

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

Murilo Machado Costa

DINÂMICA NÃO-LINEAR EM SISTEMAS DE DOIS NÍVEIS

Florianópolis (SC)

2015

Murilo Machado Costa

DINÂMICA NÃO-LINEAR EM SISTEMAS DE DOIS NÍVEIS

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física para a obtenção do Grau de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Kahio Tiberio Mazon

Universidade Federal de Santa Catarina

Coorientador: Prof. Dr. Luis Guilherme de Carvalho Rego

Universidade Federal de Santa Catarina

Florianópolis (SC)

2015

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

A ficha de identificação é elaborada pelo próprio autor

Maiores informações em:

<http://portalbu.ufsc.br/ficha>

Murilo Machado Costa

DINÂMICA NÃO-LINEAR EM SISTEMAS DE DOIS NÍVEIS

Esta Dissertação foi julgada aprovada para a obtenção do Título de “Mestre em Física”, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Física.

Florianópolis (SC), 27 de agosto 2015.

Prof. Dr. Luis Guilherme de Carvalho Rego
Universidade Federal de Santa Catarina
Coordenador

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Wagner Tenfen - Membro Externo
Universidade Federal da Fronteira Sul

Prof. Dr. Kahio Tiberio Mazon
Universidade Federal de Santa Catarina
Orientador

Prof. Dr. Eduardo Inacio Duzzioni
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof. Dr. Frederico Firmo de Souza Cruz
Universidade Federal de Santa Catarina

À minha família.

A mente que se abre a uma nova idéia jamais
voltará ao seu tamanho original.

Albert Einstein

RESUMO

Este trabalho tem por objetivo estudar a interação entre radiação e matéria na presença de uma perturbação não linear em sistemas de dois níveis. Utilizamos uma abordagem semi-clássica para descrever um sistema de dois níveis sujeito à influência de um campo eletromagnético externo. Neste sistema inserimos um termo dependente da população local, o que acarreta não linearidade nas equações de movimento. Foi utilizado o formalismo de matriz densidade, e a dinâmica foi obtida a partir da equação de Liouville-von-Neumann. Esse formalismo nos permite obter um conjunto de equações diferenciais acopladas com termos não lineares devido a presença da perturbação local de carga $\lambda\rho$, onde λ é o parâmetro que nos fornece a intensidade dessa perturbação e ρ é a própria densidade de carga. A resolução da equação de Liouville-von-Neumann gera um conjunto de 3 equações diferenciais acopladas que resolvemos em uma primeira aproximação para frequência do campo eletromagnético externo $\omega = 0$. Esse primeiro conjunto de soluções pode ser utilizado como base para a solução completa do problema uma vez que os termos dependentes do tempo no hamiltoniano podem ser eliminados via uma transformação unitária. A presença de não-linearidades no sistema gera um regime de autoconfinamento das populações para algumas configurações dos valores dos parâmetros e podem suprimir as oscilações de Rabi. Além disso estudamos também o comportamento desse mesmo sistema quando sujeito a termos dissipativos. A influência da dissipação no tempo de decoerência do sistema foi analisada, assim os diagramas de configuração que mostram um possível surgimento de dinâmicas caóticas.

Palavras-chave: Hamiltoniano de Rabi, não-linearidade, sistema de dois níveis, autoconfinamento, matriz densidade.

ABSTRACT

This work aims to study the interaction between radiation and matter in the presence of a non-linear disturbance in the two-level system. We use a semi-classical approach to describe a system of two levels driven by an external electromagnetic field. In this system we insert a term dependent on the local population, resulting nonlinearity in the equation movement. The density matrix formalism was used, and the dynamics was obtained from the Liouville-von-Neumann equation. This formalism allows us to get a set of coupled non-linear differential equations due to presence of local charge density $\lambda\rho$, where λ is the parameter that gives us the intensity of this disturbance and ρ is the very charge density. The resolution of the Liouville-von Neumann equation generates a set of 3 coupled differential equations. We decided on a first approach to frequency off the external electromagnetic field $\omega = 0$. That first set of solutions can be used as a basis for complete solution problem, since the time-dependence can be eliminated via a unitary transformation. The presence of nonlinearities in the system generates a self-trapping regime of populations for some configurations parameter values, and can suppress the Rabi oscillations. We also studied the behavior of the system when subjected to terms dissipative. The influence of dissipation in the decoherence time of the system was analysed, and the configuration diagrams showing a possible emergence of chaotic dynamics.

Keywords: Rabi Hamiltonian, nonlinearity, two-level system, self-trapping, density matrix.

LISTA DE FIGURAS

| | |
|---|---|
| <p>Figura 1 Dinâmica de separação de cargas em tríades macromoleculares [4].</p> <p>Figura 2 <i>Esboço de um sistema quântico misto composto por cinco sub-sistemas quânticos puros, interagindo com o meio e mutuamente. O estado do sistema todos é $\Psi\rangle = k_1 \psi^{(1)}\rangle + k_2 \psi^{(2)}\rangle + k_3 \psi^{(3)}\rangle + k_4 \psi^{(4)}\rangle$.</i></p> <p>Figura 3 Diagrama de fases. Cada curva representa um valor do parâmetro λ de modo que podemos avaliar o valor crítico de não-linearidade para o qual ocorre auto-confinamento. No caso em questão podemos observar que a curva azul corresponde a um confinamento.</p> <p>Figura 4 Na figura 4.2 (a) observamos a dinâmica de população para $\lambda = -1.00$, o que corresponde a um valor pequeno de não-linearidade, possibilitando as oscilações. Na figura 4.2 (b) temos a dinâmica das partes real e imaginária das coerências referente a mesma configuração de parâmetros do gráfico 4.2 (a). A curva verde centrada em zero corresponde a constante de movimento encontrada na equação 4.36.</p> <p>Figura 5 Na figura 4.3 (a) aumentamos o termo λ para $\lambda = -1.90$, e percebemos que o aumento do parâmetro não-linear induz uma deformação na formato senoidal da função que descreve as oscilações de população. O gráfico 4.3 (b) apresenta a dinâmica das coerências assim como o termo em verde que corrensponde à $\det\rho = 0$.</p> <p>Figura 6 Na figura 4.4 (a) observamos a dinâmica de ρ_1 para um caso crítico, no qual o parâmetro não linear assume um valor em que ele confina a população em 0.5. Comparando as escalas de tempo com os gráficos anteriores percebemos que em $\lambda = 1.99$ a dinâmica do sistema não permite a transição confinando a dinâmica. O gráfico subsequente apresentado na fig. 4.4 (b) apresenta o caráter crítico dessa dinâmica através das linhas mais agudas.</p> <p>Figura 7 Diagrama de fase para estados não degenerados, $\Omega_0 = 1.00$</p> <p>Figura 8 Conforme aumentamos o valor de λ as oscilações de Rabi são suprimidas, na fig 4.6 (a) a inversão de população não se completa e a dinâmica da população atinge o valor máximo de 0,2 não atingindo o outro estado. Na figura 4.6 (b) vemos que quando o estado é não degenerado vínculo $\det\rho$ permanece constante(linha verde) porém diferente de zero, as linhas preta e vermelha correspondem as dinâmicas das partes real e imaginária da coerência.</p> <p>Figura 9 levamos a não linearidade à um valor maior que as anteriores</p> | <p>21</p> <p>25</p> <p>51</p> <p>52</p> <p>52</p> <p>53</p> <p>54</p> <p>55</p> |
|---|---|

onde podemos observar que agora as oscilações ficam limitadas ao valor 0,5 que pode ser observado na fig 4.7 (a), a fig 4.7(b) apresenta a dinâmica da coerência assim como do $det\rho$, conforme o estado é não-degenerado não podemos garantir que o estado inicial é puro, como podemos observar a linha vermelha não inicia em 0. 55

Figura 10 Acima dos valores de $\lambda = 2$ não temos mais dinâmica do sistema para essa configuração de parâmetros. Portanto na fig 4.8 (b) vemos que inicialmente a dinâmica força o sistema a transitar para o outro estado confinando o mesmo por um tempo infinito. Na fig 4.8 (a) observamos a dinâmica das coerências que apresentam picos nos valores onde ocorre as transições e se mantem constante no decorrer da dinâmica. 56

Figura 11 Para $\omega \neq 0$ também obtemos os regimes de auto-confinamento, na fig 4.9 (a) vemos um comportamento regular das populações que ficam aprisionadas em 0,5 por algum tempo. A dinâmica da coerência entretanto apresenta variações de amplitude no limite de t grande. 63

Figura 12 Dinâmica das coerências para o caso não degenerado, ressonante, na figura 4.10 (a) e o mesmo comportamento das partes real e imaginario da coerência para valores maiores de tempo na fig 4.10 (b) .. 64

Figura 13 Em vermelho temos o diagrama de fase na fig 4.11 (g), as curvas pretas fechadas e harmonicas, na mesma figura, representam o diagrama de argant, ou seja, analise da parte real e imaginaria das coerências. Podemos ver que o sistema não apresenta comportamento caotico desse grafico, uma vez que as curvas são bem harmônicas. 64

Figura 14 Esquema da descrição do problema de Landau-Zener. Dois estados quânticos e o acoplamento entre eles depende parametricamente da variável clássica R . As energias obtidas pela diagonalização do hamiltoniano (*adiabáticas*) para qualquer ponto R são, $E_1(R)$ e $E_2(R)$ (*vermelho*), e as energias (*não adiabáticas*) do hamiltoniano estacionário $E_a(R)$, $E_b(R)$ (*preto*). 66

Figura 15 Evolução temporal dos autovalores 1 69

Figura 16 sistema de dois níveis retirado de [43] 72

Figura 17 Dinâmica das coerências, na presença de termos dissipativos, para estados quase-degenerados, onde há a variação do termo de acoplamento entre o campo e o sistema. 74

Figura 18 Podemos observar o efeito do termo dissipativo nas figuras 5.3 (a) e 5.3 (b), vemos que as oscilações ocorrem no início da dinâmica e são suprimidas, entretanto o sistema tende ao valor de máxima entropia (curvas verde) ao final da dinâmica devido ao termo de dephasing, ao passo que as coerências tendem a zero (curvas preta e vermelha). 74

| | |
|--|----|
| Figura 19 Um caso peculiar pode ser observado na figura 5.4 (a). A dinâmica da coerência acontece de modo a executar dois regimes dinâmicos distintos. Inicialmente, parte de zero, e executa as oscilações perdendo amplitude através das espirais observadas no grafico. Em seguida temos o sistema se comporta percorrendo uma oscilação longa até tender a zero. Na figura 5.4 (b) representa o grafico para o diagrama de fases. | 75 |
| Figura 20 Nesse gráfico apresentamos uma forte presença de não-linearidade o que podemos observar na fig 5.5 (a) que não apresenta oscilações, devido ao valor de λ e decai ligeiramente ao valor de máxima mistura devido ao termo de dissipação. O grafico 5.5 (b) corresponde a dinâmica da fig 5.4 (a) onde a primeira parcela da dinâmica esta relacionada as oscilações com perda de amplitude sendo seguida das oscilações mais longas no tempo. | 76 |
| Figura 21 Diagrama de Argant para caso em que o sistema percorre dois regimes dinâmicos distintos. | 77 |
| Figura 22 Dinâmica de população para diferentes valores de λ , a curva roxa corresponde a $\lambda = 0$ e podemos observar as oscilações de rabi que são amortecidas pelo termo de dissipação, conforme aumentamos os valores de não-linearidade as oscilações são suprimidas e tendem ao valor de máxima mistura. As curvas preta e vermelha correspondem às partes real e imaginária da coerência para $\lambda = 0$ | 78 |
| Figura 23 dinâmica de população e mistura sob forte dissipação | 79 |
| Figura 24 Possibilidade de Caos | 82 |

SUMÁRIO

| | |
|--|----|
| 1 INTRODUÇÃO | 21 |
| 2 MECÂNICA QUÂNTICA E FORMALISMO DE MATRIZ DENSIDADE | 25 |
| 2.1 MATRIZ DENSIDADE | 25 |
| 2.2 PROPRIEDADES DO OPERADOR DENSIDADE | 27 |
| 2.3 EQUAÇÃO DE MOVIMENTO DO OPERADOR DENSIDADE .. | 29 |
| 3 INTERAÇÃO ENTRE RADIAÇÃO-MATÉRIA E ABORDAGEM SEMI-CLÁSSICA | 31 |
| 3.1 QUANTIZAÇÃO DO HAMILTONIANO DO ELÉTRON | 32 |
| 3.2 CAMPO CLÁSSICO | 35 |
| 4 DINÂMICA NÃO-LINEAR DO SISTEMA DE DOIS NÍVEIS .. | 39 |
| 4.1 RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE LIOUVILLE-VON-NEUMANN | 40 |
| 4.2 SOLUÇÕES PARA PERTURBAÇÃO CONSTANTE | 43 |
| 4.3 SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES NO REGIME DE $\omega = 0$ | 46 |
| 4.4 DIAGRAMAS DE FASE E COMPORTAMENTO DINÂMICO DE Z | 49 |
| 4.5 ANÁLISE DO REGIME EM $\Delta E = 1.00$ | 52 |
| 4.6 RESOLUÇÃO COMPLETA DA DINÂMICA DO SISTEMA | 56 |
| 4.7 DIAGRAMA DE FASE E COMPORTAMENTO DINÂMICO DE Z PA-RA $\omega \neq 0$ | 63 |
| 4.8 ANÁLISE DA EVOLUÇÃO TEMPORAL DOS AUTOVALORES | 64 |
| 5 DISSIPACÃO | 71 |
| 5.1 MODELO | 71 |
| 5.2 ESTADO QUASE DEGENERADO | 73 |
| 6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS | 81 |
| APÊNDICE A – Hamiltoniano de acoplamento mínimo | 85 |
| Referências Bibliográficas | 95 |

1 INTRODUÇÃO

O estudo teórico de transporte de cargas em sistemas supra-moleculares garante um maior entendimento sobre tais fenômenos, o que permite melhorar a eficiência de dispositivos tais como células solares e sistemas fotovoltaicos em geral[3]. Em particular, na transferência de portadores e dinâmica de separação de carga em tríades moleculares $C - P - C_{60}$, foi observado que a presença de um potencial induzido, dependente da população de carga local da molécula, contribuía fundamentalmente para o processo de separação de carga e a dinâmica do exciton[4].

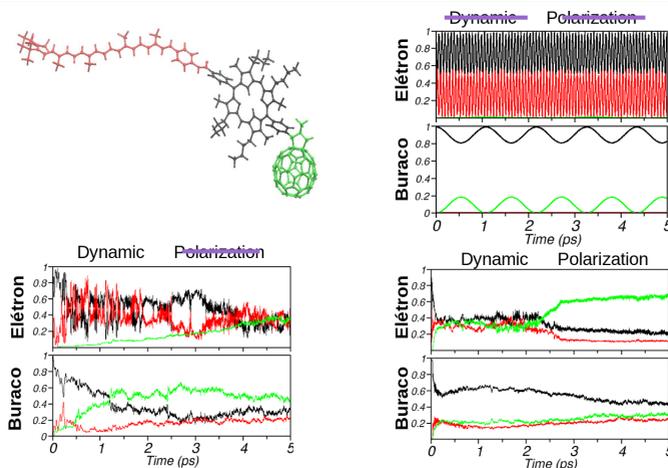


Figura 1: Dinâmica de separação de cargas em tríades macromoleculares [4].

A dinâmica de transferência de carga nesse sistema macromolecular foi descrita pelo hamiltoniano de Huckel[5] modificado através de um termo não linear que confere ao sistema um regime de autoconfinamento para o pacote de ondas do elétron quando a contribuição desse termo ultrapassa um determinado valor crítico. A origem da não linearidade vem da presença de um potencial de polarização intramolecular induzida. Devido a presença desse potencial, após 2 pico segundos aproximadamente a energia de polarização favorece um desvio na energia dos autoestados do hamiltoniano, o que, por fim, acarreta o auto-confinamento do elétron gerando um estado de carga separada.

A análise da dinâmica de separação de cargas em sistemas moleculares

foi a motivação primária para o presente trabalho, entretanto, a física não linear é muito mais ampla que apenas o exemplo que demos no parágrafo prévio. No contexto de matéria condensada temos por exemplo a presença desse fenômeno no estudo de transporte em moléculas[6, 7, 8, 9].

Assim como em sistemas moleculares encontramos motivação para o estudo de não linearidades na física, em um conjunto de átomos aprisionados em armadilhas ópticas e resfriados a uma temperatura abaixo de uma temperatura crítica T_c formam os conhecidos condensados de Bose-Einstein previstos em 1924 e verificados experimentalmente apenas em 1995[10, 11] por um grupo do MIT. A razão dessa lacuna de tempo entre previsão teórica e realização prática é devido ao desenvolvimento do método de resfriamento, mas a questão é que esses condensados de Bose-Einstein são descritos pela equação de Gross-Pitaevskii, equação não linear derivada independentemente por Pitaevskii (1961) e Gross (1961) e ainda se mantém como principal ferramenta teórica para descrever sistemas de bósons diluídos em baixas temperaturas[12].

