Transições radiativas

Carlos Alexandre Wuensche

Processos Radiativos II

Sugestões para leitura

- Radiative processes in Astrophysics (G. Ribicki e A. Lightman), cap. 10
- Astrophysics of gaseous nebulae and active galactic nuclei (D. Osterbrock), cap. 2
- The diffuse Universe (Dopita e Sutherland), cap. 2

Teoria semi-clássica das transições radiativas

- Átomos ⇒ mecânica quântica
- Radiação ⇒ teoria eletromagnética
- Justificativa: no limite clássico (muitos fótons), processos de transição induzida dominam os processos de transição espontânea

3

Hamiltoniana para o campo EM

- No limite relativístico, temos

$$H = [(c.\vec{p} - e.\vec{A})^2 + m^2 c^4]^{1/2} + e\phi$$

- Expandindo o lado direito para o caso não-relativístico obtemos (desprezando a massa de repouso)

- $$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}(\vec{p} - e.\vec{A}/c)^2 + e\phi \\ &= \frac{p^2}{2m} - \frac{e}{mc}\vec{A}.\vec{p} + \frac{e^2 A^2}{2mc^2} + e\phi \end{aligned}$$

A probabilidade de transição

- Consideramos a Hamiltoniana da eq. anterior composta de duas partes (dependente e independente do tempo):
- $$H = H^0 + H^1$$
- em que H^0 é a parte atômica, independente do tempo, e H^1 é uma perturbação devida ao campo EM ϕ externo.
- A solução típica da parte dependente do tempo é conhecida:

$$\Psi(t) = \sum_k a_k(t) \phi_k exp(-iE_k t/\hbar)$$

A aproximação de dipolo

- A exponencial dentro da expressao para a probabilidade de transição pode ser expandida em série, devido ao baixo valor de **k.r** ($\sim ka_0 \sim a_0 \Delta E/\hbar c \sim Z\alpha/2 \ll 1$)
- O primeiro termo da expansão (exp(i**k.r**) = 1) é o termo de dipolo da expansão.
- Os termos seguintes correspondem ao quadrupolo, octupolo, etc., e devem ser investigados quando o resultado dessa aproximção = 0 para certas transições.

A aproximação de dipolo

- A exponencial dentro da expr[illegible]ara a probabilidade de transição [illegible]er expandida em série, devido ao baix[illegible] de **k.r** (~ ka_0 ~ $a_0\,\Delta E/\hbar c$ ~ $Z\alpha/2 \ll 1$).
- O primeiro term[illegible]ansão (exp(i**k.r**) = 1) é o termo de dipol[illegible]pansão.
- Os termos [illegible]es correspondem ao quadrup[illegible]upolo, etc., e devem ser inves[illegible] quando o resultado dessa aproxim[illegible]ao = 0 para certas transições.

É equivalente a $v/c \ll 1$, pois $v/c \sim Z\alpha$

6

Intensidade de oscilador

- Deduzidos a partir dos coeficientes de Einstein
- Fator de correção para o oscilador clássico
- Níveis degenerados: média sobre o estado inicial e soma das energias dos estados finais
- Definimos duas expressões para a intensidade de oscilador, em termos do coeficiente de Einstein B: absorção (f_{lu}) e emissão (f_{ul}), sendo u=upper e l=lower

$$
\begin{aligned}
g_l B_{lu} &= g_u B_{ul} \quad \text{e} \, \nu_{lu} = -\nu_{ul} \\
g_l f_{lu} &= -g_u B_{ul}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
B_{lu} &= \frac{4\pi^2 e^2}{h\nu_{ul} m c} f_{lu} \\
f_{lu} &= \frac{2m}{2\hbar^2 g_l e^2} (E_u - E_l) \sum |d_{lu}|^2
\end{aligned}
$$

7

Intensidade de oscilador

- A intensidade de oscilador corrige a expressão para emissão de um oscilador clássico em termos da energia total extraída de um feixe de radiação
- A modificação para o caso de uma transição ligado-livre inclui a probabilidade de um "estado" livre com energia entre ε e $\varepsilon+d\varepsilon$.
- Frequencia do fóton emitido deve somar a energia ε + potencial de ionização χ.

Regras de seleção

- Aproximação para quando certas probabilidades de transição $\Rightarrow$ 0 num determinado esquema de classificação (p.ex., L-S)
- Essas aproximações são necessárias devido a que, na aproximação de dipolo, certas transições são estritamente proibidas, mas não o são para multipolos superiores

$$d_{fi} \equiv e \int \phi_f^* \sum_j r_j \phi_i d^3x$$

Se $\sum_j r_j \rightarrow -\sum_j r_j,$ com $\phi_f^* \phi_i$ sem alteração **$d_{fi} = 0$**

Regras de seleção

- Regra de Laporte: NÃO HÁ TRANSIÇÃO entre estados de mesma paridade
- Regra do salto de 1 e^-: para transição entre configurações diferentes supomos todos, menos um, orbitais iguais. Essa regra não vale para estados que são combinações de várias configurações, mas é obedecida pelo acoplamento L-S

$$\left.\begin{aligned} \Delta l &= \pm 1 \\ \Delta m &= 0, \pm 1 \end{aligned}\right\} \quad \text{para 1 } e^-$$

$$\left.\begin{aligned} \Delta S &= 0 && \textbf{não envolve spin} \\ \Delta L &= 0, \pm 1 && \\ \Delta J &= 0, \pm 1 && \textbf{exceto J=0 para J=0} \end{aligned}\right\} \quad \begin{array}{l}\text{para vários } e^-\text{, no} \\ \text{acoplamento L-S}\end{array}$$

Taxas de transição

- Uma visão geral pode ser obtida a partir do caso simples da transição Coulombiana.
  - Ligado-ligado: $h\nu = Ry(1/n^2 - 1/n'^2)$
  - Contínuo: $h\nu = Ry/n^2 + mv^2/2$
-