \propto \int Y^*_{l_f m_f}(\Omega)\, Y_{10}(\Omega)\, Y_{l_i m_i}(\Omega)\, d\Omega$$

TAIS INTEGRAIS ENVOLVENDO 3 HARMÔNICOS ESFÉRICOS SÓ SÃO NÃO NULAS SE SATISFAZEM ALGUMAS REGRAS:

$$l_f = l_i \pm 1 \quad \text{E} \quad m_f = m_i$$

DEVEMOS NOTAR QUE O OPERADOR z SÓ APARECEU PORQUE A ONDA É POLARIZADA NA DIREÇÃO z. PARA OUTRAS ESCOLHAS TERÍAMOS ALTERNATIVAMENTE x OU y. NESSES CASOS, AO INVÉS DE Y_{10} TERÍAMOS $Y_{1,-1}$ E $Y_{1,1}$.

NESSES CASOS, A REGRA PARA OS ℓ's PERMANECE A MESMA, MAS PARA OS m's TERÍAMOS:

$$m_f = m_i \pm 1$$

PORTANTO, CHEGAMOS ASSIM ÀS CHAMADAS REGRAS DE SELEÇÃO PARA TRANSIÇÃO DE DIPOLO ELÉTRICO:

$$\Delta \ell = \ell_f - \ell_i = \pm 1$$

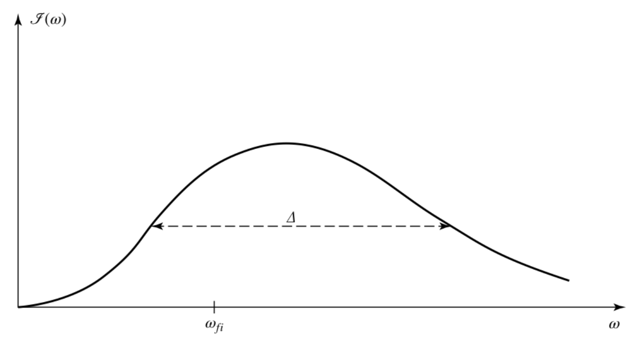
$$\Delta m = m_f - m_i = -1, 0, +1$$

CÁLCULO DA TAXA DE TRANSIÇÃO PARA LUZ NÃO MONOCROMÁTICA

NA PRÁTICA, A LUZ INCIDENTE NÃO É MONOCROMÁTICA, MAS TEM UMA BANDA DE LARGURA Δ. SE A POTÊNCIA INCIDENTE POR UNIDADE DE ÁREA NORMAL À DIREÇÃO DA RADIAÇÃO NO INTERVALO $[\omega, \omega + d\omega]$ FOR $I(\omega)d\omega$, ENTÃO, USANDO O VETOR DE POYNTING:

$$I(\omega)d\omega = \frac{\epsilon_0 c}{2} E_0^2 \qquad [I] = \frac{E}{AT\omega} = \frac{E}{A}$$

A FIGURA MOSTRA A FUNÇÃO $I(\omega)$:



ASSIM: $P_{if}(t;\omega) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} F(t, \omega_{fi})$

$$= \frac{q^2 E_0^2}{4\hbar^2} \left(\frac{\omega_{fi}}{\omega}\right)^2 |\langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle|^2 F(t, \omega_{fi}) \Rightarrow$$

DONDE:

$$P_{if}(t) = \frac{q^2}{2\varepsilon_0 c \hbar^2} |\langle\varphi_f| z |\varphi_i\rangle|^2 \int \left(\frac{\omega_{fi}}{\omega}\right)^2 I(\omega) F(t;\omega-\omega_{fi})\, d\omega$$

ONDE JÁ INTEGRAMOS SOBRE TODAS AS FREQÜÊNCIAS. NOTE QUE, AO INTEGRARMOS AS PROBABILIDADES NAS FREQÜÊNCIAS, ESTAMOS CONSIDERANDO QUE NÃO HÁ COERÊNCIA DE FASE ENTRE ELAS.

JÁ VIMOS QUE, PARA TEMPOS SUFICIENTEMENTE LONGOS, A FUNÇÃO $F(t,\omega-\omega_{fi})$ FICA MUITO ESTREITA EM COMPARAÇÃO COM A LARGURA ESPECTRAL Δ: (VER A FIGURA)

$$\frac{4\pi}{t} \ll \Delta$$

NESSE CASO, PODEMOS APROXIMAR:

$$F(t;\omega-\omega_{fi}) \simeq 2\pi t\, \delta(\omega-\omega_{fi})$$

E FICAMOS COM:

$$P_{if}(t) \simeq \frac{\pi q^2 I(\omega_{fi})}{\varepsilon_0 c \hbar^2} |\langle\varphi_f| z |\varphi_i\rangle|^2\, t$$

NOTE COMO AGORA A TRANSIÇÃO É LINEAR NO TEMPO. PODEMOS, PORTANTO, DEFINIR UMA TAXA DE TRANSIÇÃO:

$$W_{if} = \frac{dP_{if}(t)}{dt} = \underbrace{\frac{\pi q^2}{\varepsilon_0 c \hbar^2} |\langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle|^2}_{C_{if}} I(\omega_{fi})$$

$$W_{if} = C_{if}\, I(\omega_{fi})$$

ONDE O COEFICIENTE DO ELEMENTO DE MATRIZ É:

$$\frac{\pi q^2}{\varepsilon_0 c \hbar^2} = \frac{4\pi^2}{c\hbar^2}\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2}\frac{e^2}{c} = \frac{4\pi^2}{\hbar}\frac{e^2}{\hbar c} \equiv \frac{4\pi^2}{\hbar}\alpha$$

ONDE $\alpha = \frac{1}{137}$ É A CONSTANTE DE ESTRUTURA FINA:

$$C_{if} = \frac{4\pi^2}{\hbar}\alpha\, |\langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle|^2$$

SE ESCREVERMOS $qz = p_z$ (COMPONENTE Z DO DIPOLO ELÉTRICO):

$$W_{if} = \frac{\pi}{\epsilon_0 c \hbar^2} |\langle \varphi_f | p_z | \varphi_i \rangle|^2 I(\omega_{fi})$$

PARA POLARIZAÇÕES LINEARES NAS DIREÇÕES X E Y:

$$W_{if} = \frac{\pi}{\epsilon_0 c \hbar^2} |\langle \varphi_f | p_x | \varphi_i \rangle|^2 I(\omega_{fi})$$

$$W_{if} = \frac{\pi}{\epsilon_0 c \hbar^2} |\langle \varphi_f | p_y | \varphi_i \rangle|^2 I(\omega_{fi})$$