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r,t) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(r) + g|\Psi(r,t)|^2 \right) \psi(r,t). \quad (1.1)$$

Como dito, a equação 1.1 (GP) é conhecida por descrever bem condensados bosônicos (BEC) armadilhados à baixas temperaturas [13, 14, 15], no entanto, ela obtém sucesso na descrição de outros fenômenos físicos tais como a luz se propagando em meios não lineares[16], dinâmica de pólarons e localização de energia vibracional em moléculas. Notemos que o parâmetro $g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ incorpora todas as contribuições de muitos corpos no sistema de n átomos, onde m é a massa e a é o parâmetro de espalhamento. A equação GP é um tipo de equação de Schrödinger não linear. Entretanto, uma forma mais geral de equações não lineares pode ser escrita da seguinte forma:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(r) + f|\Psi(r,t)|^2 \right) \Psi(r,t) = 0. \quad (1.2)$$

A NLSE(Non Linear Schroedinger Equation) corresponde a equação GP na medida em que o termo $f|\Psi(r,t)|^2$ recai em $g|\Psi(r,t)|^2$ em que $g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$. Estes termos não lineares produzem uma gama de resultados que diferem bastante do regime linear[15] e nos capacita estudar outros regimes em sistemas quânticos; a Eq. 1.2 também é base para a definição da equação de autoconfinamento discreta proposta inicialmente por Eilbeck (1982)[17].

$$\frac{i\hbar dSC}{dt} = H_0 C + \eta F(|C|^2)C. \quad (1.3)$$

Esta equação foi utilizada para descrever a localização de energia vibracional em proteínas, e posteriormente utilizada amplamente para estudar sólitons[18]. Recentemente foi possível demonstrar que, em sistemas supramoleculares, o potencial de polarização induzida devido a presença de cargas localizadas gera um termo que pode ser interpretado como $\eta F(|C|^2)C$ na equação 1.3 [4]. Ou seja, no referido trabalho tornou-se evidente que as interações de muitos corpos em sistemas complexos podem ser reduzidas a termos não lineares na equação de Schroedinger. Aqui se encontra a principal motivação teórica para o presente trabalho. Ou seja, estudar os diversos aspectos da dinâmica de populações a partir da equação de auto-confinamento discreta, com o objetivo de melhorar nossa intuição a respeito do funcionamento desse tipo de sistema.

Nesta dissertação vamos trabalhar com um sistema de dois níveis sujeito à perturbação externa de um campo eletromagnético, contendo nos termos diagonais do hamiltoniano uma contribuição de termos não lineares. Matricialmente podemos escrevê-lo da seguinte forma:

$$H = \begin{pmatrix} E_1 + \lambda_1 \rho_{11} & \gamma e^{i\omega t} \\ \gamma e^{-i\omega t} & E_2 + \lambda_2 \rho_{22} \end{pmatrix}. \quad (1.4)$$

Vamos procurar a dinâmica através do formalismo de matriz densidade. Os termos diagonais de H , que correspondem as auto-energias de um sistema de dois níveis isolado, são modificados pelo termo $\lambda \rho$, onde λ é o parâmetro que fornece a intensidade da não linearidade e ρ é a própria densidade local de carga. A justificativa para a construção de um hamiltoniano com essa característica, como já discutido, pode ser visto nas referências[17, 4]. Uma característica própria de sistemas descritos por hamiltonianos desse tipo é a observação de regimes de auto-confinamento resultantes de quebras de simetria, o que significa que existe a possibilidade de, mesmo sob a ação de um campo externo, o pacote de onda do sistema permanecer confinado em um determinado estado.

Os termos não diagonais são as coerências responsáveis por efetuar a transição entre os estados, podem ser representados tanto por perturbações constantes quanto por termos de campo oscilante. O nosso interesse é observar como um sistema quântico responde a um campo externo na presença de não linearidades. Numa primeira análise estudaremos o sistema sem a presença de dissipação, de modo a verificar as oscilações de Rabi, que são exemplos fundamentais de interação coerente entre luz e matéria. Essas oscilações consistem na transição de populações entre o estado fundamental e o excitado, no caso de um sistema de dois níveis, com uma frequência de oscilação bem determinada devido a presença do campo externo. Tal tipo de fenômeno vem sendo amplamente estudado em sistemas atômicos[19],

óptica quântica[20], em semicondutores e quantum dots[21], grafeno[22], em condensados de Bose-Einstein[23], e também em sistemas híbridos, como dispositivos supercondutores de interferência quântica [24]. Por fim, iremos introduzir termos dissipativos de modo a conferir maior realidade física ao modelo.

Esta dissertação está dividida da seguinte maneira: dando sequência a esta introdução, que objetiva motivar e dar razão ao estudo em questão, segue o capítulo 2 responsável por apresentar o formalismo de matriz densidade e as propriedades que serão relevantes na discussão subsequente e análise dos resultados. Esse capítulo constitui-se de uma breve revisão e visa fornecer a perspectiva do contexto quantum-mecânico do sistema sob a ótica do formalismo de matriz densidade.

O terceiro capítulo discorre sobre a maneira de descrição da interação entre radiação e matéria, no caso o nosso sistema de dois níveis, evidenciando as diferentes possibilidades de descrição e as aproximações possíveis nesse tipo de interação, entre elas aquelas que levam à forma utilizada neste trabalho.

O quarto capítulo consiste no cerne do trabalho, ou seja, a resolução do sistema de equações gerados pela equação de Liouville-von-Neumann (LVN), as aproximações utilizadas e os resultados obtidos. Faremos uma discussão a respeito das condições iniciais de sistemas quânticos não lineares foto-excitados, seus diagramas de fase e de configuração, além de aspectos gerais da dinâmica dos pacotes de onda.

No quinto capítulo que irá tratar da inclusão de dissipação neste estudo teórico, procuramos inserir um banho ao sistema de dois níveis modelado como uma série de osciladores acoplados de forma a possibilitar taxas de decaimento ao reservatório e perceber quais as relações entre a não linearidade e a presença de dissipação.

Por fim será apresentado uma conclusão e análise mais detalhado daquilo que foi delineado durante todo o corpo teórico da dissertação bem como as perspectivas que se abrem a partir deste trabalho.

2 MECÂNICA QUÂNTICA E FORMALISMO DE MATRIZ DENSIDADE

O objetivo deste capítulo é fazer uma rápida revisão sobre o formalismo de matriz densidade e no que segue nos baseamos no tratamento dado segundo Blum em [25] e Louisell em [26].

2.1 MATRIZ DENSIDADE

Um *ensemble* é um sistema físico constituído por $\alpha = 1, 2, 3, \dots, N$ subsistemas quânticos puros representados pelos auto-estados $|\psi^{(\alpha)}\rangle$. Expressando cada sistema quântico puro através de uma combinação linear de vetores $\{|\varphi_n\rangle\}$ que compõem uma base completa e ortonormal, que satisfaz as relações

$$\langle \varphi_{n'} | \varphi_n \rangle = \delta_{n'n}, \quad \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = I, \quad (2.1)$$

cada auto-estado pertencente ao subsistema α é expresso por (Fig.: 2.1)

$$|\psi^{(\alpha)}\rangle = \sum_n c_n^{(\alpha)} |\varphi_n\rangle, \quad c_n^{(\alpha)} = \langle \varphi_n | \psi^{(\alpha)} \rangle, \quad (2.2)$$

desde que o estado do subsistema α seja normalizado, $\sum_n |c_n^{(\alpha)}|^2 = 1$.

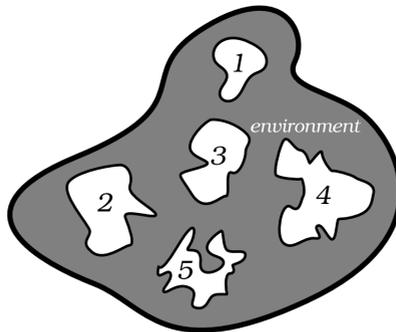


Figura 2: Esboço de um sistema quântico misto composto por cinco subsistemas quânticos puros, interagindo com o meio e mutuamente. O estado do sistema todos é $|\Psi\rangle = k_1 |\psi^{(1)}\rangle + k_2 |\psi^{(2)}\rangle + k_3 |\psi^{(3)}\rangle + k_4 |\psi^{(4)}\rangle$.

Considera-se um observável representado pelo operador \hat{A} , o seu valor esperado no sistema quântico puro α está dado por,

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle_\alpha &= \langle \psi^{(\alpha)} | \hat{A} | \psi^{(\alpha)} \rangle = \sum_{n',n} c_{n'}^{(\alpha)*} c_n^{(\alpha)} \langle \varphi_{n'} | \hat{A} | \varphi_n \rangle, \\ &= \sum_{n',n} \langle \varphi_n | \psi^{(\alpha)} \rangle \langle \psi^{(\alpha)} | \varphi_{n'} \rangle \langle \varphi_{n'} | \hat{A} | \varphi_n \rangle.\end{aligned}\quad (2.3)$$

O valor esperado do operador no sistema todo será a média estatística sobre cada um dos subsistemas que compõem o ensemble,

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha \langle \hat{A} \rangle_\alpha. \quad (2.4)$$

Onde W_α é um número real no intervalo $[0, 1]$ correspondente ao peso estatístico (*probabilidade*) pertencente ao operador em determinado subsistema puro, satisfazendo a norma da probabilidade $\sum_{\alpha=1}^N W_\alpha = 1$. Assim,

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle &= \sum_{\alpha=1}^N \sum_{n',n} W_\alpha \langle \varphi_n | \psi^{(\alpha)} \rangle \langle \psi^{(\alpha)} | \varphi_{n'} \rangle \langle \varphi_{n'} | \hat{A} | \varphi_n \rangle, \\ &= \sum_{n',n} \langle \varphi_n | \hat{\rho} | \varphi_{n'} \rangle \langle \varphi_{n'} | \hat{A} | \varphi_n \rangle, \quad \hat{\rho} = \sum_{\alpha=1}^N |\psi^{(\alpha)}\rangle W_\alpha \langle \psi^{(\alpha)}|.\end{aligned}\quad (2.5)$$

Onde $\hat{\rho}$ representa o operador densidade característico do sistema todo, fornecendo uma descrição completa do ensemble. Uma das suas aplicações vem no cálculo do valor esperado dos operadores que atuam no sistema todo, dessa maneira ao continuar com a eq.(2.5) e fazendo uso da relação de completude, tem-se conseqüentemente que,

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_n \langle \varphi_n | \hat{\rho} \left(\underbrace{\sum_{n'} |\varphi_{n'}\rangle \langle \varphi_{n'}|}_I \right) \hat{A} | \varphi_n \rangle = \sum_n \langle \varphi_n | \hat{\rho} \hat{A} | \varphi_n \rangle = \text{tr}(\hat{\rho} \hat{A}). \quad (2.6)$$

A representação matricial do operador densidade é dada por,

$$\begin{aligned}\rho_{nn'} &= \langle \varphi_n | \hat{\rho} | \varphi_{n'} \rangle = \sum_{\alpha=1}^N \langle \varphi_n | \psi^{(\alpha)} \rangle W_{\alpha} \langle \psi^{(\alpha)} | \varphi_{n'} \rangle \\ &= \sum_{\alpha} c_{n'}^{(\alpha)*} c_n^{(\alpha)} W_{\alpha}, \quad (\text{Matriz Densidade}).\end{aligned}\quad (2.7)$$

Desse modo o conhecimento da matriz densidade fornece a obtenção da média estatística de um operador que atua no ensemble, (ver eq.(2.6)).

Se os estados puros $|\psi^{(\alpha)}\rangle$ não estão normalizados, o valor esperado do operador será dado por,

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\text{tr}(\hat{\rho}\hat{A})}{\text{tr}(\hat{\rho})}.\quad (2.8)$$

Tendo em vista que o operador densidade é hermitiano, a matriz densidade satisfaz a seguinte relação,

$$\rho_{nn'} = \rho_{n'n}^* \quad \rightarrow \quad \langle \varphi_n | \hat{\rho} | \varphi_{n'} \rangle = \langle \varphi_{n'} | \hat{\rho} | \varphi_n \rangle^* \quad (2.9)$$

Dessa maneira a matriz densidade sempre poderá ser diagonalizada mediante o uso de transformações unitárias. O elementos da sua diagonal são,

$$\rho_{nn} = \langle \varphi_n | \hat{\rho} | \varphi_n \rangle = \sum_{\alpha=1}^N |c_n^{(\alpha)}|^2 W_{\alpha}, \quad 0 \leq \rho_{nn} \leq 1. \quad (2.10)$$

Para entender o significado físico desse resultado, eq.(2.10), deve-se notar que ele é o produto de duas probabilidades, assim a interpretação da diagonal da matriz densidade implica a probabilidade de achar o sistema no estado puro $|\psi^{(\alpha)}\rangle$, além disso, achá-lo no estado $|\varphi_n\rangle$. Noutras palavras, cada elemento da diagonal ρ_{nn} fornece a probabilidade de achar cada subsistema do *ensemble* no estado n .

2.2 PROPRIEDADES DO OPERADOR DENSIDADE

As diferentes propriedades do operador $\hat{\rho}$ são realmente valiosas na análise de sistemas quânticos puros ou mistos, e indiferente do sistema em questão, tem-se que o seu traço é $\text{tr}(\hat{\rho}) \leq 1$ sempre que os auto-estados do sistema sejam ortonormais, além disso ele é um operador positivo. Para poder demonstrar essas e mais outras propriedades, usar-se-á a definição fornecida na

eq.(2.5),

$$\begin{aligned}
 \text{tr}(\hat{\rho}) &= \sum_{\alpha} W_{\alpha} \cdot \text{tr}(|\psi^{(\alpha)}\rangle\langle\psi^{(\alpha)}|) = \sum_{\alpha,n} W_{\alpha} \langle\varphi_n|\psi^{(\alpha)}\rangle\langle\psi^{(\alpha)}|\varphi_n\rangle, \\
 &= \sum_{\alpha} W_{\alpha} \sum_n |c_n^{(\alpha)}|^2, \\
 &= \sum_{\alpha} W_{\alpha} = 1.
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

De forma semelhante mostra-se que é um operador positivamente definido,

$$\langle\varphi_n|\hat{\rho}|\varphi_n\rangle = \sum_{\alpha} W_{\alpha} \langle\varphi_n|\psi^{(\alpha)}\rangle\langle\psi^{(\alpha)}|\varphi_n\rangle = \sum_{\alpha} W_{\alpha} |\langle\varphi_n|\psi^{(\alpha)}\rangle|^2 \geq 0. \tag{2.12}$$

A análise apresentada até aqui está relacionada ao operador densidade de um sistema misto ¹, embora ela seja válida para todo sistema quântico. A seguir apresentar-se-á a propriedade do operador $\hat{\rho}$, capaz de fornecer o critério para distinguir entre um sistema puro do misto.

Seja o operador densidade do *sistema quântico puro* definido simplesmente como $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$. O traço do $\hat{\rho}^2$ é,

$$\begin{aligned}
 \text{tr}(\hat{\rho}^2) &= \text{tr}(|\psi\rangle\langle\psi| \cdot |\psi\rangle\langle\psi|) = \sum_n \langle\varphi_n|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi|\varphi_n\rangle, \\
 &= \sum_n \langle\varphi_n|\psi\rangle\langle\psi|\varphi_n\rangle = \sum_n \langle\varphi_n|\hat{\rho}|\varphi_n\rangle = \text{tr}(\hat{\rho}) = 1.
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

Por outro lado para um *sistema quântico misto*,

$$\begin{aligned}
 \text{tr}(\hat{\rho}^2) &= \text{tr}\left(\sum_{\alpha,\beta} W_{\alpha}W_{\beta}|\psi^{(\alpha)}\rangle\langle\psi^{(\alpha)}| \cdot |\psi^{(\beta)}\rangle\langle\psi^{(\beta)}|\right), \\
 &= \sum_{\alpha} W_{\alpha}^2 \text{tr}\left(|\psi^{(\alpha)}\rangle\langle\psi^{(\alpha)}|\right) = \sum_{\alpha} W_{\alpha}^2 \leq 1.
 \end{aligned} \tag{2.14}$$

Isto pode ser entendido lembrando que o somatório de diferentes números positivos inferiores a 1 à segunda potência, é um número menor que ele mesmo. No caso particular no qual um sistema quântico misto possui o traço do seu operador densidade ao quadrado igual a 1, isso implica que ele é descrito de maneira exata, sendo portanto um sistema quântico puro.

¹Denomina-se sistema misto aquele sistema quântico que acha-se constituído por um ensemble estatístico de vários sistemas quânticos puros.

