Interação da radiação com a matéria

O que é radiação? Antes de responder esta pergunta, vamos considerar uma carga puntiforme em uma região onde há campo eletromagnético. A força de Lorentz é dada por

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} + \frac{q}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B}.$$

Como fizemos no caso do sistema de equações de movimento descrevendo o campo eletromagnético, isto é, de um conjunto de osciladores harmônicos desacoplados, agora temos apenas uma carga sendo descrita pela equação de movimento dada pela força de Lorentz. Assim, usando a segunda lei de Newton,

$$\frac{d}{dt}(m\mathbf{v}) = q\mathbf{E} + \frac{q}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B}, \tag{1}$$

que vale também para partículas relativísticas. Agora precisamos de uma lagrangeana da qual, usando a equação de Euler & Lagrange, podemos deduzir a Eq. (1). A primeira observação é que, no formalismo lagrangeano, temos que ter uma energia potencial para podermos ter a força generalizada dada em termos do gradiente desta energia potencial. Só para relembrar, a força generalizada é

$$G_j \equiv \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial q_j},$$

para a componente genérica indexada pelo índice $j \in \{1, 2, 3\}$ no caso de uma só partícula em três dimensões espaciais (e uma temporal). Aqui, como no caso do oscilador harmônico eletromagnético, q_j é uma das coordenadas genralizadas da partícula (não confundamos com a carga q da partícula, que é desprovida de índice).

Logo, se tivermos nablas explícitos na equação acima, como em eletrostática, quando temos que o campo elétrico é o negativo do gradiente do potencial escalar, então teremos uma chance de encontrar um gradiente no membro direito da equação acima. Vamos, assim, usar os potenciais, agora ignorando que estamos usando o calibre de Coulomb. Assim, substituímos na Eq. (1) os campos eletromagnéticos em termos dos potenciais,

$$\mathbf{E} = -\boldsymbol{\nabla}\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

e

$$\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}.$$

Obtemos, então,

$$\frac{d}{dt}(m\mathbf{v}) = q\left(-\boldsymbol{\nabla}\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right) + \frac{q}{c}\mathbf{v} \times (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}).$$

Para uma componente genérica j vem

$$\frac{d}{dt}(mv_j) = q\left(-\frac{\partial \phi}{\partial x_j} - \frac{1}{c}\frac{\partial A_j}{\partial t}\right) + \frac{q}{c}\left[\mathbf{v} \times (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A})\right]_j.$$

O produto vetorial da velocidade pelo rotacional do potencial vetorial, em termos do símbolo de Tullio Levi-Civita, matemático italiano, fica

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{v} \times (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A})\right]_j &= \varepsilon_{jkl} v_k (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A})_l \\ &= \varepsilon_{jkl} v_k \varepsilon_{lmn} \partial_m A_n, \end{aligned}$$

onde estamos usando a convenção de Einstein para somas e a notação compacta

$$\partial_m \equiv \frac{\partial}{\partial x_m},$$

onde, como é usual,

$$\mathbf{r} = x_m \hat{\mathbf{x}}_m.$$

Temos uma propriedade que é muitíssimo útil para os coeficientes de Levi-Civita, isto é,

$$\varepsilon_{jkl}\varepsilon_{lmn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km},$$

que pode ser demonstrada apenas usando argumentos verbais em português, não havendo necessidade de cálculos envolvendo símbolos matemáticos. Assim,

$$\begin{aligned}
[\mathbf{v} \times (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A})]_j &= (\delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km})\, v_k \partial_m A_n \\
&= \delta_{jm}\delta_{kn} v_k \partial_m A_n - \delta_{jn}\delta_{km} v_k \partial_m A_n \\
&= v_k \partial_j A_k - v_k \partial_k A_j \\
&= v_k \partial_j A_k - (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\nabla})\, A_j.
\end{aligned}$$

