

## Interação da radiação com a matéria

### A hamiltoniana atômica e sua interação com o campo de radiação

A matéria que vamos tratar é, na verdade, a de um átomo hidrogenóide. Para simplificar inicialmente, vamos considerar um átomo de hidrogênio propriamente dito, mas vamos tomá-lo fixo na origem, isto é, com o próton imóvel e escolheremos a origem sobre este próton. Então teremos um campo eletrostático que o elétron vê e este, sim, vai interagir com o campo de radiação. É isto que faremos como primeira aproximação aqui, já que o elétron, tendo muito menor inércia por ser cerca de 1840 vezes mais leve que o próton, responde ao campo de radiação muito mais rapidamente do que o próton. Quando tratarmos a função de Wigner podemos considerar o movimento do átomo como um todo por troca de momentum com o campo de radiação por absorção e emissão de fótons.

Então, para o átomo de hidrogênio, teremos o potencial  $\phi_p$ , que vai dar uma energia de interação adicional ao elétron e, assim, a matéria, que é o átomo, terá uma hamiltoniana livre dada por

$$H_{at} \equiv \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + q\phi_p. \quad (1)$$

Lembremos sempre que

$$\phi_p(\mathbf{r}) \equiv -\frac{e^2}{r},$$

no sistema CGS de unidades, onde  $q = -e$  é a carga do elétron e  $e > 0$  é a carga do próton.

### A hamiltoniana da radiação interagindo com a matéria

Nossa hamiltoniana básica para inspirar todos os modelos deste curso é, portanto, a soma de três outras hamiltonianas: a do átomo, Eq. (1), a do campo de radiação,

$$H_{rad} \equiv \sum_{\lambda,s} \hbar\omega_s \left( a_{\lambda,s}^\dagger a_{\lambda,s} + \frac{1}{2} \right),$$

e a de interação entre o campo de radiação e o átomo (através do acoplamento do elétron com o campo eletromagnético),

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

Portanto, escrevemos

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + q\phi_p + \sum_{\lambda,s} \hbar\omega_s \left( a_{\lambda,s}^\dagger a_{\lambda,s} + \frac{1}{2} \right) - \frac{q}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \frac{q^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2, \quad (2)$$

onde estamos adotando a representação discreta do campo de radiação e, assim, utilizaremos nesta hamiltoniana o campo

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}) &= \sum_{\lambda=1}^2 \sum_s \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_s}} a_{\lambda,s} \hat{\mathbf{e}}_{\lambda,s} \exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}) \\ &+ \sum_{\lambda=1}^2 \sum_s \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_s}} a_{\lambda,s}^\dagger \hat{\mathbf{e}}_{\lambda,s} \exp(-i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}). \end{aligned}$$

## Aproximação de dipolo elétrico

Quando calculamos a interação entre o elétron ligado ao potencial do próton fixo na origem e o campo de radiação, efetivamente calculamos os campos no ponto  $\mathbf{r}$  representando o operador posição do elétron. Aí, todas as quantidades observáveis serão obtidas através de valores esperados de operadores do sistema envolvendo o átomo e os campos em estados do sistema composto do campo eletromagnético e do átomo. Vamos supor, para podermos tornar nossa discussão mais concreta, que a luz que interage com o átomo está no espectro visível ou perto dele. Também, para os estados mais próximos do fundamental do átomo, vamos entender que os orbitais, ou seja, as funções de onda atômicas, terão valores não desprezíveis apenas para distâncias da ordem de um raio de Bohr medidas a partir da origem, isto é, do próton, considerado pontual e fixo na origem (ou a origem escolhida no próton). Com isso, efetivamente, os modos de luz presente na região do átomo serão tais que seu comprimento de onda será próximo da região que nossos olhos evoluíram para detectar, isto é, entre 380 e 700 nm. A série de Balmer do hidrogênio tem algumas linhas nessa região, mas átomos hidrogenóides como o sódio e rubídio têm também linhas visíveis. Se tomarmos, por exemplo, 500 nm como ordem de grandeza, estaremos usando

$$\lambda_s \approx 500 \times 10^{-7} \text{ cm.}$$

Mas isto corresponde a uma frequência, no vácuo, dada por

$$\begin{aligned} \nu_s &= \frac{c}{\lambda_s} \\ &\approx \frac{3 \times 10^{10} \text{ cm/s}}{5 \times 10^{-5} \text{ cm}} \\ &= 6 \times 10^{14} \text{ Hz} \\ &\approx 10^{15} \text{ Hz,} \end{aligned}$$