2.3 EQUAÇÃO DE MOVIMENTO DO OPERADOR DENSIDADE

Assumindo a representação da dinâmica do sistema quântico mediante a evolução temporal dos seus auto-estados, sem mudança temporal dos operadores que nele atuam, ou seja, assumindo a representação de Schrödinger,

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle, \quad \hat{A} \rightarrow \hat{A}. \quad (2.15)$$

No tempo ($t = t_0$) há certa mistura estatística de estados representado pelo operador densidade,

$$\hat{\rho}(t_0) = \sum_{\alpha=1}^N |\alpha(t_0)\rangle W_{\alpha} \langle \alpha(t_0)|. \quad (2.16)$$

Sabe-se que a variação temporal de um estado puro será dada pela ação do operador unitário de evolução temporal,

$$|\alpha(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\alpha(t_0)\rangle, \quad \langle \alpha(t)| = \langle \alpha(t_0)| \hat{U}^{\dagger}(t, t_0). \quad (2.17)$$

Em consequência disso o operador densidade apresentará dependência temporal,

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) &= \sum_{\alpha=1}^N |\alpha(t)\rangle W_{\alpha} \langle \alpha(t)|, \\ &= \sum_{\alpha=1}^N \hat{U}(t, t_0) |\alpha(t_0)\rangle W_{\alpha} \langle \alpha(t_0)| \hat{U}^{\dagger}(t, t_0), \\ &= \hat{U}(t, t_0) \left[\sum_{\alpha=1}^N |\alpha(t_0)\rangle W_{\alpha} \langle \alpha(t_0)| \right] \hat{U}^{\dagger}(t, t_0). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Assumindo os pesos estatísticos constantes no tempo,

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^{\dagger}(t, t_0). \quad (2.19)$$

Ao substituir os estados representados pela eq.(2.17) na equação de Schrödinger, obtém-se a equação da evolução para o operador unitário dada por,

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H} \hat{U}(t, t_0), \quad -i\hbar \frac{\partial \hat{U}^{\dagger}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{U}^{\dagger}(t, t_0) \hat{H}. \quad (2.20)$$

Dessa maneira, ao diferenciar temporalmente a eq.(2.19),

$$\begin{aligned}
 \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} &= \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) + \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \frac{\partial \hat{U}^\dagger(t, t_0)}{\partial t}, \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) - \frac{1}{i\hbar} \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{H}, \quad (2.21) \\
 &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}(t)]
 \end{aligned}$$

Em conclusão,

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}(t)], \quad (2.22)$$

que é a conhecida como equação de Liouville-von-Neumann.

Com base nos resultados obtidos na eq.(2.6) e eq.(2.22), a dinâmica do valor esperado de um operador na representação de Schrödinger fica expressa da seguinte maneira,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \langle \hat{A} \rangle}{\partial t} &= \text{tr} \left(\hat{A} \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} \right) = \frac{1}{i\hbar} \text{tr} \left(\hat{A} [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] \right), \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \text{tr} \left(\hat{A} \hat{H} \hat{\rho} - \hat{A} \hat{\rho} \hat{H} \right), \quad (2.23) \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle.
 \end{aligned}$$

Se o operador \hat{A} comuta com o hamiltoniano e dado que ele não depende do tempo, nesse caso se diz que o observável associado a \hat{A} é uma constante de movimento.

3 INTERAÇÃO ENTRE RADIAÇÃO-MATÉRIA E ABORDAGEM SEMI-CLÁSSICA

O seguinte capítulo tem por objetivo, apresentar a teoria sobre a interação entre radiação e matéria, uma vez que este trabalho visa justamente estudar a interação de um sistema físico com um campo de radiação clássico. A descrição dada aqui é a abordagem de Sakurai[27] e Tannoudji[28]. Vamos partir do hamiltoniano de acoplamento mínimo que está demonstrado no Apêndice A:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} + e\vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 - e\varphi + V_{ext}. \quad (3.1)$$

Portanto se almejamos uma descrição semi-clássica, devemos ir em direção à quantização da parte atômica que diz respeito ao sistema de dois níveis e o campo externo será tratado classicamente. Analisando esse hamiltoniano sob o ponto de vista do gauge de Coulomb podemos fazer as seguintes considerações: o potencial escalar φ pode ser escolhido como constante e o divergente do potencial vetor é nulo neste gauge de modo que temos:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} &= 0, \\ \varphi &= 0. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Escrevendo o Hamiltoniano de acoplamento mínimo de acordo com o Gauge de Coulomb temos a seguinte expressão:

$$H = \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (3.3)$$

$$H = \frac{(\vec{p}^2 - e\vec{p} \cdot \vec{A} - e\vec{A} \cdot \vec{p} + e^2\vec{A}^2)}{2m} + V(\vec{r}) \quad (3.4)$$

$$H = \frac{(\vec{p}^2 - \underbrace{e\vec{p} \cdot \vec{A} - e\vec{A} \cdot \vec{p}}_{[\vec{A}, \vec{p}]_+} + e^2\vec{A}^2)}{2m} + V(\vec{r}) \quad (3.5)$$

Analisando então o anticomutador acima, utilizando que $\vec{p} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla}$

vemos que:

$$[\vec{A}, \vec{p}] \psi = \vec{p} \cdot \vec{A} \psi - \vec{A} \cdot \vec{p} \psi \quad (3.6)$$

$$= i\hbar[\vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi - \vec{\nabla} \cdot (\vec{A} \psi)] \quad (3.7)$$

$$= -i\hbar[\vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi - \vec{A} \cdot (\vec{\nabla} \psi) + \underbrace{\vec{\nabla} \cdot \vec{A}}_0 \psi] = 0 \quad (3.8)$$

Portanto, podemos reescrever o hamiltoniano da seguinte forma:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) - \frac{e\vec{p} \cdot \vec{A}}{m} + \frac{e^2 \vec{A}^2}{2m} \quad (3.9)$$

A análise dos dois últimos termos do hamiltoniano podem nos levar a uma aproximação para campos de baixa intensidade:

$$\frac{(2e\vec{p} \cdot \vec{A} + e^2 \vec{A}^2)}{2m}. \quad (3.10)$$

Podemos dizer que para campos fracos o termo quadrático no potencial vetor poderá ser desprezado uma vez que $2e\vec{p} \cdot \vec{A} \gg e^2 \vec{A}^2$ para \vec{p} finito. Assim podemos separar o hamiltoniano em duas partes, uma sendo respectiva a uma partícula e a outra dizendo respeito ao campo externo.

$$H = H_{electron} - \frac{e\vec{p} \cdot \vec{A}}{m}. \quad (3.11)$$

Com base no hamiltoniano acima, afim de obter a abordagem semi-clássica, devemos então quantizar o termo $H_{electron}$ e tratar o campo externo classicamente.

3.1 QUANTIZAÇÃO DO HAMILTONIANO DO ELÉTRON

O formalismo de segunda quantização consiste em construir os operadores de criação e aniquilação que obedecem algumas regras de comutação, as quais vão definir se estamos tratando de bósons ou férmions. Seja um operador $\hat{\Psi}_m^\dagger(\vec{r})$ que cria uma partícula no estado m e na posição \vec{r} e um operador $\hat{\Psi}^m(\vec{r})$ que destrói uma partícula no estado m e posição \vec{r} . Temos que esses operadores obedecem a seguinte regra de comutação:

BÓSONS:

$$\left[\hat{\Psi}_m(\vec{r}), \hat{\Psi}_{m'}^\dagger(\vec{r}') \right] = \delta_{m,m'} \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\left[\hat{\Psi}_m(\vec{r}), \hat{\Psi}_{m'}(\vec{r}') \right] = \left[\hat{\Psi}_m^\dagger(\vec{r}), \hat{\Psi}_{m'}^\dagger(\vec{r}') \right] = 0$$

FÉRMIONS

$$\left\{ \hat{\Psi}_m(\vec{r}), \hat{\Psi}_{m'}^\dagger(\vec{r}') \right\} = \delta_{m,m'} \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\left\{ \hat{\Psi}_m(\vec{r}), \hat{\Psi}_{m'}(\vec{r}') \right\} = \left\{ \hat{\Psi}_m^\dagger(\vec{r}), \hat{\Psi}_{m'}^\dagger(\vec{r}') \right\} = 0$$

Sabendo que esses operadores devem satisfazer as seguintes condições:

$$\int d^3\vec{r} \phi_k^*(\vec{r}) \phi_{k'}(\vec{r}) = \delta_{k,k'}$$

Que é a condição de ortonormalidade dos vetores de base e a seguir a relação de completudeza que garante que:

$$\sum_k \phi_k^*(\vec{r}) \phi_k(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

vamos expandir os operadores de criação e aniquilação em uma dada base que satisfaça as relações acima de modo que teremos:

$$\hat{\Psi}_m(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}' \hat{\Psi}_m(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\hat{\Psi}_m(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}' \hat{\Psi}_m(\vec{r}') \underbrace{\delta(\vec{r} - \vec{r}')}_{\sum_k \phi_k^*(\vec{r}) \phi_k(\vec{r}')}$$

$$\hat{\Psi}_m(\vec{r}) = \sum_k \phi_k(\vec{r}) a_{k,m}$$

Tal que $a_{k,m} = \int d^3\vec{r}' \hat{\Psi}_m(\vec{r}') \phi_k^*(\vec{r}')$

Com a utilização do termo $a_{k,m}$ as regras de comutação desses operadores ficam expressas da seguinte maneira:

$$\left[\hat{\Psi}_m(\vec{r}), \hat{\Psi}_{m'}^\dagger(\vec{r}') \right] = \sum_{k,k'} \phi_k(\vec{r}) \phi_{k'}^*(\vec{r}') \left[a_{k,m}, a_{k',m}^\dagger \right] = \delta_{m,m'} \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\left[\hat{\Psi}_m(\vec{r}), \hat{\Psi}_{m'}^\dagger(\vec{r}') \right] = \int d^3\vec{r} \sum_{k,k'} \phi_k(\vec{r}) \phi_{k'}^*(\vec{r}') \phi_j(\vec{r}') \left[a_{k,m}, a_{k',m'}^\dagger \right] = \delta_{m,m'} \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

O que nos leva às formas canônicas para os operadores de criação e aniquilação de bósons e férmions

$$\text{BÓSON} \longrightarrow \left[a_{n,m}, a_{j,m'}^\dagger \right] = \delta_{m,m'} \delta_{j,n}$$

$$\text{FÉRMION} \longrightarrow \left\{ a_{k,m}, a_{k',m'}^\dagger \right\} = \delta_{k,k'} \delta_{m,m'}$$

Agora utilizando esse formalismo de segunda quantização vamos aplicar na hamiltoniana do elétron

$$H_e = \int \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) H_e \hat{\Psi}(\vec{r}) d^3\vec{r}$$

$$H_e = \int \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(|\vec{r}|) \right] \hat{\Psi}(\vec{r}) d^3\vec{r}$$

$$H_e = \int d^3\hat{r} \sum_{k,k'} \phi_{k'}^*(\vec{r}) H_e \phi_k(\vec{r}) a_{k'}^\dagger a_k$$

Sabendo que $H_e \phi_k(\vec{r}) = E_k \phi_k(\vec{r})$ vamos substituir esse resultado na equação acima o que vai resultar em:

$$H_e = \int d^3\hat{r} \sum_{k,k'} \phi_{k'}^*(\vec{r}) \underbrace{H_e \phi_k(\vec{r})}_{E_k \phi_k(\vec{r})} a_{k'}^\dagger a_k$$

$$H_e = \sum_{k,k'} E_k \int d^3\hat{r} \sum_{k,k'} \phi_{k'}^*(\vec{r}) \phi_k(\vec{r}) a_{k'}^\dagger a_k$$

$$H_e = \sum_{k,k'} E_k \int d^3\hat{r} \sum_{k,k'} \underbrace{\phi_{k'}^*(\vec{r}) \phi_k(\vec{r})}_{\delta_{k,k'}} a_{k'}^\dagger a_k$$

$$H_e = \sum_k E_k a_k^\dagger a_k$$

3.2 CAMPO CLÁSSICO

Sabemos que a na ausência de cargas ou correntes, as equações de Maxwell tem a seguinte forma:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0, \quad (3.12)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (3.13)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0, \quad (3.14)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0. \quad (3.15)$$

Podemos postular então a existência de um Potencial Vetor $\vec{A}(\vec{r}, t)$ tal que:

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad (3.16)$$

, significa que a eq. 3.13 é satisfeita. Utilizando posteriormente o chamado calibre de Coulomb, podemos definir que:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0. \quad (3.17)$$

No gauge de Coulomb temos que o campo elétrico assume a seguinte expressão:

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (3.18)$$

, que está de acordo com a equações de Maxwell. Portanto, nesse calibre determinar o potencial vetor é equivalente a determinar os campos elétrico e magnético.

A partir da Eq. 3.15 podemos ver que o potencial vetor obedece a seguinte equação:

$$\vec{\nabla}^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = 0 \quad (3.19)$$

, ou seja, $\vec{A}(\vec{r}, t)$ satisfaz uma equação de onda com velocidade c , onde o conjunto de soluções pode ser escrito como:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}_0(\vec{r})e^{-i\omega t} + \vec{A}_0^*(\vec{r})e^{i\omega t} = A_0 \vec{\epsilon} \left[e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right] \quad (3.20)$$

tal que $\vec{k} = k\vec{n}$. Desde que $\vec{A}(\vec{r}, t)$ satisfaz a equação de onda 3.19 temos

que $k = \frac{\omega}{c}$.

Escrevendo o Hamiltoniano de acoplamento mínimo, omitindo o termo quadrático do potencial vetor temos :

$$H = \frac{p^2}{2m_e} + e\phi(r) - \frac{e}{m_e c} \vec{A} \cdot \vec{p}. \quad (3.21)$$

Vamos trabalhar com um campo monocromático de uma onda plana tal que :

$$\vec{A} = 2A_0 \hat{\epsilon} \cos\left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \vec{r} - \omega t\right) \quad (3.22)$$

, onde $\hat{\epsilon}$ e \hat{n} são as direções de polarização e de propagação do campo, respectivamente. Escrevendo então:

$$\cos\left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \vec{r} - \omega t\right) = \frac{1}{2} \left[e^{i\left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \vec{r} - \omega t\right)} + e^{-i\left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \vec{r} + \omega t\right)} \right] \quad (3.23)$$

Expressando o potencial vetor novamente temos:

$$\vec{A} = A_0 \hat{\epsilon} \left[e^{i\left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \vec{r} - \omega t\right)} + e^{-i\left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \vec{r} + \omega t\right)} \right] \quad (3.24)$$

. Comparando este último resultado com a nossa expressão, para a perturbação harmônica :

$$V(t) = V e^{i\omega t} + V^\dagger e^{-i\omega t} \quad (3.25)$$

vemos que o termo $e^{-i\omega t}$ em

$$-\left(\frac{e}{m_e c}\right) \vec{A} \cdot \vec{p} = -\left(\frac{e}{m_e c}\right) A_0 \hat{\epsilon} \cdot \vec{p} \left[e^{i\left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \vec{r} - \omega t\right)} + e^{-i\left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \vec{r} + \omega t\right)} \right] \quad (3.26)$$

é responsável pela absorção enquanto que $e^{i\omega t}$ é responsável pela emissão estimulada. Dessa forma nossos coeficientes podem ser expressos como:

$$V = -\left(\frac{A_0 e}{m_e c}\right) e^{-i\left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \vec{r}\right)} \hat{\epsilon} \cdot \vec{p} \quad (3.27)$$

Podemos ainda utilizar a aproximação de dipolo elétrico, que consiste em afirmar que o comprimento de onda do campo de radiação é muito maior

que a dimensão atômica. Lembrando que $\frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$ e expandindo em série:

$$e^{i\left(\frac{\omega}{c}\hat{n}\cdot\vec{r}\right)} = 1 + \frac{i\omega}{c}\hat{n}\cdot\vec{r} + \dots, \quad (3.28)$$

podemos aproximar essa série para o seu termo dominante. A validade desta aproximação para átomos leves é válida na medida em que o $\hbar\omega$ é da ordem do espaçamento dos níveis atômicos [27].

Dessa maneira vamos interpretar o nosso termo de acoplamento entre o campo e o sistema como o operador de dipolo, escolhendo uma direção de propagação, por exemplo p_x , e sabendo que $[x, H_0] = \frac{i\hbar p_x}{m}$, onde H_0 é o hamiltoniano livre, podemos interpretar o nosso parâmetro de interação como o operador de transição de dipolo elétrico.

$$\langle\langle e^{i\left(\frac{\omega}{c}\hat{n}\cdot\vec{r}\right)}\hat{\epsilon}\cdot\vec{p}|t\rangle\rangle \rightarrow \hat{\epsilon}\langle|\vec{p}|t\rangle. \quad (3.29)$$

Portanto, vamos tratar no nosso sistema o termo γ no hamiltoniano (ver eq. 4.1) como proporcional ao termo de transição de dipolo.