Portanto,

$$\frac{d}{dt}(m v_j) = q\left(-\frac{\partial \phi}{\partial x_j} - \frac{1}{c}\frac{\partial A_j}{\partial t}\right) + \frac{q}{c}\left[v_k \frac{\partial A_k}{\partial x_j} - (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\nabla})\, A_j\right].$$

Notemos agora que

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}(t)$$

e, portanto,

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x_j} = \mathbf{0},$$

uma vez que as coordenadas espaço-temporais são mutuamente independentes. Logo,

$$\frac{d}{dt}(m v_j) = q\left(-\frac{\partial \phi}{\partial x_j} - \frac{1}{c}\frac{\partial A_j}{\partial t}\right) + \frac{q}{c}\left[\frac{\partial}{\partial x_j}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\nabla})\, A_j\right],$$

que pode ainda ser rearranjada como

$$\frac{d}{dt}(m v_j) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(q\phi - \frac{q}{c}\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}\right) - \frac{q}{c}\left[\frac{\partial A_j}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\nabla})\, A_j\right].$$

Outra coisa muito importante para notarmos aqui é que

$$\begin{aligned}
\frac{dA_j}{dt} &= \frac{d}{dt} A_j(\mathbf{r}, t) \\
&= \frac{d}{dt} A_j(\mathbf{r}(t), t) \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\nabla}\right) A_j \\
&= \left[\frac{\partial A_j}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\nabla})\, A_j\right]
\end{aligned}$$

e, como uma comsequência,

$$\frac{d}{dt}\left(mv_j\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(q\phi - \frac{q}{c}\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}\right) - \frac{q}{c}\frac{dA_j}{dt},$$

ou seja,

$$\frac{d}{dt}\left(mv_j + \frac{q}{c}A_j\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(q\phi - \frac{q}{c}\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}\right),$$

isto é,

$$\frac{d}{dt}\left(mv_j + \frac{q}{c}A_j\right) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(-q\phi + \frac{q}{c}\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}\right) = 0,$$

que, agora sim, fica evidentemente mais parecida com a equação de Euler e Lagrange. Queremos encontrar uma lagrangeanda $\mathscr{L}$ tal que

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial v_j} = mv_j + \frac{q}{c}A_j \tag{2}$$

e tal que

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(-q\phi + \frac{q}{c}\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}\right). \tag{3}$$

Ambos os potenciais escalar e vetorial são independentes da velocidade e, portanto, podemos integrar a Eq. (2) e obter

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + \frac{q}{c}\mathbf{v}\cdot\mathbf{A} + \mathscr{F}\left(\mathbf{r},t\right),$$

onde $\mathscr{F}\left(\mathbf{r},t\right)$ é uma função das coordenadas espaço-temporais ainda a ser determinada. Substituindo este achado na Eq. (3), encontramos

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + \frac{q}{c}\mathbf{v}\cdot\mathbf{A} + \mathscr{F}\left(\mathbf{r},t\right)\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(-q\phi + \frac{q}{c}\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}\right),$$

isto é,

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\mathscr{F}\left(\mathbf{r},t\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(-q\phi\right).$$

Vemos que integrando esta equação obtemos

$$\mathscr{F}\left(\mathbf{r},t\right) = -q\phi + \mathscr{G}\left(t\right),$$

onde, para nossos objetivos, a função de calibre é escolhida como nula, ou seja,

$$\mathscr{G}\left(t\right) \equiv 0.$$

Temos, portanto, a lagrangeana para o movimento da partícula interagindo com o campo eletromagnético dada por

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + \frac{q}{c}\mathbf{v}\cdot\mathbf{A} - q\phi.$$

Os momenta genralizados conjugados às respectivas coordenadas, que aqui tomamos como sendo as coordenadas cartesianas do vetor posição $\mathbf{r}$, são calculados como sendo

$$\begin{aligned} p_j &\equiv \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial v_j} \\ &= m v_j + \frac{q}{c} A_j. \end{aligned}$$

Também, porque vamos usar abaixo,

$$v_j = \frac{p_j}{m} - \frac{q}{mc} A_j.$$

Logo, os momenta generalizados não são iguais às componentes do momentum cinético, $m\mathbf{v}$, e isto é notório.