que é a ordem de grandeza tipicamente mencionada quando nos referimos às frequências na faixa do espectro eletromagnético na região visível. Já o expoente nas expressões dos campos depende tem magnitude  $k_s a_0$ , já que vamos utilizar como ordem de grandeza de distâncias não desprezíveis em orbitais atômicos um raio de Bohr,  $a_0$ . Como

$$k_s = \frac{2\pi}{\lambda_s},$$

segue que estaremos usando

$$\begin{aligned} k_s &\approx \frac{2\pi}{5 \times 10^{-5} \text{ cm}} \\ &\approx 1.26 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}. \end{aligned}$$

Como  $a_0 \approx 0.53 \times 10^{-8} \text{ cm}$ , segue que

$$\begin{aligned} k_s a_0 &\approx 1.26 \times 10^5 \times 0.53 \times 10^{-8} \\ &\approx 0.7 \times 10^{-3} \\ &\approx 10^{-3} \ll 1. \end{aligned}$$

Afinal,

$$\begin{aligned} \exp(ik_s a_0) &\approx 1 + ik_s a_0 \\ &\approx 1 + 0.001i. \end{aligned}$$

Vamos, portanto, usar, em nossas fórmulas para campos, sempre  $\mathbf{A}(\mathbf{0})$ , ao invés de  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ . Logo, na aproximação chamada de aproximação de dipolo elétrico, teremos

$$\mathbf{A}(\mathbf{0}) = \sum_{\lambda=1}^2 \sum_s \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_s}} \hat{\epsilon}_{\lambda,s} (a_{\lambda,s} + a_{\lambda,s}^\dagger). \quad (3)$$

Agora, é claro: por que esta aproximação é chamada de aproximação de dipolo elétrico? Para responder, precisamos mudar de representação.

## A representação de Power & Zienau & Woolley

A mecânica quântica, como viu Wigner, é invariante por mudança de ponto de vista. Uma troca de ponto de vista, na mecânica quântica é vista como uma transformação unitária ou anti-unitária. Recentemente, há outras formas ainda mais gerais, mas neste estágio em que estamos vamos só considerar o que é tradição. Aqui não vamos demonstrar esse teorema de Wigner, que é difícil. Mas é certeza que qualquer curso tradicional de mecânica quântica em nível de pós-graduação vai cobrir essa demonstração. Temos liberdade de usar, por exemplo, a representação de Schrödinger, que é a que temos usado até agora, ou a de Heisenberg, ou ainda a de interação. Tudo o que temos a fazer é considerar o estado quântico transformado por um operador unitário e aí, a partir disso, transformamos todas as equações. Especificamente, aqui, vamos considerar o estado do sistema composto,  $|\Phi(t)\rangle$ , digamos, na representação de Schrödinger, sendo transformado por

$$|\Psi(t)\rangle \equiv U_{PZW}(\mathbf{r}) |\Phi(t)\rangle, \quad (4)$$

onde  $U_{PZW}(\mathbf{r})$  é a transformação unitária de Power & Zienau & Woolley, definida por

$$U_{PZW}(\mathbf{r}) \equiv \exp\left[-i\frac{q}{\hbar c}\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0})\right]. \quad (5)$$

O que precisamos agora é escrever a equação de Schrödinger para o estado  $|\Psi(t)\rangle$ . Se antes de fazer a transformação temos

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Phi(t)\rangle = H |\Phi(t)\rangle, \quad (6)$$

o que fazemos é escrever agora a derivada temporal do ket  $|\Psi(t)\rangle$ , isto é,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle &= i\hbar \frac{d}{dt} [U_{PZW}(\mathbf{r}) |\Phi(t)\rangle] \\ &= U_{PZW}(\mathbf{r}) i\hbar \frac{d}{dt} |\Phi(t)\rangle \\ &= U_{PZW}(\mathbf{r}) H |\Phi(t)\rangle, \end{aligned}$$

onde usamos as Eqs. (4) e (6) e o fato de que  $U_{PZW}(\mathbf{r})$  não depende do tempo, como mostra a Eq. (5). Mas, sendo  $U_{PZW}(\mathbf{r})$  uma transformação unitária, podemos inverter a Eq. (4) e obter