4 DINÂMICA NÃO-LINEAR DO SISTEMA DE DOIS NÍVEIS

Nosso ponto de partida é o hamiltoniano de interação entre um sistema de dois níveis sujeito a um campo eletromagnético externo oscilante de frequência ω . A particularidade desse hamiltoniano é que suas auto-energias podem se reorganizar no tempo, já que contém em sua diagonal principal um termo que depende da própria densidade de carga local do sistema. Basicamente, temos um hamiltoniano discreto de autoconfinamento sujeito a um campo externo:

$$H = \begin{pmatrix} E_1 + \lambda_1 \rho_{11} & \gamma e^{i\omega t} \\ \gamma e^{-i\omega t} & E_2 + \lambda_2 \rho_{22} \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

onde $\gamma, E_1, E_2, \lambda_1, \lambda_2 \in R$. O termo γ acopla o sistema e o campo externo conforme foi mostrado no capítulo 3 e fornece a intensidade com que as coerências vão induzir as transições do sistema. Na mecânica quântica não relativística um sistema é completamente descrito por um estado inicial $|\Psi(0)\rangle$ e um hamiltoniano \hat{H} de acordo com a equação de Schrödinger

$$i \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = H(t)|\Psi(t)\rangle, \quad \hbar = 1. \quad (4.2)$$

O hamiltoniano pode ser expresso por uma matriz hermitiana cujos auto-vetores e auto-valores correspondem aos auto-estados e as auto-energias, respectivamente. Desde que \hat{H} seja um operador normal, o teorema espectral garante a existência de uma base ortonormal de autovetores $\{|\Psi_n(t)\rangle\}$ que satisfaz a seguinte equação:

$$H|\psi_n(t)\rangle = E_n(t)|\psi_n(t)\rangle. \quad (4.3)$$

No contexto de dinâmica quântica na qual o hamiltoniano depende explicitamente do tempo, temos que analisar com mais cautela a equação de autovalores (4.3), pois neste caso estamos tratando de auto-valores e auto-energias instantâneas do sistema. Quando a perturbação externa é periódica o sistema pode ser resolvido através da teoria de Floquet[30], que associa aos estados de Floquet "Quasi-Energias"[31]. Em geral não iniciamos o estudo dessa classe de problemas simplesmente fazendo a diagonalização de \hat{H} , mas buscamos algumas transformações de maneira a eliminar a dependência temporal.

4.1 RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE LIOUVILLE-VON-NEUMANN

Devido ao caráter peculiar do hamiltoniano discreto de autoconfinamento, o formalismo mais natural para se buscar a dinâmica de populações é o de matriz densidade ou formalismo de Liouville-von-Neumann. A revisão teórica desse formalismo foi apresentada no capítulo 2. Partimos então da equação:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -i[H, \hat{\rho}] \quad (4.4)$$

e do hamiltoniano 4.1. Sendo o operador densidade $\hat{\rho}$ dado explicitamente por:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{12}^* & \rho_{22} \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

Escrito dessa maneira, o operador $\hat{\rho}$ obedece aos postulados da mecânica quântica apresentados no capítulo 2. De posse desses dois elementos podemos agora desenvolver as soluções através da equação LVN. Abrindo o comutador temos o primeiro termo abaixo:

$$\hat{H} \cdot \hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11}[E_1 + \lambda_1 \rho_{11}] + \rho_{12}^* \gamma e^{i\omega t} & \rho_{12}[E_1 + \lambda_1 \rho_{11}] + \rho_{22} \gamma e^{i\omega t} \\ \rho_{11} \gamma e^{-i\omega t} + \rho_{12}^* [E_2 + \lambda_2 \rho_{22}] & \rho_{12} \gamma e^{-i\omega t} + \rho_{22} [E_2 + \lambda_2 \rho_{22}] \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Fazendo $\hat{\rho} \cdot \hat{H}$, temos

$$\hat{\rho} \cdot \hat{H} = \begin{pmatrix} \rho_{11}[E_1 + \lambda_1 \rho_{11}] + \rho_{12} \gamma e^{-i\omega t} & \rho_{11} \gamma e^{i\omega t} + \rho_{12} [E_2 + \lambda_2 \rho_{22}] \\ \rho_{12}^* [E_1 + \lambda_1 \rho_{11}] + \rho_{22} \gamma e^{-i\omega t} & \rho_{22} [E_2 + \lambda_2 \rho_{22}] + \rho_{12}^* \gamma e^{i\omega t} \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Expressando o resultando do comutador $[\hat{H}, \hat{\rho}]$:

$$\begin{pmatrix} \rho_{12}^* \gamma e^{i\omega t} - \rho_{12} \gamma e^{-i\omega t} & \rho_{12} [E_1 + \lambda_1 \rho_{11}] + \rho_{22} \gamma e^{i\omega t} - \\ & -\rho_{11} \gamma e^{i\omega t} - \rho_{12} [E_2 + \lambda_2 \rho_{22}] \\ \rho_{12}^* [E_2 + \lambda_2 \rho_{22}] + \rho_{11} \gamma e^{-i\omega t} - & \\ -\rho_{22} \gamma e^{-i\omega t} - \rho_{12}^* [E_1 + \lambda_1 \rho_{11}] & \rho_{12} \gamma e^{-i\omega t} - \rho_{12}^* \gamma e^{i\omega t} \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

Sabemos que este resultado representa as equações que descrevem a dinâmica das populações:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \begin{pmatrix} \dot{\rho}_{11} & \dot{\rho}_{12} \\ \dot{\rho}_{12}^* & \dot{\rho}_{22} \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Portanto teremos agora um conjunto de 4 equações diferenciais de primeira ordem para resolver, cada termo respectivo às populações da diagonal principal e outros termos para a coerência do sistema. Seja então o seguinte conjunto de equações:

$$i\hbar \frac{d\rho_{11}}{dt} = \rho_{12}^* \gamma e^{i\omega t} - \rho_{12} \gamma e^{-i\omega t}, \quad (4.10)$$

$$i\hbar \frac{d\rho_{12}}{dt} = \gamma e^{i\omega t} (\rho_{22} - \rho_{11}) + \rho_{12} [(E_1 + \lambda_1 \rho_{11}) - (E_2 + \lambda_2 \rho_{22})], \quad (4.11)$$

$$i\hbar \frac{d\rho_{12}^*}{dt} = \gamma e^{-i\omega t} (\rho_{11} - \rho_{22}) + \rho_{12}^* [(E_2 + \lambda_2 \rho_{22}) - (E_1 + \lambda_1 \rho_{11})], \quad (4.12)$$

$$i\hbar \frac{d\rho_{22}}{dt} = \rho_{12} \gamma e^{-i\omega t} - \rho_{12}^* \gamma e^{i\omega t}. \quad (4.13)$$

Vamos explorar as duas primeiras equações para extrair as expressões para a população do primeiro estado e posteriormente vamos dividir as partes real e imaginária da equação 4.11 que diz respeito à coerência do sistema. Separando as partes real e imaginária de ρ_{12} teremos:

$$\begin{cases} \rho_{12} = \Re \rho_{12} + i \Im \rho_{12}, \\ \rho_{12}^* = \Re \rho_{12} - i \Im \rho_{12}. \end{cases} \quad (4.14)$$

. Substituindo a relação (4.14) na Eq. (4.10) teremos a seguinte expressão:

$$\Re \rho_{12} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) - i \Im \rho_{12} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) = \frac{i}{\gamma} \dot{\rho}_{11} \quad (4.15)$$

Utilizando as relações de Euler podemos simplificar ainda mais essa expressão:

$$\begin{cases} e^{i\omega t} = \cos \omega t + i \sin \omega t, \\ e^{-i\omega t} = \cos \omega t - i \sin \omega t. \end{cases} \quad (4.16)$$

Agora inserindo as identidades (4.16) podemos chegar em uma expressão mais compacta para a equação que descreve a dinâmica da população do primeiro estado.

$$\frac{d\rho_{11}}{dt} = 2\gamma [\sin(\omega t) \Re \rho_{12} - \cos(\omega t) \Im \rho_{12}] \quad (4.17)$$

. Até o momento podemos reduzir 4.10 na forma 4.17. Analogamente para a equação 4.11:

$$i \frac{d\rho_{12}}{dt} = \gamma e^{i\omega t} (\rho_{22} - \rho_{11}) + \rho_{12} [(E_1 + \lambda_1 \rho_{11}) - (E_2 + \lambda_2 \rho_{22})].$$

No que segue vamos definir $\Omega_0 \equiv E_1 - E_2$, que representa a frequência natural do sistema de dois níveis em unidades de $\hbar = 1$, lembrando que ω corresponde a frequência de oscilação do campo incidente:

$$i \frac{d\rho_{12}}{dt} = \rho_{12} [\Omega_0 + \lambda_1 \rho_{11} - \lambda_2 \rho_{22}] + \gamma e^{i\omega t} (\rho_{22} - \rho_{11}). \quad (4.18)$$

Utilizando a propriedade do traço $\rho_{11} + \rho_{22} = 1$ temos que:

$$i \frac{d\rho_{12}}{dt} = \rho_{12} [\Omega_0 + \rho_{11} (\lambda_1 + \lambda_2) - \lambda_2] + \gamma e^{i\omega t} (1 - 2\rho_{11}). \quad (4.19)$$

Agora por último utilizando novamente as relações (4.14) e (4.16) podemos reduzir as partes real e imaginária da coerência nas seguintes expressões:

$$\Re \dot{\rho}_{12} = [\Omega_0 + \rho_{11} (\lambda_1 + \lambda_2) - \lambda_2] \Im \rho_{12} + \gamma \sin(\omega t) (1 - 2\rho_{11}), \quad (4.20)$$

$$\Im \dot{\rho}_{12} = -[\Omega_0 + \rho_{11} (\lambda_1 + \lambda_2) - \lambda_2] \Re \rho_{12} - \gamma \cos(\omega t) (1 - 2\rho_{11}). \quad (4.21)$$

Possuímos até então um conjunto de três equações diferenciais acopladas. Para simplificar a notação, deste ponto em diante, vamos renomear as populações da seguinte forma: $z = \rho_{11}$, $x = \Re \rho_{12}$ e $y = \Im \rho_{12}$

$$\dot{z} = 2\gamma [x \sin(\omega t) - y \cos(\omega t)], \quad (4.22)$$

$$\dot{x} = y [\Omega_0 + z(\lambda_1 + \lambda_2) - \lambda_2] + \gamma \sin(\omega t) [1 - 2z], \quad (4.23)$$

$$\dot{y} = -x [\Omega_0 + z(\lambda_1 + \lambda_2) - \lambda_2] - \gamma \cos(\omega t) [1 - 2z]. \quad (4.24)$$

O parâmetro γ é o termo que fornece a intensidade do acoplamento entre o campo externo e o sistema, Ω_0 é frequência natural de oscilação do sistema, os termos $\lambda_{1,2}$ definem a intensidade com que a densidade local de carga perturba as energias dos estados, sendo o parâmetro que determina o quão não-linear é o hamiltoniano. Temos até aqui as equações diferenciais geradas pela equação de LVN, sendo esse um sistema de equações totalmente acoplado. Vamos agora buscar maneiras de desacoplar as três EDOs acima, afim de averiguar a existência de soluções analíticas.

Uma vez que parte temporal explícita do hamiltoniano está contida nos termos fora da diagonal, podemos eliminar essa parte temporal nas equações

realizando uma transformação unitária no hamiltoniano. Assim resolvemos as equações em um referencial e retornamos através de uma transformação inversa. Tal transformação nos leva a um novo hamiltoniano que corresponde a um sistema de dois níveis sujeito a uma perturbação constante. Isso será demonstrado na seção 4.6.

4.2 SOLUÇÕES PARA PERTURBAÇÃO CONSTANTE

Como exposto na seção anterior é possível eliminar a dependência temporal nesse sistema através de uma transformação unitária, o que será demonstrado posteriormente. Assim interessa-nos conhecer as soluções para o conjunto de equações 4.22, 4.23, 4.24 no limite de $\omega = 0$. Assim temos:

$$\dot{z} = 2\gamma \left[\underbrace{x \sin(\omega t)}_0 - \underbrace{y \cos(\omega t)}_1 \right], \quad (4.25)$$

$$\dot{x} = y[\Omega_0 + z(\lambda_1 + \lambda_2) - \lambda_2] + \underbrace{\gamma \sin(\omega t)}_0 [1 - 2z], \quad (4.26)$$

$$\dot{y} = -x[\Omega_0 + z(\lambda_1 + \lambda_2) - \lambda_2] - \underbrace{\gamma \cos(\omega t)}_1 [1 - 2z]. \quad (4.27)$$

Vamos simplificar essa notação e utilizar que $b = \lambda_1 + \lambda_2$ e $a = \Omega_0 - \lambda_2$. Deste modo,

$$\dot{z} = -2y\gamma, \quad (4.28)$$

$$\dot{x} = (a + bz)y, \quad (4.29)$$

$$\dot{y} = \gamma(2z - 1) - (a + bz)x. \quad (4.30)$$

É possível encontrar uma constante de movimento para esse sistema, que está relacionada ao fato do hamiltoniano ser hermitiano, através do procedimento que vem a seguir. Inicialmente multiplicando 4.29 por x e a 4.30 por y obtemos:

$$\dot{x}x = (a + bz)yx,$$

$$\dot{y}y = \gamma(2z - 1)y - (a + bz)xy. \quad (4.31)$$

Somando então essas duas equações

$$\dot{x}x + \dot{y}y = \gamma(2z - 1)y. \quad (4.32)$$

Isolando y em 4.28, e em seguida substituindo o resultado em 4.32 temos:

$$\dot{x}x + \dot{y}y = -\gamma(2z - 1)\left(\frac{\dot{z}}{2\gamma}\right), \quad (4.33)$$

ou seja,

$$\dot{x}x + \dot{y}y + \dot{z}z - \frac{\dot{z}}{2} = 0. \quad (4.34)$$

Esta última expressão nitidamente representa uma derivada total em relação ao tempo, na forma:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} + \frac{z^2}{2} - \frac{z}{2} \right) = 0. \quad (4.35)$$

Podemos perceber que derivando 4.35 retornamos à 4.34, onde o argumento da derivada é uma constante

$$\begin{aligned} (x^2 + y^2 + z^2 - z) &= cte, \\ \text{ou} & \\ x^2 + y^2 + z(z - 1) &= cte. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Percebemos que esse vínculo correlaciona o produto das populações assim como o módulo da coerência de maneira que a sua diferença resulta constante. Notemos que a Eq.4.36 pode ser escrita como $\det \hat{\rho} = cte$ e que, a mesma é uma consequência direta da equação de LVN, sendo válida, ao menos para sistemas de dois níveis, qualquer que seja o hamiltoniano, desde que hermitiano. Por motivos que serão discutidos posteriormente, consideraremos nossas soluções matematicamente consistentes desde que obedeçam o critério $\det \hat{\rho} = cte$.

Chegamos a essa expressão puramente através de uma manipulação algébrica, entretanto podemos obter esse mesmo resultado utilizando as propriedades da matriz densidade apresentadas no Cap.2. A Eq.(4.36) diz respeito ao estado inicial do sistema assim como de sua pureza, fizemos uma revisão sobre o formalismo de matriz densidade no Cap.2 e vimos que quando o estado inicial do sistema passa por um estado puro então cumpre-se a seguinte relação $\rho^2 = \rho$. Podemos ver que essa relação leva ao nosso vínculo, desde que $\det \rho = 0$ [26]. Entretanto o que é interessante é que não fizemos nenhuma consideração sobre condições iniciais até o presente momento e a relação sobre a pureza aparece escondida nas equações. Conforme dissemos

no paragrafo anterior, utilizando as relações entre ρ e ρ^2 :

$$\begin{aligned} \rho^2 &= \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{12}^* & \rho_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{12}^* & \rho_{22} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \rho_{11}^2 + \Re\rho_{12}^2 + \Im\rho_{12}^2 & \rho_{12}(\rho_{11} + \rho_{22}) \\ \rho_{12}^*(\rho_{11} + \rho_{22}) & \rho_{22}^2 + \Re\rho_{12}^2 + \Im\rho_{12}^2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.37)$$

de modo que podemos perceber que o vínculo $\rho_{11} = \rho_{11}^2 + \Re\rho_{12}^2 + \Im\rho_{12}^2$ sai dessa relação entre ρ e ρ^2 desde que o sistema passe por um estado puro.