A hamiltoniana correspondente à nossa lagrangeana é, então,

$$\begin{aligned} \mathscr{H} &= v_j p_j - \mathscr{L} \\ &= \left(\frac{p_j}{m} - \frac{q}{mc} A_j\right) p_j - \frac{1}{2} m \left(\frac{\mathbf{p}}{m} - \frac{q}{mc}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{q}{c}\mathbf{v}\cdot\mathbf{A} + q\phi \\ &= \frac{\mathbf{p}^2}{m} - \frac{q}{mc}\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} - \frac{1}{2} m \left(\frac{\mathbf{p}^2}{m^2} - \frac{2q}{m^2 c}\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + \frac{q^2}{m^2 c^2}\mathbf{A}^2\right) - \frac{q}{c}\left(\frac{\mathbf{p}}{m} - \frac{q}{mc}\mathbf{A}\right)\cdot\mathbf{A} + q\phi \\ &= \frac{\mathbf{p}^2}{m} - \frac{q}{mc}\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{q}{mc}\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} - \frac{q^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 - \frac{q}{mc}\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + \frac{q^2}{mc^2}\mathbf{A}^2 + q\phi \\ &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{q}{mc}\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + \frac{q^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 + q\phi, \end{aligned}$$

isto é,

$$\mathscr{H} = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + q\phi, \tag{4}$$

que é a hamiltoniana para uma partícula carregada em um campo eletromagnético como escrita nos livros-texto. Aqui enfatizamos novamente que $\mathbf{p}$ não é igual ao momentum cinético $m\mathbf{v}$, pois é o momentum canônico generalizado. E, claro, no fim, a energia da partícula será, sem dúvida,

$$E_{part} = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 + q\phi,$$

que não é uma surpresa a ninguém. É através da Eq. (4) que vamos considerar a interação entre a partícula carregada de massa m e carga q com o campo eletromagnético. Salientamos aqui que, ainda, não estamos considerando o caso quântico, mas apenas o caso clássico, já que utilizamos a força de Lorentz e a segunda lei de Newton. É importante explicitar este ponto, pois é muito comum pular etapas e já considerar a Eq. (4) como valendo para o caso quântico também. É como colocar os carros à frente dos bois, como diziam nos bons tempos.

Quantização da hamiltoniana de interação entre a partícula e o campo eletromagnético

Agora, pelo menos em nosso contexto, podemos definir o que vamos entender como radiação neste curso. A partícula pontual que consideramos acima, carregada com carga q e com massa m, relativística ou não, por enquanto, está em uma região e interage com o campo eletromagnético local ali. Quando um carro é empurrado por pessoas, as pessoas exercem força sobre o carro. O carro, por sua vez, exerce uma força sobre as pessoas. Ambas as forças são de mesma intensidade, mas como agem em corpos diferentes, ainda assim é possível empurrar. Isso é elementar. Se uma pessoa estiver em órbita, dentro de uma espaçonave, longe das paredes e não houver resistência do ar e nem como a pessoa alcançar em nenhum dos objetos dentro da nave, ela fica lá, com seu centro de massa parado com relação à nave espacial e morre lá sem nunca poder sair da posição em que está. É que nada é ideal, sempre há resistência do ar e, por exemplo, a pessoa pode inspirar com a cabeça voltada para o fundo da nave e expirar com a cabeça voltada para a frente da nave, o que vai, nesse caso, conduzi-la ao fundo da espaçonave e lá, talvez, ela possa se agarrar em algum objeto. Em suma, uma carga não exerce força sobre si mesma para ser deslocada. Logo, é o campo eletromagnético que não é produzido pela carga que exerce força sobre ela. Esse campo, portanto, é aquele que consideramos antes desta seção, que atravessa uma região vazia do espaço e não há cargas nem correntes presentes para produzi-lo. É exatamente por isso que a partícula da seção anterior interage com a radiação. Há um campo que a própria partícula produz, mas este não é o campo que estamos usando na força de Lorentz para calcular a força sobre a partícula. O campo de radiação é, portanto, aquele que caminha longe de cargas e correntes, embora causado por cargas e correntes distantes no espaço e muito anteriormente no tempo.