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

onde a hamiltoniana na nova representação é definida como

$$H_{PZW} \equiv U_{PZW}(\mathbf{r}) H U_{PZW}^\dagger(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Para podermos obter esta nova hamiltoniana, vamos ver como cada operador que aparece em  $H$  se transforma. Começemos pelos operadores de aniquilação:

$$\begin{aligned}\tilde{a}_{\lambda,s} &\equiv U_{PZW}(\mathbf{r}) a_{\lambda,s} U_{PZW}^\dagger(\mathbf{r}) \\ &= \exp\left[-i\frac{q}{\hbar c}\mathbf{r}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{0})\right] a_{\lambda,s} \exp\left[i\frac{q}{\hbar c}\mathbf{r}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{0})\right].\end{aligned}$$

É evidente que, de todos os termos que figuram nos argumentos das exponenciais acima apenas os do modo  $(\lambda, s)$  é que vão modificar  $a_{\lambda,s}$ , os demais comutando e, portanto, sendo cancelados. Logo,

$$\tilde{a}_{\lambda,s} = \exp\left[-i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}\left(a_{\lambda,s} + a_{\lambda,s}^\dagger\right)\right] a_{\lambda,s} \exp\left[i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}\left(a_{\lambda,s} + a_{\lambda,s}^\dagger\right)\right],$$

onde, para simplificar a notação, definimos o vetor

$$\mathbf{u}_{\lambda,s} \equiv \frac{q}{\hbar c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_s}} \hat{\mathbf{e}}_{\lambda,s}. \quad (8)$$

Como

$$\begin{aligned}\exp\left[-i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}\left(a_{\lambda,s} + a_{\lambda,s}^\dagger\right)\right] &= \exp\left(-\frac{\left[-i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}a_{\lambda,s}, -i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}a_{\lambda,s}^\dagger\right]}{2}\right) \\ &\quad \times \exp(-i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}a_{\lambda,s}) \exp(-i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}a_{\lambda,s}^\dagger) \\ &= \exp\left[\left(\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}\right)^2 \frac{\left[a_{\lambda,s}, a_{\lambda,s}^\dagger\right]}{2}\right] \\ &\quad \times \exp(-i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}a_{\lambda,s}) \exp(-i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}a_{\lambda,s}^\dagger) \\ &= \exp\left[\frac{\left(\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}\right)^2}{2}\right] \\ &\quad \times \exp(-i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}a_{\lambda,s}) \exp(-i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}a_{\lambda,s}^\dagger)\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\exp\left[i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}\left(a_{\lambda,s} + a_{\lambda,s}^\dagger\right)\right] &= \exp\left(-\frac{\left[i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}a_{\lambda,s}^\dagger, i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}a_{\lambda,s}\right]}{2}\right) \\ &\quad \times \exp\left(i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}a_{\lambda,s}^\dagger\right) \exp\left(i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}a_{\lambda,s}\right) \\ &= \exp\left[\left(\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}\right)^2 \frac{\left[a_{\lambda,s}^\dagger, a_{\lambda,s}\right]}{2}\right] \\ &\quad \times \exp\left(i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}a_{\lambda,s}^\dagger\right) \exp\left(i\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}a_{\lambda,s}\right) \\ &= \exp\left[-\frac{\left(\mathbf{u}_{\lambda,s}\cdot\mathbf{r}\right)^2}{2}\right]\end{aligned}$$

$$\times \exp\left(i\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r}a_{\lambda,s}^\dagger\right) \exp\left(i\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r}a_{\lambda,s}\right)$$

agora precisamos calcular

$$w(\beta) \equiv \exp\left(-i\beta a_{\lambda,s}^\dagger\right) a_{\lambda,s} \exp\left(i\beta a_{\lambda,s}^\dagger\right).$$

Mas é fácil, pois

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\beta} w(\beta) &= i \exp\left(-i\beta a_{\lambda,s}^\dagger\right) \left[ a_{\lambda,s}, a_{\lambda,s}^\dagger \right] \exp\left(i\beta a_{\lambda,s}^\dagger\right) \\ &= i. \end{aligned}$$

Mas, então,

$$\begin{aligned} w(\beta) &= w(0) + i\beta \\ &= a_{\lambda,s} + i\beta. \end{aligned}$$

Logo,

$$\exp\left(-i\beta a_{\lambda,s}^\dagger\right) a_{\lambda,s} \exp\left(i\beta a_{\lambda,s}^\dagger\right) = a_{\lambda,s} + i\beta.$$

Fazendo agora

$$\beta = \mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r},$$

podemos então ver que

$$\tilde{a}_{\lambda,s} = a_{\lambda,s} + i\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r}$$

e, obviamente,

$$\tilde{a}_{\lambda,s}^\dagger = a_{\lambda,s}^\dagger - i\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r}.$$

Com isso, vemos que o operador  $U_{PZW}(\mathbf{r})$  apenas translada os operadores de aniquilação e criação.