4.3 SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES NO REGIME DE $\omega = 0$

Retomando o nosso sistema de equações no regime de perturbação constante, seja:

$$\begin{aligned} \dot{z} &= -2\gamma z, \\ \dot{x} &= (a + bz)y, \\ \dot{y} &= \gamma(2z - 1) - (a + bz)x. \end{aligned}$$

Vamos buscar uma forma de desacoplar esse sistema, inicialmente isolando y em 4.28 e substituindo em 4.29 e fazendo uma integração:

$$\dot{x} = -(a + bz) \frac{\dot{z}}{2\gamma}, \quad (4.38)$$

$$\dot{x} = -\frac{a\dot{z}}{2\gamma} - \frac{bz\dot{z}}{2\gamma}, \quad (4.39)$$

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{a}{2\gamma} \frac{dz}{dt} - \frac{bz}{2\gamma} \frac{dz}{dt}. \quad (4.40)$$

Integrando a equação acima obtemos:

$$x - x_0 = -\frac{a(z - z_0)}{2\gamma} - \frac{b(z^2 - z_0^2)}{4\gamma}, \quad (4.41)$$

$$x(t) = -\frac{az}{2\gamma} - \frac{bz^2}{4\gamma} + \underbrace{x_0 + \frac{az_0}{2\gamma} + \frac{bz_0^2}{4\gamma}}_{C_1}. \quad (4.42)$$

Temos uma expressão para a parte real da coerência que depende de condições iniciais x_0 e z_0 . Uma vez que encontramos na seção anterior o vínculo, eq. 4.36, que atesta que o determinante de ρ é uma constante, podemos ficar motivados a impor alguns valores para as condições iniciais da equação (4.42) nesta etapa da resolução. Por exemplo, impondo a condição $z_0 = 1$ e $x_0 = 0$ temos que $z \notin [0, 1]$, caracterizando uma inconsistência com o domínio da função $z(t)$. Portanto, vamos fixar essa constante C_1 posteriormente. Agora que encontramos uma expressão para a parte real, vamos retornar com esse

resultado às outras equações. Substituindo esse último resultado em 4.30:

$$\begin{aligned} \dot{y} &= (2z - 1)\gamma - (a + bz)x, \\ \dot{y} &= 2z\gamma - \gamma - (a + bz)\left(-\frac{az}{2\gamma} - \frac{bz^2}{4\gamma} + C_1\right), \\ \dot{y} &= 2z\gamma - \gamma + \frac{a^2z}{2\gamma} + \frac{abz^2}{4\gamma} - aC_1 + \frac{abz^2}{2\gamma} + \frac{b^2z^3}{4\gamma} - zbC_1, \\ \dot{y} &= \left(\frac{b^2}{4\gamma}\right)z^3 + \left(\frac{3ab}{4\gamma}\right)z^2 + (2\gamma + \frac{a^2}{2\gamma} - bC_1)z - (\gamma + aC_1). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Utilizando $\dot{y} = -\frac{\ddot{z}}{2\gamma}$, obtemos uma equação somente em z :

$$\ddot{z} + z(4\gamma^2 + a^2 - 2bC_1\gamma) + \frac{3}{2}abz^2 + \frac{b^2z^3}{2} - 2\gamma(\gamma + aC_1) = 0. \quad (4.44)$$

Definindo novas constantes como:

$$\begin{cases} C_2 = 4\gamma^2 + a^2 - 2\gamma bC_1, \\ C_3 = 2\gamma(\gamma + aC_1), \end{cases} \quad (4.45)$$

podemos escrever finalmente:

$$\ddot{z} + C_2z + \frac{3}{2}abz^2 + \frac{b^2z^3}{2} - C_3 = 0. \quad (4.46)$$

Essa equação é análoga a um oscilador anarmônico, forçado pelo termo C_3 e contendo as anarmonicidades nos termos quadrados e nas potências cúbicas de z . Esse sistema é fortemente dependente das condições iniciais que estão embutidas no termo C_1 que está contida nos outros termos, o parâmetro não-linear está contido em b que incorpora $\lambda_{1,2}$. Novamente podemos fazer aqui a estratégia de escrever Eq.(4.46) como uma derivada total, primeiro multiplicamos toda a equação por \dot{z} :

$$\ddot{z}\dot{z} + C_2z\dot{z} + \frac{3}{2}abz^2\dot{z} + \frac{b^2z^3}{2}\dot{z} - C_3\dot{z} = 0. \quad (4.47)$$

Em seguida podemos escrever que:

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\dot{z}^2}{2} + \frac{z^2}{2} C_2 + \frac{ab}{2} z^3 + \frac{b^2}{8} z^4 - z C_3 \right] = 0. \quad (4.48)$$

Novamente o argumento da derivada deve ser constante para que a mesma seja nula:

$$\frac{\dot{z}^2}{2} + \frac{z^2}{2} C_2 + \frac{ab}{2} z^3 + \frac{b^2}{8} z^4 - z C_3 = cte. \quad (4.49)$$

Se utilizarmos a condição de que $z = 0$ espera-se que \dot{z} também seja nulo, uma vez que estamos em um "ponto de retorno" do sistema. Isso nos leva a conclusão que essa constante deve ser igual a zero. Da mesma forma, fazendo $z = 1$, temos \dot{z} igual a zero também, o que nos permite fixar a constante C_1 , da seguinte forma:

$$\frac{\dot{z}^2}{2} + \frac{z^2}{2} C_2 + \frac{ab}{2} z^3 + \frac{b^2}{8} z^4 - z C_3 = 0 \quad (4.50)$$

Se $z = 1$, temos:

$$\begin{aligned} \frac{C_2}{2} + \frac{ab}{2} + \frac{b^2}{8} - C_3 &= 0, \\ \frac{4\gamma^2 + a^2 - 2b\gamma C_1}{2} + \frac{ab}{2} + \frac{b^2}{8} - 2\gamma(\gamma + aC_1) &= 0, \\ \frac{a^2}{2} - C_1 b\gamma + \frac{ab}{2} + \frac{b^2}{8} - 2aC_1\gamma &= 0, \\ C_1(-b\gamma - 2a\gamma) + \frac{a^2}{2} + \frac{ab}{2} + \frac{b^2}{8} &= 0, \end{aligned} \quad (4.51)$$

$$C_1 = \frac{1}{2\gamma} \left[\frac{a^2 + ab + \frac{b^2}{4}}{b + 2a} \right],$$

$$C_1 = \frac{1}{4\gamma} \left(a + \frac{b}{2} \right).$$

Reunindo os resultados obtidos acima, temos:

$$\frac{\dot{z}^2}{2} + \frac{z^2}{2} C_2 + \frac{ab}{2} z^3 + \frac{b^2}{8} z^4 - z C_3 = 0, \quad (4.52)$$

$$C_1 = \frac{1}{4\gamma} \left(a + \frac{b}{2} \right), \quad (4.53)$$

$$C_2 = 4\gamma^2 + a^2 - 2\gamma b C_1, \quad (4.54)$$

$$C_3 = 2\gamma(\gamma + a C_1). \quad (4.55)$$

Esta é expressão para o seguinte hamiltoniano:

$$\begin{pmatrix} E_1 + \lambda_1 \rho_{11} & \gamma \\ \gamma & E_2 + \lambda_2 \rho_{22} \end{pmatrix} \quad (4.56)$$

Fizemos a frequência do campo ir a zero, o que acarreta em perturbações constantes. A tática utilizada para escrever a eq. 4.46 nos permite também baixar o grau da equação diferencial, ou seja, encontrar a constante de movimento, o que torna mais viável fazer a integração e obter $z(t)$. A seguir então vamos apresentar o comportamento da dinâmica de carga do sistema sob essa primeira aproximação. Seja um sistema unidimensional, sem dissipação sujeito a um potencial $U(z)$, sabemos que para este tipo de sistema pode-se escrever:

$$\dot{z} = \pm \sqrt{\frac{2}{m} [E - U(z)]} \quad (4.57)$$

assim como:

$$t - t_0 = \int_{z_0}^z \frac{\pm dz}{\sqrt{\frac{2}{m} [E - U(z)]}} \quad (4.58)$$

Na seção seguinte iremos estudar o comportamento dinâmico do nosso sistema de dois níveis através da resolução da integral eq. 4.58, assumindo $E = 0$, assim como diagramas de fase que são obtidos através da eq. 4.57 para diversos valores de parâmetros.

4.4 DIAGRAMAS DE FASE E COMPORTAMENTO DINÂMICO DE Z

A integração da eq.4.52 permite a análise do comportamento dinâmico do nosso sistema. Inicialmente descrevemos o sistema em um regime quase degenerado, ou seja, supomos que o espaçamento entre os níveis é pequeno ($\Delta E = 0.01$). Zerando λ obtemos um sistema de dois níveis sujeito a um campo externo clássico que induz as transições entre os estados com uma frequência bem definida. A intensidade do campo é dada pelo parâmetro γ e a quanto

maior seu valor maior o número de oscilações que as populações realizam. No estudo que realizamos aqui, por simplicidade utilizamos sempre uma distribuição simétrica de não-linearidade, ou seja, $\lambda_1 = \lambda_2$. A equação de movimento desse sistema é definida pela população $z(t)$ e sua evolução temporal $\dot{z}(t)$. Vamos considerar essas quantidades para ser coordenadas no chamado espaço de fase. Qualquer ponto $P(z, \dot{z})$ no espaço de fase descreve um caminho que caracteriza toda a história de um sistema que oscila. Como o sistema em questão pode ser interpretado como um oscilador anarmônico conservativo, cada caminho percorrido no espaço de fase corresponde a uma energia total definida. Em um oscilador harmônico linear unidimensional, dois caminhos no espaço de fase não se cruzam, o cruzamento significaria que para um dado conjunto de condições iniciais $x(t_0), \dot{x}(t_0)$, o movimento poderia ocorrer em diferentes caminhos do espaço de fase, e a equação diferencial que gera as equações do movimento não seria única.

Vamos analisar agora o diagrama de fases da Figura 4.1. Esse diagrama foi construído variando o parâmetro λ desde 0 até 2.5. Para valores pequenos do parâmetro não-linear, o sistema é fracamente perturbado pelo mesmo e permite as oscilações de Rabi, e podemos observar no diagrama de fases uma forma característica de um oscilador harmônico simples. Conforme aumentamos seu valor atingimos um valor crítico (linha azul pontilhada na Fig.4.1), que para esse conjunto de parâmetros é igual a $\lambda = 2$. Nesta circunstância específica, a não-linearidade suprime as oscilações entre $z = -1$ e $z = 1$, o que corresponde a manter a carga em um determinado estado por um longo período. Como o ponto de cruzamento no espaço de fase ocorre quando $\rho_{11} = \rho_{12} = 0.5$ podemos entender esse estado como um estado estacionário de coerência. Isso pode ser visto observando a dinâmica de $z(t)$ e as partes real e imaginária da coerência nas figuras 4.2 (a) e 4.2 (b), respectivamente.

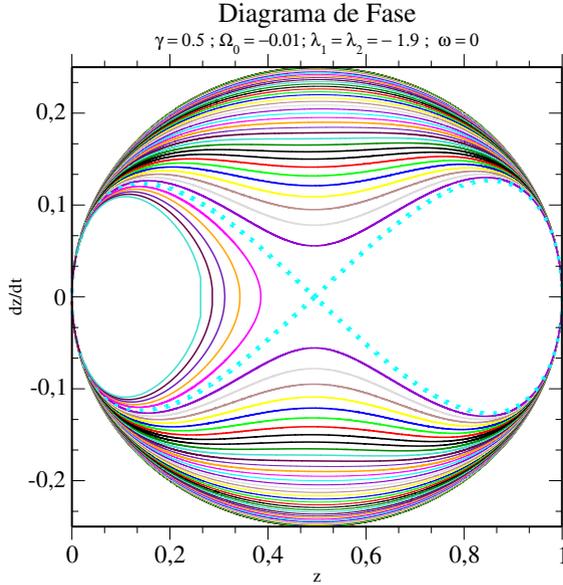


Figura 3: Diagrama de fases. Cada curva representa um valor do parâmetro λ de modo que podemos avaliar o valor crítico de não-linearidade para o qual ocorre auto-confinamento. No caso em questão podemos observar que a curva azul corresponde a um confinamento.

Podemos observar que na medida em que o parâmetro não-linear ultrapassa o valor crítico, o sistema passa para regimes de auto-confinamento. O que significa dizer que a transição não se completa independentemente da dinâmica ser iniciada no estado excitado ou fundamental, ao contrário do que ocorre para valores subcríticos onde todo o espaço de fase é percorrido independentemente da condição inicial.

Referente às configurações de parâmetros dos gráficos anteriores, apresentamos também a dinâmica da coerência nas figuras 4.3 (a), 4.3 (b), 4.4 (a) e 4.4 (b), ou seja, parte real e imaginária dos termos fora da diagonal da matriz densidade. Podemos verificar que o sistema parte de um estado inicial puro, ou seja a coerência é zero no instante inicial, portanto o vínculo que foi obtido na seção anterior é uma constante igual a zero. Em termos gerais o comportamento da coerência reflete o comportamento das populações com mesma periodicidade.

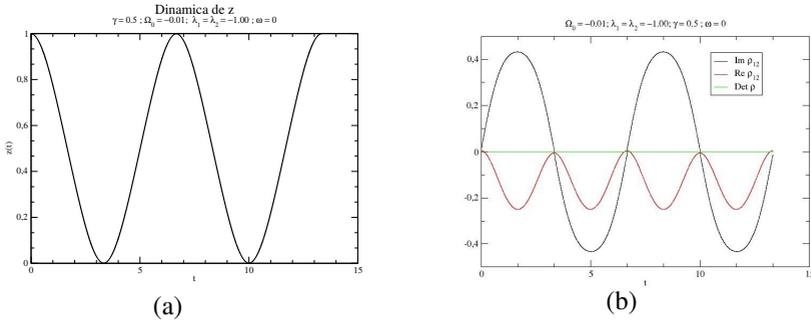


Figura 4: Na figura 4.2 (a) observamos a dinâmica de população para $\lambda = -1.00$, o que corresponde a um valor pequeno de não-linearidade, possibilitando as oscilações. Na figura 4.2 (b) temos a dinâmica das partes real e imaginária das coerências referente a mesma configuração de parâmetros do gráfico 4.2 (a). A curva verde centrada em zero corresponde a uma constante de movimento encontrada na equação 4.36.

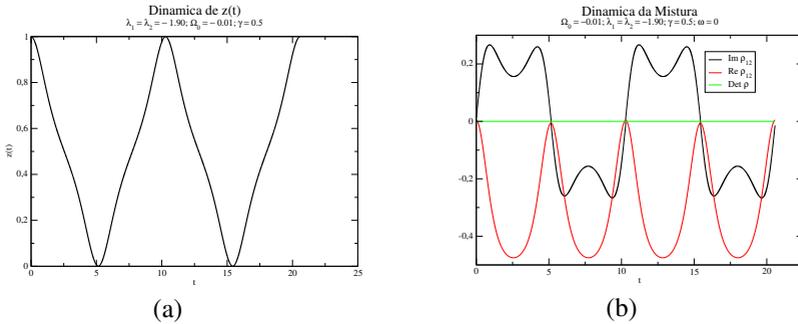


Figura 5: Na figura 4.3 (a) aumentamos o termo λ para $\lambda = -1.90$, e percebemos que o aumento do parâmetro não-linear induz uma deformação na formato senoidal da função que descreve as oscilações de população. O gráfico 4.3 (b) apresenta a dinâmica das coerências assim como o termo em verde que corresponde à $\det \rho = 0$.

4.5 ANÁLISE DO REGIME EM $\Delta E = 1.00$

Na medida em que aumentamos o espaçamento entre os níveis, deixamos de tratar o sistema no regime quase-degenerado. O sistema realiza transições completas de população enquanto λ for pequeno. Nessa sessão estamos utilizando como condição inicial $z(0) = 1$, ou seja o sistema parte

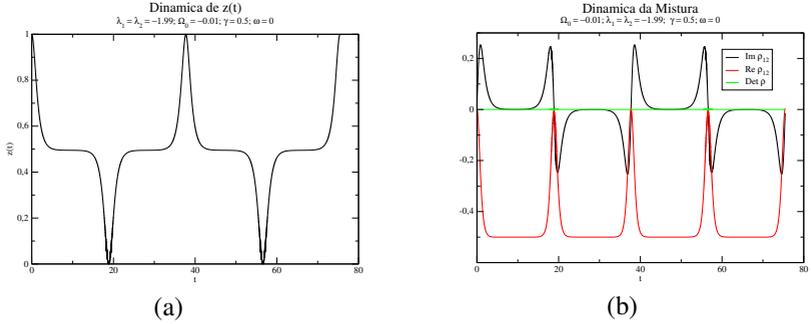


Figura 6: Na figura 4.4 (a) observamos a dinâmica de ρ_{11} para um caso crítico, no qual o parâmetro não linear assume um valor em que ele confina a população em 0.5. Comparando as escalas de tempo com os gráficos anteriores percebemos que em $\lambda = 1.99$ a dinâmica do sistema não permite a transição confinando a dinâmica. O gráfico subsequente apresentado na fig. 4.4 (b) apresenta o caráter crítico dessa dinâmica através das linhas mais agudas.

do estado fundamental. A medida em que aumentamos o valor de λ podemos perceber pelo diagrama de fase que o caráter não-linear das equações conduz a um confinamento no estado excitado. Isso porque, pensando no sistema como um oscilador harmônico, a curva de potencial atinge o ponto $z = 0$ de maneira assintótica, o que aumenta significativamente o tempo necessário para o sistema percorrer a parte final do diagrama de fase. No limite crítico, $\lambda = 2$ (linha azul pontilhada no diagrama de fase), o sistema demora um tempo infinito pra fazer a transição do estado fundamental para o estado excitado, o que pode ser observado nas figuras 4.8 (a) e 4.8 (b). Acima desse limite crítico o sistema passa para um regime de auto-confinamento, com a particularidade de que não existe dinâmica se partirmos da condição inicial $z = 0$.