Quando quantizamos a teoria da seção anterior, temos que colocar

$$[x_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk},$$

onde p_k é a componente k do momentum canônico conjugado a x_k, não o momentum cinético. Por causa disso, $\mathbf{p}$ não comuta com $\mathbf{r}$ e, consequentemente, não comuta com $\mathbf{A}$, que é uma função das coordenadas espaço-temporais. Mas, temos que elevar o quadrado uma combinação linear de $\mathbf{p}$ e $\mathbf{A}$. Teremos, então, que usar a simetrização da hamiltoniana com relação aos termos cruzados desses operadores. Assim, ao invés de escrevermos para operadores,

$$\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 = \mathbf{p}^2 - 2\frac{q}{c}\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + \frac{q^2}{c^2}\mathbf{A}^2,$$

ou

$$\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 = \mathbf{p}^2 - 2\frac{q}{c}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p} + \frac{q^2}{c^2}\mathbf{A}^2,$$

usamos, ao invés,

$$\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 = \mathbf{p}^2 - \frac{q}{c}\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p} + \frac{q^2}{c^2}\mathbf{A}^2.$$

Se não simetrizarmos, a hamiltoniana, quando usarmos os operadores no lugar das variáveis canônicas, não será hermitiana, a menos, é claro, que $\mathbf{p}$ comute com $\mathbf{A}$.

No entanto, como estamos quantizando campos de radiação provenientes de uma região onde não há nem cargas e correntes e, portanto, esses campos de radiação são aqueles que, anteriormente, calculamos usando licitamente o calibre de Coulomb, aí $\mathbf{p}$ comuta com $\mathbf{A}$. É fácil ver isto usando a representação de funções de onda. Vamos aplicar o produto $\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}$ sobre $\psi(\mathbf{r},t)$ usando $\mathbf{p} \to -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$, que é como representamos o momentum canônico conjugado a $\mathbf{r}$ na representação de posição. Então,

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{r}|\,\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}\,|\psi(t)\rangle &= -i\hbar\boldsymbol{\nabla}\cdot[\mathbf{A}\psi(\mathbf{r},t)] \\ &= -i\hbar(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A})\,\psi(\mathbf{r},t) - i\hbar\mathbf{A}\cdot[\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{r},t)].\end{aligned}$$

Mas, no calibre de Coulomb,

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A} = 0$$

e, portanto,

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{r}|\,\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}\,|\psi(t)\rangle &= \mathbf{A}\cdot[-i\hbar\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{r},t)] \\ &= \langle\mathbf{r}|\,\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}\,|\psi(t)\rangle.\end{aligned}$$

Assim, convenientemente, no calibre de Coulomb, já que a função $\psi(\mathbf{r}, t)$ acima é arbitrária, temos

$$[p_j, A_k] = 0.$$

Logo, nossa hamiltoniana da partícula quantizada, incluindo sua interação com o campo de radiação, é dada por

$$H_{part} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{q}{mc}\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + \frac{q^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2,$$

onde para nossos campos de radiação, no calibre de Coulomb,

$$\phi = 0.$$

Vemos que temos duas hamiltonianas combinando para dar nossa hamiltoniana H_{part}, uma envolvendo somente a energia cinética da partícula,

$$H_{cin} \equiv \frac{\mathbf{p}^2}{2m},$$

e outra de interação,

$$H_{int} = -\frac{q}{mc}\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + \frac{q^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2, \tag{5}$$

já que envolve a carga.

Bibliografia

[1] John R. Reitz, Frederick J. Milford e Robert W. Christy , *Foundations of Electromagnetic Theory*, terceira edição (Addison-Wesley Publishing Company, 1979).

[2]Sakurai, Advanced Quantum Mechanics.