O próximo operador crítico que temos que calcular é o  $\mathbf{p}$  transformado, isto é,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{p}} &\equiv U_{PZW}(\mathbf{r}) \mathbf{p} U_{PZW}^\dagger(\mathbf{r}) \\ &= \exp\left[-i\frac{q}{\hbar c} \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0})\right] \mathbf{p} \exp\left[i\frac{q}{\hbar c} \mathbf{r} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0})\right]. \end{aligned}$$

É evidente que o que queremos saber é, por exemplo,

$$\tilde{p}_x = \exp(-i\xi x) p_x \exp(i\xi x),$$

onde estamos temporariamente usando

$$\xi \equiv \frac{q}{\hbar c} A_x(\mathbf{0}).$$

É mais fácil ver a ação desse operador em uma função de onda, digamos,  $\psi(x)$ . Assim,

$$\begin{aligned}
\tilde{p}_x \psi(x) &= \exp(-i\xi x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} [\exp(i\xi x) \psi(x)] \\
&= \exp(-i\xi x) \frac{\hbar}{i} \left[ i\xi \exp(i\xi x) \psi(x) + \exp(i\xi x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right] \\
&= \exp(-i\xi x) \left[ \hbar \xi \exp(i\xi x) \psi(x) + \exp(i\xi x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right] \\
&= \left[ \hbar \xi \psi(x) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right].
\end{aligned}$$

Em outras palavras, é evidente agora que

$$\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{p} + \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{0}).$$

Vemos, portanto, que, novamente, o operador  $U_{PZW}(\mathbf{r})$  acaba transladando o operador  $\mathbf{p}$  também. Esse tipo de operador é chamado um operador de translação por causa disso. Agora é fácil calcularmos a hamiltoniana transformada, pois  $\mathbf{r}$  vai ficar invariante por essa transformação unitária.

## A hamiltoniana de Power & Zienau & Woolley

A partir da Eq. (2), usando o calibre de Coulomb e fazendo a aproximação de dipolo elétrico, podemos escrever também

$$H = \frac{1}{2m} \left[ \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{0}) \right]^2 + q\phi_p(\mathbf{r}) + \sum_{\lambda,s} \hbar\omega_s \left( a_{\lambda,s}^\dagger a_{\lambda,s} + \frac{1}{2} \right).$$

Claramente  $\phi_p(\mathbf{r})$  é invariante pela transformação unitária associada a  $U_{PZW}(\mathbf{r})$ . Entretanto,

$$\begin{aligned}
U_{PZW}(\mathbf{r}) \mathbf{A}(\mathbf{0}) U_{PZW}^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_{\lambda=1}^2 \sum_s \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_s}} \hat{\mathbf{e}}_{\lambda,s} \left( a_{\lambda,s} + i\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r} + a_{\lambda,s}^\dagger - i\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r} \right) \\
&= \mathbf{A}(\mathbf{0}),
\end{aligned}$$

que é bem interessante. Logo,

$$H_{PZW} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + q\phi_p(\mathbf{r}) + \sum_{\lambda,s} \hbar\omega_s \left[ \left( a_{\lambda,s}^\dagger - i\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r} \right) \left( a_{\lambda,s} + i\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r} \right) + \frac{1}{2} \right].$$

Mas,

$$\begin{aligned}
\left( a_{\lambda,s}^\dagger - i\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r} \right) \left( a_{\lambda,s} + i\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r} \right) &= a_{\lambda,s}^\dagger a_{\lambda,s} + i\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r} a_{\lambda,s}^\dagger \\
&\quad - i\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r} a_{\lambda,s} + (\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r})^2 \\
&= a_{\lambda,s}^\dagger a_{\lambda,s} + (\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r})^2 \\
&\quad - i\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r} \left( a_{\lambda,s} - a_{\lambda,s}^\dagger \right).
\end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
H_{PZW} &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + q\phi_p(\mathbf{r}) + \sum_{\lambda,s} \hbar\omega_s (\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r})^2 \\
&+ \sum_{\lambda,s} \hbar\omega_s \left( a_{\lambda,s}^\dagger a_{\lambda,s} + \frac{1}{2} \right) \\
&- i \sum_{\lambda,s} \hbar\omega_s \mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r} \left( a_{\lambda,s} - a_{\lambda,s}^\dagger \right).
\end{aligned}$$