O sistema de equações diferenciais que governa a dinâmica é fortemente dependente das condições iniciais, lembrando que as constantes fixadas anteriormente na resolução das equações, contém em si os termos relacionados ao estado inicial da coerência e da população. A própria fixação de tais constantes é feita de maneira a forçar o domínio da função $z(t)$ entre 0 e 1. Conforme discutimos no início desse capítulo, para garantir que as soluções na forma integrável tenham significado físico, utilizamos como critério o fato de que o determinante de ρ deve ser constante. Assim no regime em que os níveis estão mais espaçados, não é possível garantir simultaneamente as condições iniciais $z(0) = 1$ e $x(0) = 0$ e $y(0) = 0$ sem violar o vínculo $\det \rho$

igual a uma constante. Em outras palavras, o sistema não passa por um estado puro. Essa é uma restrição que surge devido a problemas de integrabilidade da equação de confinamento discreta[32], mas não afeta a dinâmica de $z(t)$.

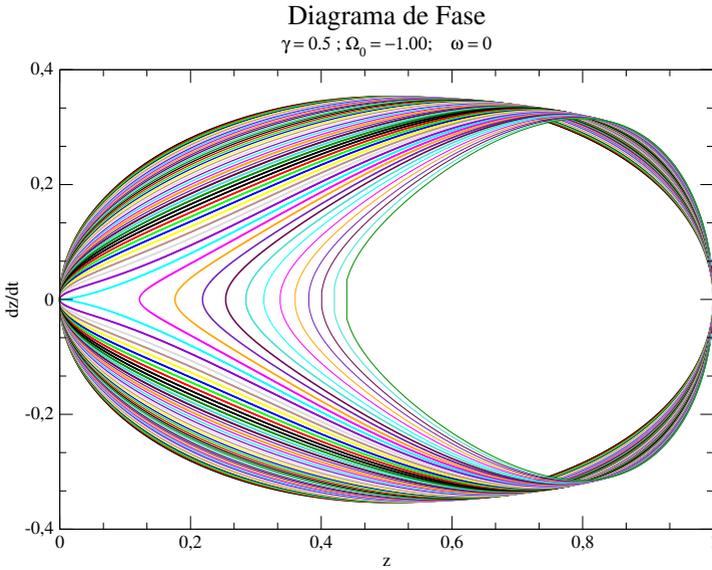


Figura 7: Diagrama de fase para estados não degenerados, $\Omega_0 = 1.00$

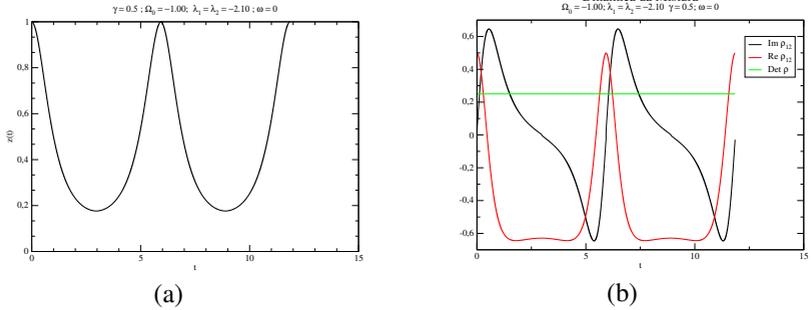


Figura 8: Conforme aumentamos o valor de λ as oscilações de Rabi são suprimidas, na fig 4.6 (a) a inversão de população não se completa e a dinâmica da população atinge o valor máximo de 0,2 não atingindo o outro estado. Na figura 4.6 (b) vemos que quando o estado é não degenerado vínculo $\det\rho$ permanece constante (linha verde) porém diferente de zero, as linhas preta e vermelha correspondem as dinâmicas das partes real e imaginária da coerência.

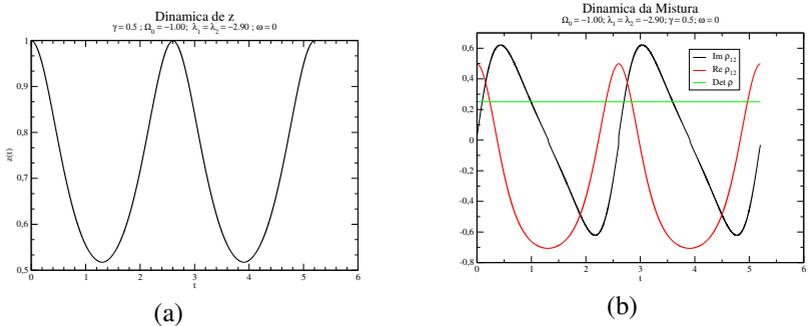


Figura 9: levamos a não linearidade à um valor maior que as anteriores onde podemos observar que agora as oscilações ficam limitadas ao valor 0,5 que pode ser observado na fig 4.7 (a), a fig 4.7(b) apresenta a dinâmica da coerência assim como do $\det\rho$, conforme o estado é não-degenerado não podemos garantir que o estado inicial é puro, como podemos observar a linha vermelha não inicia em 0.

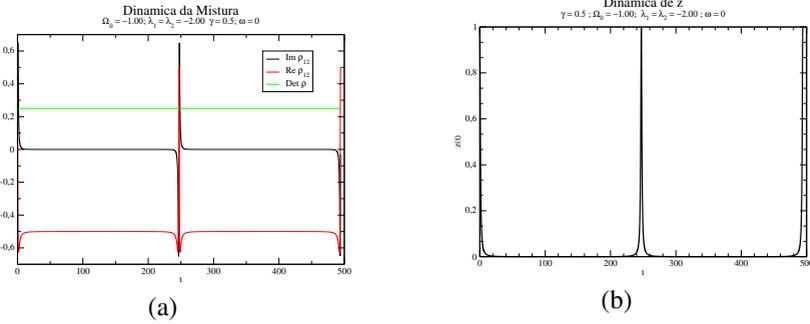


Figura 10: Acima dos valores de $\lambda = 2$ não temos mais dinâmica do sistema para essa configuração de parâmetros. Portanto na fig 4.8 (b) vemos que inicialmente a dinâmica força o sistema a transitar para o outro estado confinando o mesmo por um tempo infinito. Na fig 4.8 (a) observamos a dinâmica das coerências que apresentam picos nos valores onde ocorre as transições e se mantem constante no decorrer da dinâmica.

4.6 RESOLUÇÃO COMPLETA DA DINÂMICA DO SISTEMA

Nas seções anteriores tratamos do sistema no regime de $\omega = 0$. Isso nos possibilitou chegar a um conjunto de equações que pôde ser mais facilmente desacopladas. Nessa seção, vamos procurar uma solução mais geral, como o sistema sujeito a um campo oscilante monocromático.

Estamos interessados em uma transformação unitária de forma a eliminar a dependência temporal das equações. Seja a equação de Schroedinger:

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle, \quad (4.59)$$

Vamos atuar com um operador unitário \hat{U} da seguinte maneira:

$$i\hbar \hat{U}^\dagger \frac{d(\hat{U} \hat{U}^\dagger |\psi\rangle)}{dt} = \hat{U}^\dagger H(\hat{U} \hat{U}^\dagger |\psi\rangle), \quad (4.60)$$

onde $\hat{U}^\dagger |\psi\rangle = |\psi\rangle_u$ é o hamiltoniano transformado e $\hat{U}^\dagger H \hat{U} = H_u$. Assim, podemos reescrever as equações da seguinte forma:

$$i\hbar \left(\hat{U}^\dagger \hat{U} \frac{\partial |\psi\rangle_u}{\partial t} + \hat{U}^\dagger \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} |\psi\rangle_u \right) = H_u |\psi\rangle_u. \quad (4.61)$$

Queremos a seguinte transformação:

$$\left\{ \begin{array}{l} |\psi\rangle_u = \hat{U}^\dagger |\psi\rangle, \\ H_u = \hat{U}^\dagger H \hat{U} - i\hbar \hat{U}^\dagger \frac{\partial \hat{U}}{\partial t}. \end{array} \right. \quad (4.62)$$

A relação acima pode ser escrita no contexto do formalismo de Matriz Densidade, o que nos leva à seguinte forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_u = \hat{U}^\dagger \rho \hat{U}, \\ H_u = \hat{U}^\dagger H \hat{U} - i\hbar \hat{U}^\dagger \frac{\partial \hat{U}}{\partial t}. \end{array} \right. \quad (4.63)$$

Além disso, a dinâmica é feita através da equação de Liouville-von-Neumann utilizando os operadores transformados

$$i\hbar \dot{\rho}_u = [H_u, \rho_u]. \quad (4.64)$$

Com o conjunto de relações anteriores, vamos demonstrar que a transformação unitária $\hat{U} = e^{i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}}$ e seu adjunto $\hat{U}^\dagger = e^{-i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}}$ onde $\hat{\sigma}_z$ é a matriz de Pauli, nos permite eliminar a parte temporal do hamiltoniano proposto.

A partir dos operadores acima, o desenvolvimento é o que se segue: inicialmente vamos escrever o nosso hamiltoniano (eq. 4.1) expresso em termos de operadores auxiliares, ou seja,

$$\hat{H} = A \hat{\sigma}_{gg} + B \hat{\sigma}_{ee} + \gamma e^{i\omega t} \hat{\sigma}_+ + \gamma e^{-i\omega t} \hat{\sigma}_-, \quad (4.65)$$

tal que $A = E_1 + \lambda_1 \rho_{11}$ e $B = E_2 + \lambda_2 \rho_{22}$, e os operadores auxiliares são escritos em termos das matrizes de Pauli:

$$\hat{\sigma}_{gg} = |g\rangle\langle g|, \quad (4.66)$$

$$\hat{\sigma}_{ee} = |e\rangle\langle e|, \quad (4.67)$$

$$\hat{\sigma}_{ge} = |g\rangle\langle e| = \hat{\sigma}_-, \quad (4.68)$$

$$\hat{\sigma}_{eg} = |e\rangle\langle g| = \hat{\sigma}_+, \quad (4.69)$$

$$\hat{\sigma}_z = |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|. \quad (4.70)$$

Cada termo possui sua representação matricial:

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_x = \frac{\hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-}{2} \quad \hat{\sigma}_y = \frac{\hat{\sigma}_- - \hat{\sigma}_+}{2i}$$

$$[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_{gg}] = 0 \quad [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_{ee}] = 0 \quad [\hat{\sigma}_-, \hat{\sigma}_+] = -\hat{\sigma}_z$$

$$[\hat{\sigma}_+, \hat{\sigma}_-] = \hat{\sigma}_z \quad [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_-] = -2\hat{\sigma}_- \quad [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_+] = 2\hat{\sigma}_+.$$

Assim, para realizarmos a transformação 4.63 separamos em duas partes

$$H_u = \underbrace{\hat{U}^\dagger H \hat{U}}_a - i\hbar \underbrace{\hat{U}^\dagger \frac{\partial \hat{U}}{\partial t}}_b,$$

res para a parte a :

$$A \hat{U}^\dagger \hat{\sigma}_{gg} \hat{U}, \quad (4.71)$$

$$B \hat{U}^\dagger \hat{\sigma}_{ee} \hat{U}, \quad (4.72)$$

$$\gamma e^{i\omega t} \hat{U}^\dagger \hat{\sigma}_+ \hat{U}, \quad (4.73)$$

$$\gamma e^{-i\omega t} \hat{U}^\dagger \hat{\sigma}_- \hat{U}. \quad (4.74)$$

Utilizando a relação $e^{-A} B e^A = \left(B - [A, B] + \frac{[A, [A, B]]}{2!} + \dots \right)$, os termos ficam:

$$\hat{U}^\dagger \hat{\sigma}_{gg} \hat{U} = e^{-i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}} \hat{\sigma}_{gg} e^{i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}} = \hat{\sigma}_{gg} - \frac{i\omega t}{2} \underbrace{[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_{gg}]}_0 = \hat{\sigma}_{gg}, \quad (4.75)$$

$$\hat{U}^\dagger \hat{\sigma}_{ee} \hat{U} = e^{-i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}} \hat{\sigma}_{ee} e^{i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}} = \hat{\sigma}_{ee} - \frac{i\omega t}{2} \underbrace{[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_{ee}]}_0 = \hat{\sigma}_{ee}, \quad (4.76)$$

$$\begin{aligned}
\gamma e^{i\omega t} \hat{U}^\dagger \hat{\sigma}_+ \hat{U} &= e^{-i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}} \hat{\sigma}_+ e^{i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}} \\
&= \hat{\sigma}_+ - \frac{i\omega t}{2} \underbrace{[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_+]_{2\hat{\sigma}_+}} \\
&= \hat{\sigma}_+ [1 - i\omega t] = \gamma e^{i\omega t} \hat{\sigma}_+ e^{-i\omega t} = \gamma \hat{\sigma}_+, \tag{4.77}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\gamma e^{-i\omega t} \hat{U}^\dagger \hat{\sigma}_- \hat{U} &= e^{-i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}} \hat{\sigma}_- e^{i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}} = \hat{\sigma}_- - \frac{i\omega t}{2} \underbrace{[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_-]_{-2\hat{\sigma}_-}} \\
&= \hat{\sigma}_- [1 + i\omega t] = \gamma e^{-i\omega t} \hat{\sigma}_- e^{+i\omega t} = \gamma \hat{\sigma}_-. \tag{4.78}
\end{aligned}$$

Avaliando as relações de comutação entre os operadores nas equações 4.75, 4.76, 4.77 e 4.78, e em seguida substituindo esse resultado no hamiltoniano transformado teremos a seguinte expressão:

$$H_u = A \hat{\sigma}_{gg} + B \hat{\sigma}_{ee} + \gamma \hat{\sigma}_+ + \gamma \hat{\sigma}_- - i\hbar \hat{U}^\dagger \frac{\partial \hat{U}}{\partial t}, \tag{4.79}$$

onde o último termo é obtido a seguir:

$$\begin{aligned}
-i\hbar \hat{U}^\dagger \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} &= -i\hbar \hat{U}^\dagger \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}} \right), \\
-i\hbar \hat{U}^\dagger \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} &= -i\hbar e^{-i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}} (i\omega \frac{\hat{\sigma}_z}{2}) e^{i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}}, \\
-i\hbar \hat{U}^\dagger \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} &= \frac{-i^2 \omega \hbar}{2} \underbrace{e^{-i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}} \hat{\sigma}_z e^{i\omega t \frac{\hat{\sigma}_z}{2}}}_{\hat{\sigma}_z}, \\
&= \frac{\omega \hbar \hat{\sigma}_z}{2} = \frac{\omega \hbar}{2} (|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|). \tag{4.80}
\end{aligned}$$

Inserindo o último termo, podemos escrever o hamiltoniano transformado e em seguida fazer o cálculo da dinâmica. Vemos que essa transformação mantém o traço invariante de H , e acrescenta um termo contendo a frequência do campo externo nas energias do sistema. Pelo fato de estarmos em um referencial onde eliminamos o tempo das equações, temos em contrapartida esse deslocamento nas energias dos autoestados. Escrevendo então o hamiltoniano transformado:

$$H_u = A\hat{\sigma}_{gg} + B\hat{\sigma}_{ee} + \gamma\hat{\sigma}_+ + \gamma\hat{\sigma}_- - \underbrace{i\hbar\hat{U}^\dagger \frac{\partial \hat{U}}{\partial t}}_{\frac{\omega\hbar}{2}(|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|)}, \quad (4.81)$$

$$H_u = A\hat{\sigma}_{gg} + B\hat{\sigma}_{ee} + \gamma\hat{\sigma}_+ + \gamma\hat{\sigma}_- + \frac{\omega\hbar}{2}\hat{\sigma}_{ee} - \frac{\omega\hbar}{2}\hat{\sigma}_{gg}, \quad (4.82)$$

$$H_u = \left(A - \frac{\omega\hbar}{2}\right)\hat{\sigma}_{gg} + \left(\frac{\omega\hbar}{2} + B\right)\hat{\sigma}_{ee} + \gamma\hat{\sigma}_+ + \gamma\hat{\sigma}_-. \quad (4.83)$$

De forma explícita temos:

$$H_u = \begin{pmatrix} E_1 + \lambda_1\rho_{11} - \frac{\omega\hbar}{2} & \gamma \\ \gamma & E_2 + \lambda_2\rho_{22} + \frac{\omega\hbar}{2} \end{pmatrix}. \quad (4.84)$$

Devemos resolver a equação de Liouville-von-Neumann neste novo referencial e depois realizar a transformação inversa. Como a forma do hamiltoniano é idêntica aquela tratada nas seções anteriores, exceto pelo termo $\frac{\omega\hbar}{2}$, podemos integrá-las e retornar ao referencial anterior através da transformação inversa $\hat{U}\rho_u\hat{U}^\dagger$.