O termo  $\sum_{\lambda,s} \hbar\omega_s (\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r})^2$  só depende do operador posição e, portanto, desloca as posições dos níveis atômicos, contribuindo ao que é conhecido como “Lamb shift” de cada nível eletrônico. Assim, a hamiltoniana só do átomo, nós definimos como

$$H_{at} \equiv \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + q\phi_p(\mathbf{r}) + \sum_{\lambda,s} \hbar\omega_s (\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r})^2, \quad (9)$$

usando a mesma notação que anteriormente, na ausência de Lamb shifts, mas que como não vamos mais voltar àquela representação, não há por que ficar usando uma notação diferente agora. Afinal, todos os pontos de vista que diferem entre si apenas por transformações unitárias são equivalentes fisicamente.

A hamiltoniana do campo de radiação, fica como antes,

$$H_{rad} \equiv \sum_{\lambda,s} \hbar\omega_s \left( a_{\lambda,s}^\dagger a_{\lambda,s} + \frac{1}{2} \right).$$

Resta sabermos como vamos entender a nova hamiltoniana de interação,

$$\begin{aligned}
H_{int} &\equiv -i \sum_{\lambda,s} \hbar\omega_s \mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r} \left( a_{\lambda,s} - a_{\lambda,s}^\dagger \right) \\
&= -iq \sum_{\lambda,s} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_s}{V}} \hat{\mathbf{e}}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r} \left( a_{\lambda,s} - a_{\lambda,s}^\dagger \right),
\end{aligned}$$

onde já substituímos a Eq. (8). Mas se olharmos para nosso campo elétrico quantizado na versão discreta, temos

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \sum_{\lambda=1}^2 \sum_s i \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_s}{V}} a_{\lambda,s} \hat{\mathbf{e}}_{\lambda,s} \exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}) \\
&- \sum_{\lambda=1}^2 \sum_s i \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_s}{V}} a_{\lambda,s}^\dagger \hat{\mathbf{e}}_{\lambda,s} \exp(-i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r})
\end{aligned}$$

e, assim,

$$\mathbf{E}(\mathbf{0}) = \sum_{\lambda=1}^2 \sum_s i \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_s}{V}} \hat{\mathbf{e}}_{\lambda,s} \left( a_{\lambda,s} - a_{\lambda,s}^\dagger \right).$$

Logo, nossa nova hamiltoniana de interação pode ser escrita em termos deste operador campo elétrico como

$$\begin{aligned} H_{int} &= -q\mathbf{r} \cdot \left[ \sum_{\lambda,s} i\sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_s}{V}} \hat{\epsilon}_{\lambda,s} (a_{\lambda,s} - a_{\lambda,s}^\dagger) \right] \\ &= -q\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{0}). \end{aligned}$$

Como o operador dipolo elétrico de nosso átomo é escrito como

$$\mathbf{d} \equiv q\mathbf{r},$$

a hamiltoniana de interação agora fica

$$H_{int} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{0}).$$

Esta interação é exatamente aquela entre um dipolo em uma região onde há presente um campo elétrico externo. Por isso a aproximação que fizemos acima é chamada de aproximação de dipolo elétrico, já que, caso não tivéssemos usado

$$\exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}) \approx 1$$

nas expressões dos campos, não teria sido possível fazer esta transformação unitária para obter a interação  $H_{int} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{0})$ . que acabamos de escrever.

## Átomo de dois níveis (e estados) de energia

Neste curso não estaremos lidando com as entranhas atômicas, pois não é um curso de física atômica. Para nossos objetivos, vamos supor que já temos todos os auto-estados de energia calculados para a hamiltoniana atômica, Eq. (9). Logo, vamos escrevê-la como

$$H_{at} = \sum_n E_n |n\rangle \langle n|,$$

onde a soma vai ser infinita e simboliza a parte discreta como também a parte contínua do espectro atômico. (É! Na eventual chance ímpar de que ninguém tenha mencionado isso antes a você, um átomo tem também um espectro contínuo, quando o elétron está dissociado do núcleo.)

## 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*.