Uma transformação alternativa para eliminar a parte temporal das equações de movimento, é realizar uma transformação de ponto nas variáveis x e y na seguinte forma:

$$\begin{cases} x' = x \cos(\omega t) + y \sin(\omega t), \\ y' = -x \sin(\omega t) + y \cos(\omega t), \\ z' = z, \end{cases} \quad (4.85)$$

Dando sequência ao raciocínio, vamos calcular as derivadas:

$$\begin{cases} \dot{x}' = \dot{x} \cos(\omega t) + \dot{y} \sin(\omega t) - \omega x \sin(\omega t) + \omega y \cos(\omega t), \\ \dot{y}' = -\dot{x} \sin(\omega t) + \dot{y} \cos(\omega t) - \omega y \sin(\omega t) - \omega x \cos(\omega t), \\ \dot{z}' = \dot{z}. \end{cases} \quad (4.86)$$

Retornando às equações originais:

$$\begin{cases} \dot{x} = (a + bz)y + \gamma \sin(\omega t)(1 - 2z), \\ \dot{y} = \gamma \cos(\omega t)(2z - 1) - (a + bz)x, \\ \dot{z} = 2\gamma[x \sin(\omega t) - y \cos(\omega t)]. \end{cases} \quad (4.87)$$

Para x teremos a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \dot{x}' &= \dot{x} \cos(\omega t) + \dot{y} \sin(\omega t) - \underbrace{\omega x \sin(\omega t) + \omega y \cos(\omega t)}_{\omega y'}, \\ &= \dot{x} \cos(\omega t) + \dot{y} \sin(\omega t) + \omega y', \\ &= \cos(\omega t)((a + bz)y + \gamma \sin(\omega t)(1 - 2z)) + \\ &+ \sin(\omega t)(-\gamma \cos \omega t(1 - 2z) - (a + bz)x) + \omega y', \\ &= (a + bz)[-x \sin(\omega t) + y \cos(\omega t)] + \omega y', \\ &= (a + bz)y' + \omega y'. \end{aligned} \quad (4.88)$$

$$\boxed{\dot{x}' = (a + bz + \omega)y'}$$

Analogamente para y :

$$\begin{aligned}
 \dot{y}' &= -\dot{x} \sin(\omega t) + \dot{y} \cos(\omega t) - \underbrace{\omega y \sin(\omega t) - \omega x \cos(\omega t)}_{-\omega x'}, \\
 &= -\dot{x} \sin(\omega t) + \dot{y} \cos(\omega t) - \omega x', \\
 &= -\sin(\omega t)[(a + bz)y + \gamma \sin(\omega t)(1 - 2z)] + \\
 &+ \cos(\omega t)[- \gamma \cos(\omega t)(1 - 2z) - (a + bz)x] - \omega x', \\
 &= -y \sin(\omega t)(a + bz) - \gamma(1 - 2z) \sin(\omega t)^2 - \\
 &- \gamma(1 - 2z) \cos(\omega t)^2 - x(a + bz) \cos(\omega t) - \omega x', \\
 &= (a + bz) \underbrace{[-x \cos(\omega t) - y \sin(\omega t)]}_{-x'} - \gamma(1 - 2z) - \omega x', \\
 &= x'(-a - bz - \omega) - \gamma(1 - 2z).
 \end{aligned} \tag{4.89}$$

$$\boxed{\dot{y}' = x'(-a - bz - \omega) - \gamma(1 - 2z)}.$$

Podemos facilmente ver que o termo em z é dado por

$$\dot{z}' = -2\gamma y'.$$

Isso nos permite reescrever as equações de movimento na forma abaixo:

$$\boxed{\dot{x}' = (a + bz + \omega)y'}, \tag{4.90}$$

$$\boxed{\dot{y}' = x'(-a - bz - \omega) - \gamma(1 - 2z)}, \tag{4.91}$$

$$\boxed{\dot{z}' = -2\gamma y'}. \tag{4.92}$$

Essas equações são idênticas àquelas geradas através da transformação unitária apresentada no início desta seção. Ou seja, o efeito do campo oscilante é o deslocamento dos níveis de energia.

4.7 DIAGRAMA DE FASE E COMPORTAMENTO DINÂMICO DE Z PARA $\omega \neq 0$

Como demonstrado na seção anterior, a presença de um campo monocromático oscilante tem como efeito espessar os níveis de energia do sistema, entretanto, o comportamento dinâmico de $z(t)$ permanece matematicamente o mesmo, exceto, como mencionado, pela redefinição dos parâmetros do sistema. Nesse sentido, fenômenos de confinamento e supressão das oscilações de Rabi, observados na seção 4.5, repetem-se no caso de perturbação dinâmica. Já para o comportamento da coerência, o quadro é outro. Devido as equações de transformação 4.85, a periodicidade de $x(t)$ e $y(t)$ não é necessariamente a mesma que a periodicidade de $z(t)$. Esse efeito pode ser observado nas figuras 4.9 (a), 4.9 (b), 4.10 (a) e 4.10 (b) ou nas figuras 4.11 (a), 4.11 (b) e 4.14 (a) onde mostramos o comportamento do espaço de fase (z, \dot{z}) (curva fechada vermelha) e o diagrama de configuração $(\Re\rho_{12}, \Im\rho_{12})$ (curvas pretas). No caso do comportamento para tempos muito longos, nas figuras referidas anteriormente, obtivemos esses resultados resolvendo numericamente o conjunto de equações sem transformação eqs. 4.22, 4.23 e 4.24, sendo que os resultados são idênticos àqueles obtidos via solução da integral eq. 4.52. Continuando, o diagrama de configuração também mostra que o sistema não apresenta comportamento caótico, ou seja, as curvas de $(\Re\rho_{12}, \Im\rho_{12})$ são periódicas e fechadas, mesmo para valores de λ próximos do valor crítico.

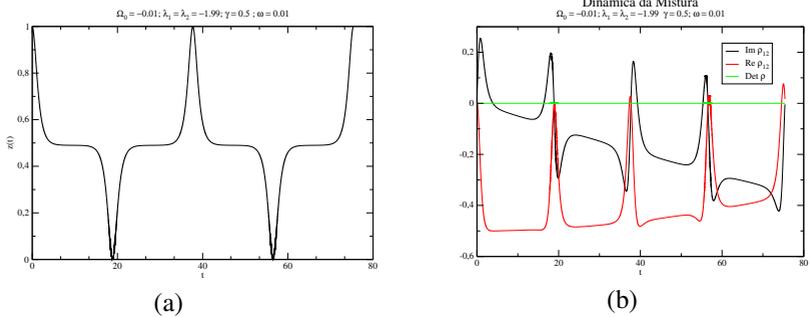


Figura 11: Para $\omega \neq 0$ também obtemos os regimes de auto-confinamento, na fig 4.9 (a) vemos um comportamento regular das populações que ficam aprisionadas em 0,5 por algum tempo. A dinâmica da coerência entretanto apresenta variações de amplitude no limite de t grande.

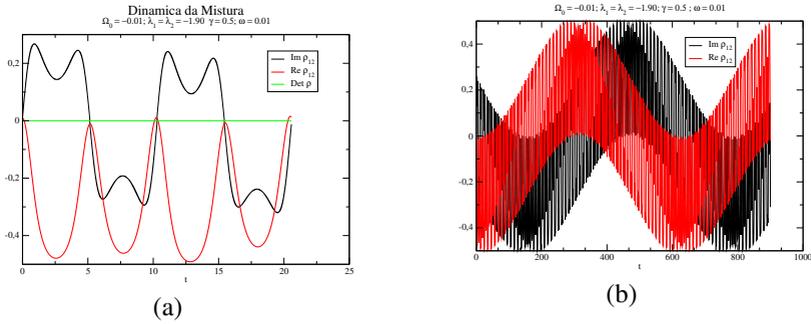


Figura 12: Dinâmica das coerências para o caso não degenerado, ressonante, na figura 4.10 (a) e o mesmo comportamento das partes real e imaginario da coerência para valores maiores de tempo na fig 4.10 (b)

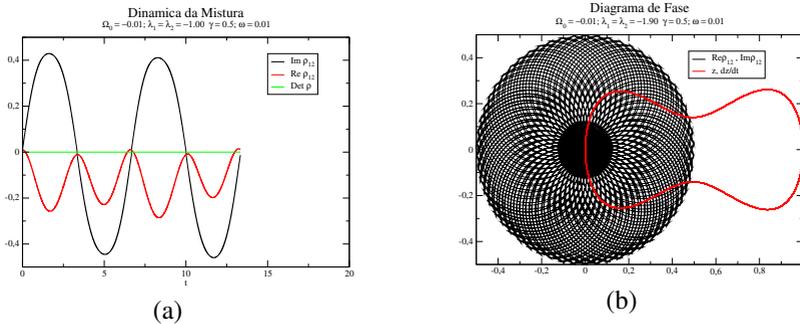


Figura 13: Em vermelho temos o diagrama de fase na fig 4.11 (g), as curvas pretas fechadas e harmônicas, na mesma figura, representam o diagrama de argant, ou seja, análise da parte real e imaginaria das coerências. Podemos ver que o sistema não apresenta comportamento caótico desse grafico, uma vez que as curvas são bem harmônicas.

4.8 ANÁLISE DA EVOLUÇÃO TEMPORAL DOS AUTOVALORES

Uma vez que estamos tratando de hamiltonianos dependentes do tempo um problema interessante é o de Landau-Zener, a seguinte descrição foi feita baseado em Nitzan[33]. O modelo de Landau-Zener (LZ), proposto independentemente por Clarence Zener e Lev Landau em 1932, é a base de um formalismo semi-clássico utilizado para descrever de maneira qualitativa o processo de transferência eletrônica. O modelo fornece uma solução analítica das equações que governam a dinâmica da transição eletrônica em sistemas

quânticos de dois níveis, sendo a dependência temporal do hamiltoniano expressa de maneira implícita por meio de um parâmetro R , onde o parâmetro R é uma função conhecida do tempo. No modelo de Landau-Zener, a dependência implícita caracteriza-se por atingir seu valor máximo no tempo $t=0$, onde $R(t=0)=R^*$, e as energias não perturbadas satisfazem a condição $E_a=E_b$. Para $t \rightarrow \pm\infty$, tem-se que $|E_a - E_b| \gg |V_{ab}|$.

Considera-se um sistema de dois níveis (e.g. reagente e produto) cujo hamiltoniano é expresso como a soma de um termo independente do tempo $\hat{H}_0(R)$ e o potencial de acoplamento \hat{V} , onde o parâmetro R é uma variável clássica, Sejam $|\varphi_a\rangle$ e $|\varphi_b\rangle$ os autoestados de $\hat{H}_0(R)$, e suas respectivas energias $E_a(R)$ e $E_b(R)$. O parâmetro R pode estar relacionado às coordenadas nucleares. A característica principal do problema de Landau-Zener é o cruzamento entre as superfícies $E_i(R)$ expresso como, $E_a(R^*)=E_b(R^*)$ ¹, para $R(t=0)=R^*$. Para $t \rightarrow \pm\infty$, $|E_a(R) - E_b(R)| \gg |V_{ab}|$. Em realidade os autoestados $|\varphi_a\rangle$, $|\varphi_b\rangle$ e V_{ab} podem depender do parâmetro R , mas essa dependência é considerada de carácter fraco ao estar limitada à pequena vizinhança de R^* , por este motivo assume-se como desprezível. Portanto a pergunta envolvida nesse modelo é: se o sistema achava-se no tempo ($t \rightarrow -\infty$) no estado $|\varphi_a\rangle$, então, qual é a probabilidade de finalizar no estado $|\varphi_b\rangle$ no tempo ($t \rightarrow \infty$)? Para achar a solução dessa pergunta, inicia-se representando o hamiltoniano de maneira matricial como,

$$\hat{H}(R) = \begin{pmatrix} E_a(R) & V_{a,b} \\ V_{b,a} & E_b(R) \end{pmatrix}; \quad V_{a,b} = V_{b,a} = \langle \varphi_a | \hat{V} | \varphi_b \rangle. \quad (4.93)$$

Fornecendo os autovalores,

$$E_{1,2}(R) = \frac{1}{2} \left[(E_a(R) + E_b(R)) \pm \sqrt{(E_a(R) - E_b(R))^2 + 4V_{a,b}^2} \right]. \quad (4.94)$$

Dependendo da intensidade do acoplamento, os níveis energéticos obtidos, $E_1(R)$ e $E_2(R)$, são de carácter adiabático, representando superfícies de energia sem cruzamento onde a separação entre elas depende da intensidade do acoplamento. Por outro lado, se a perturbação é suficientemente fraca, as superfícies energéticas apresentam comportamento semelhante aos cruzamentos dos estados estacionários $E_a(R)$ e $E_b(R)$, os quais correspondem à representação não adiabática. Em ambos os casos, ao sair da vizinhança de R^* o efeito de acoplamento $V_{a,b}$ é desprezível, e as representações adiabática e não adiabática são essencialmente idênticas, ver figura 4.15.

A dinâmica do sistema inicia, em $t \rightarrow -\infty$, no estado $|\varphi_a\rangle$, que é equi-

¹O subespaço definido por $R=R^*$ não necessariamente é um ponto no espaço, mas pode ser uma superfície de baixa dimensionalidade.

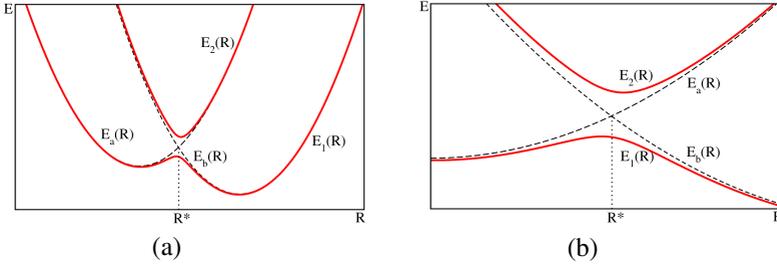


Figura 14: Esquema da descrição do problema de Landau-Zener. Dois estados quânticos e o acoplamento entre eles depende parametricamente da variável clássica R . As energias obtidas pela diagonalização do hamiltoniano (*adiabáticas*) para qualquer ponto R são, $E_1(R)$ e $E_2(R)$ (*vermelho*), e as energias (*não adiabáticas*) do hamiltoniano estacionário $E_a(R)$, $E_b(R)$ (*preto*).

valente a $|\varphi_1\rangle$, movendo-se na superfície de potencial $E_a(R)$ equivalente a $E_1(R)$.

A descrição da evolução temporal depende da representação a usar, porque para cada ponto R o estado do sistema acha-se expresso pelas combinações lineares,

$$|\Psi(t)\rangle = C_1(t)|\psi_1\rangle + C_2(t)|\psi_2\rangle = C_a(t)|\varphi_a\rangle + C_b(t)|\varphi_b\rangle, \quad (4.95)$$

sendo $|C_1(t)|^2 + |C_2(t)|^2 = 1$, $|C_a(t)|^2 + |C_b(t)|^2 = 1$, além de $|C_a(t \rightarrow -\infty)|^2 = |C_1(t \rightarrow -\infty)|^2 = 1$. Durante o cruzamento $E_a(R^*) = E_b(R^*)$, há duas possibilidades para a dinâmica do sistema. O elétron pode permanecer no mesmo estado não-adiabático (também denominado *diabático*), com probabilidade $P_{a \rightarrow a}$, o que equivale a realizar uma transição eletrônica entre estados adiabáticos, com probabilidade $P_{1 \rightarrow 2}$. Ao final deste processo teremos $|C_a(t \rightarrow \infty)| = |C_2(t \rightarrow \infty)|$. Também é possível ocorrer o contrário, $|C_b(t \rightarrow \infty)| = |C_1(t \rightarrow \infty)|$, com probabilidade $P_{a \rightarrow b}$ de mudança de estado não adiabático, ou $P_{1 \rightarrow 1}$ para permanecer na mesma superfície adiabática. A solução aproximada do problema é dada pelo modelo de Landau-Zener

$$P_{1 \rightarrow 1} = P_{a \rightarrow b} = 1 - \exp \left[\frac{-2\pi |V_{a,b}|^2}{\hbar |(d/dt)(E_a(R) - E_b(R))|} \right]_{R^*}, \quad (4.96)$$

sendo a dependência temporal dos estados $|\varphi_a\rangle$ e $|\varphi_b\rangle$ está dada por R , com

$$\frac{d}{dt}(E_a(R) - E_b(R)) = \dot{R}|F_b - F_a|, \quad (4.97)$$

onde \dot{R} a velocidade nuclear e $F_i = -\partial E_i / \partial R$ é a força do sistema na superfície de potencial E_i . Todas as quantidade são calculadas no ponto de cruzamento R^* .

Um caso limite da probabilidade (4.96) é dado pela condição de um acoplamento fraco aliado a uma alta velocidade, $2\pi|V_{a,b}| \ll \hbar\dot{R}|F_b - F_a|$, resultando em,

$$P_{1 \rightarrow 1} = P_{a \rightarrow b} = \left[\frac{2\pi|V_{a,b}|^2}{\hbar\dot{R}|F_b - F_a|} \right]_{R^*}. \quad (4.98)$$

Nesta condição, a probabilidade de permanecer sobre a mesma superfície adiabática 1 é muito baixa, isso é conhecido como *limite não adiabático do problema LZLZ* Landau-Zener. Na situação anterior o sistema permanece na mesma superfície *diabática*.

No limite oposto, em que o acoplamento é forte e a velocidade baixa, a probabilidade de permanecer no mesmo estado adiabático é $P_{1 \rightarrow 1} = P_{a \rightarrow b} = 1$, portanto, o sistema move-se adiabaticamente sobre a mesma superfície de potencial.

Analisando o nosso problema sob essa perspectiva, vamos diagonalizar o hamiltoniano, obtendo seus respectivos autovalores, através da equação característica:

$$\det(H - \delta) = 0. \quad (4.99)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \delta^2 - \delta(E_1 + E_2 + \rho_{11}\lambda_1 + \rho_{22}\lambda_2) + \\ + E_1E_2 + E_1\lambda_2\rho_{22} + E_2\lambda_1\rho_{11} + \lambda_1\lambda_2\rho_{11}\rho_{22} - \gamma^2 = 0 \end{aligned} \quad (4.100)$$

e os autovalores são:

$$\left(\begin{array}{l} \delta_1 = \frac{1}{2}[\lambda_2\rho_{22} + \lambda_1\rho_{11} + E_1 + E_2] + \frac{1}{2}\Delta \\ \delta_2 = \frac{1}{2}[\lambda_2\rho_{22} + \lambda_1\rho_{11} + E_1 + E_2] - \frac{1}{2}\Delta \end{array} \right), \quad (4.101)$$

onde

$$\begin{aligned} \Delta = [(E_2 + \lambda_2\rho_{22})^2 - 2E_2E_1 - 2E_2\lambda_1\rho_{11} - 2\lambda_2\rho_{22}E_1 - \\ - 2\lambda_1\lambda_2\rho_{11}\rho_{22} + (E_1 + \lambda_1\rho_{11})^2 + 4\gamma^2]^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.102)$$

A expressão acima pode ser escrita de maneira mais compacta:

$$\Delta = \sqrt{[(E_2 + \lambda_2\rho_{22}) - (E_1 + \lambda_1\rho_{11})]^2 + 4\gamma^2}. \quad (4.103)$$

Podemos observar o comportamento de δ_n ($n = 1, 2$), que são os autovalores do hamiltoniano correspondendo as quasi-energias, evoluindo no tempo uma vez que já conhecemos $\rho(t)$. Dessa forma a simples diagonalização do hamiltoniano nos leva ao não-cruzamento dos estados, de forma que temos uma evolução adiabática. Entretanto, quando fazemos a diagonalização do hamiltoniano não perturbado, e em seguida somamos o termo $\lambda_n \rho_{nn}$ nos estados, isso faz com que os níveis se cruzem. A análise do termo $\delta_n(\lambda_n = 0) + \lambda_n \rho_{nn}$, o qual chamamos de energia diabática do sistema, corresponde às linhas azul e verde da figura 4.16. Fazendo o nosso parâmetro não-linear igual a zero resgatamos um sistema de dois níveis sujeito a uma perturbação externa que podemos descrever da seguinte maneira:

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & W \\ W^* & E_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & W \\ W^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.104)$$

Aqui podemos seguir uma discussão a respeito de transições adiabática assim como a verificação teorema de separação de níveis (Non-Crossing Theorem). Diagonalizando esse hamiltoniano geral obtemos:

$$E_{\pm} = \frac{E_1 + E_2 \pm \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4W^2}}{2}, \quad (4.105)$$

na qual W garante a maior separação dos níveis quanto maior o seu valor. Se a perturbação tende a zero os níveis tendem a se aproximarem, a dinâmica desse sistema evolui e a transição entre as populações é proporcional a frequência de Rabi:

$$\Omega_R = \frac{1}{\hbar} \sqrt{(E_1 - E_2) + 4|W|^2}. \quad (4.106)$$

Em nosso sistema também obtemos o mesmo comportamento onde os níveis se mostram mais separados conforme aumentamos a intensidade da perturbação:

Por última temos a verificação do cruzamento de níveis para dinâmica não-adiabática, os gráficos abaixo mostram diferentes valores de parâmetros a evolução temporal dos autovalores:

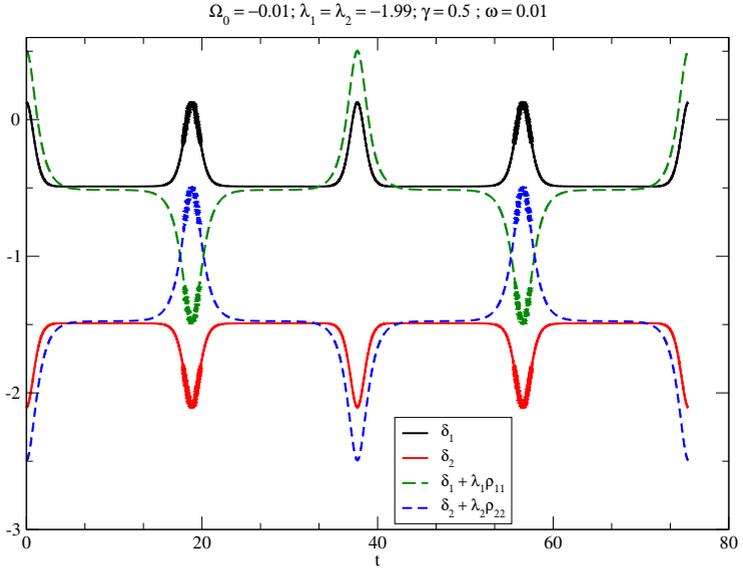


Figura 15: Evolução temporal dos autovalores 1

5 DISSIPACÃO

Sistemas de dois níveis são frequentemente utilizados para descrever em alguma aproximação o comportamento de diversos modelos em física de estado sólido. Vários sistemas têm sido estudados nessa aproximação tais como pólarons em sistemas moleculares[34, 35, 36, 37, 38]. Entretanto sistemas quânticos interagem com o ambiente no qual estão inseridos. Neste capítulo buscamos introduzir a presença do ambiente através de dissipação no sistema de dois níveis. A descrição de sistemas de dois níveis dissipativos pode modelar uma grande variedade de fenômenos na física e química. Temos, por exemplo, sistemas de partículas de spin meio interagindo com um banho térmico na presença de ressonância magnética de spin e relaxação[39], tunelamento de hidrogênio em meios condensados[40], experimentos com fios de Bismuto(Bi) têm medido as taxas de transição de sistemas de dois níveis acoplados com elétrons de condução[41, 42]. A inserção de dissipação na modelagem teórica é uma maneira de explicar fenômenos que acontecem devido as correlações com o meio ambiente, como por exemplo, o papel de decaimentos nas oscilações de Rabi forçadas em junções Josephson[43].

5.1 MODELO

Tipicamente a descrição de sistema quânticos abertos é feito através dos superoperadores de Lindblad que pressupõe a aproximação de Markov e fraco acoplamento entre o meio e o sistema[44]. Trabalhos pioneiros nesse tipo de descrição foram feitos por Bloch[45], Redfield[46] e Fano[47]. O tratamento feito por Kosugi e colaboradores [43] modela o ambiente, ou reservatório, como um conjunto de osciladores harmônicos, onde o hamiltoniano do banho é dado por

$$H^b = \sum_{\alpha} \left(\frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2}{2} \right),$$

acoplado ao sistema de n-níveis, cujo hamiltoniano é:

$$H^s = \sum_n |n\rangle E_n \langle n|.$$

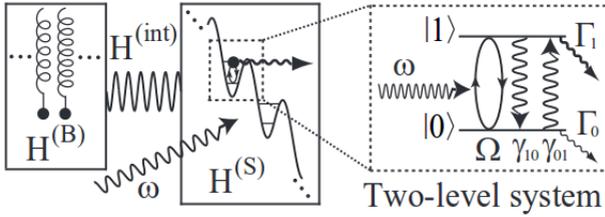


Figura 16: Sistema de dois níveis acoplado ao banho de osciladores harmônicos, retirado de [43].

Nesse modelo, então, temos n níveis quânticos, sendo um subsistema de dois níveis e os demais $n - 2$ níveis correspondentes ao ambiente. Assim, para determinar a dinâmica do sistema de dois níveis, é adicionado um novo termo à equação LVN que será responsável pelo acoplamento do sistema com o banho

$$i\hbar\dot{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] + i\hbar[\hat{R}\hat{\rho}(t)]. \quad (5.1)$$

O segundo termo então pode ser entendido como responsável pela dissipação no sistema, e possui a seguinte forma:

$$[\hat{R}\hat{\rho}(t)]_{\alpha\alpha} = -\Gamma_{\alpha}\rho_{\alpha\alpha} + (-1)^{\alpha}\gamma_{0}\rho_{11},$$

onde

$$[\hat{R}\hat{\rho}(t)]_{\alpha\beta} = -\Gamma\rho_{\alpha\beta}.$$

De forma explícita isso representa a seguinte matriz:

$$i\hbar[\hat{R}\hat{\rho}(t)] = i\hbar \begin{pmatrix} -\Gamma_1\rho_{11} - \gamma_0\rho_{11} & -\Gamma\rho_{12} \\ -\Gamma\rho_{21} & -\Gamma_2\rho_{22} + \gamma_0\rho_{11} \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

onde $\Gamma = \frac{\Gamma_1 + \Gamma_2 + \gamma_0}{2} + \gamma_{\phi}$, sendo Γ_1 a taxa de decaimento do estado 1 para o ambiente, Γ_2 a taxa com que o estado 2 pode decair para o meio, γ_0 é a taxa de transição entre os estados e o último termo, γ_{ϕ} , é responsável pelo alargamento dos níveis de energia do sistema de dois níveis devido a interação com ambiente (*dephasing*). Por simplicidade, no tratamento apresentado nessa dissertação, iremos utilizar apenas o termo de *dephasing* $\Gamma = \gamma_{\phi}$ diferente de zero. Ou seja, não existe possibilidade de decaimento espontâneo entre os estados, nem dos estados fundamental e excitado para o ambiente. No trata-

mento apresentado em [43] o traço de $\hat{\rho}$ não é preservado devido justamente a possibilidade de decaimento do nível mais baixo de energia do sistema de dois níveis para o ambiente. Para manter a estrutura geral do modelo em que estamos trabalhando, utilizaremos apenas o termo γ_φ . Desse modo, o nosso termo dissipativo torna-se:

$$i\hbar[\hat{R}\hat{\rho}(t)] = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -\gamma_\varphi\rho_{12} \\ -\gamma_\varphi\rho_{21} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

As equações diferenciais com o termo γ_φ ficam da seguinte forma:

$$\dot{z} = 2\gamma[x\sin(\omega t) - y\cos(\omega t)] - z\gamma_\varphi, \quad (5.4)$$

$$\dot{x} = y[\Omega + \lambda_1 z - \lambda_2(1 - z)] - x\gamma_\varphi + \gamma\sin(\omega t)[1 - 2z], \quad (5.5)$$

$$\dot{y} = x[-\Omega - \lambda_1 z + \lambda_2(1 - z)] - y\gamma_\varphi - \gamma\cos(\omega t)[1 - 2z]. \quad (5.6)$$

A simples presença desse novo termo não nos permitiu, até o presente momento, encontrar uma solução separável na forma integral para o modelo. A existência ou não de soluções desse tipo deverá ser objeto de estudo futuramente. Assim, os resultados apresentados a seguir foram obtidos via solução numérica direta das equações 5.4, 5.5 e 5.6.

Como comentário geral, na ausência de não-linearidades o sistema evolui conforme mostrado nas figuras 5.2 (a) e 5.2 (b). O efeito do termo de dissipação consiste em levar as populações a uma mistura aleatória, ou seja $\rho_{11} = \rho_{22} = 0.5$ e os termos da mistura igual a zero em um tempo que depende basicamente da intensidade de γ_φ . O papel do termo de acoplamento γ (campo-sistema) é aumentar a frequência das oscilações de Rabi. Nas próximas seções vamos analisar o papel da não-linearidade no sistema dissipativo.

5.2 ESTADO QUASE DEGENERADO

Nas figuras 5.3 (a), 5.3 (b), 5.4 (a) e 5.4 (b) apresentamos resultados para o sistema quase degenerado com frequência do campo em ressonância para dois valores distintos de λ . A presença de não linearidades suprime parte das oscilações e retarda o tempo de perda coerência do sistema conforme aumentamos o seu valor. Ainda não está claro para nós se esse efeito vêm de uma simples mudança da escala de tempo do sistema ou se a não-linearidade

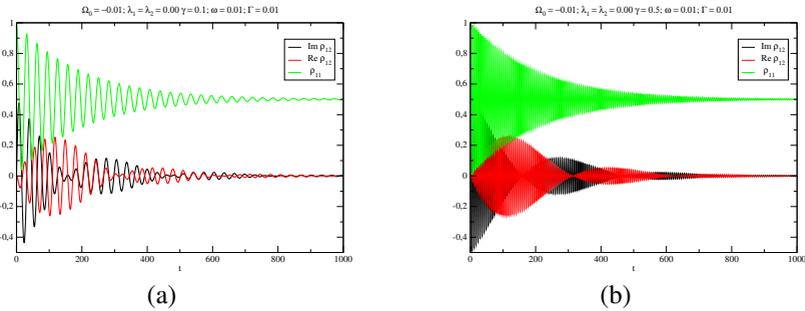


Figura 17: Dinâmica das coerências, na presença de termos dissipativos, para estados quase-degenerados, onde há a variação do termo de acoplamento entre o campo e o sistema.

suprime a dissipação por algum mecanismo físico qualquer.

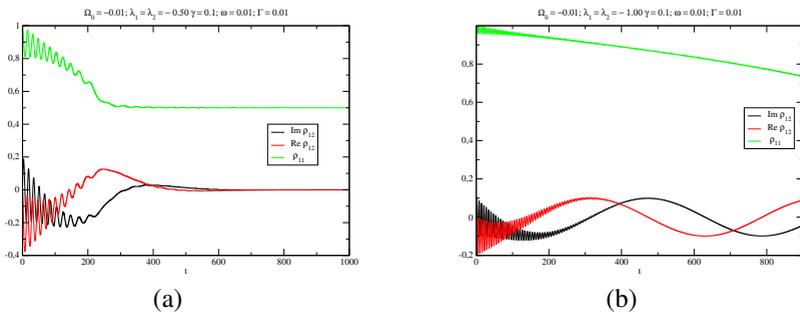
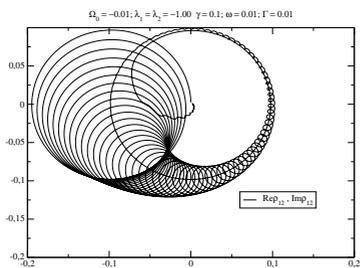
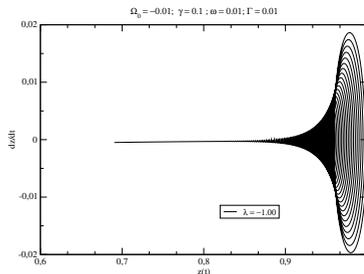


Figura 18: Podemos observar o efeito do termo dissipativo nas figuras 5.3 (a) e 5.3 (b), vemos que as oscilações ocorrem no início da dinâmica e são suprimidas, entretanto o sistema tende ao valor de máxima entropia (curvas verde) ao final da dinâmica devido ao termo de dephasing, ao passo que as coerências tendem a zero (curvas preta e vermelha).

Diagramas de configuração:



(a)



(b)

Figura 19: Um caso peculiar pode ser observado na figura 5.4 (a). A dinâmica da coerência acontece de modo a executar dois regimes dinâmicos distintos. Inicialmente, parte de zero, e executa as oscilações perdendo amplitude através das espirais observadas no gráfico. Em seguida temos o sistema se comporta percorrendo uma oscilação longa até tender a zero. Na figura 5.4 (b) representa o gráfico para o diagrama de fases.

Um caso interessante ocorre quando o parâmetro não linear é alto em comparação com a diferença de energia entre os estados. Nessa circunstância a dinâmica realiza-se em dois regimes bem distintos. No intervalo de tempo inicial curto, a coerência do sistema, que inicialmente é nula, oscila rapidamente e a ação da dissipação é nitidamente intensa. A amplitude das partes real e imaginária da coerência decresce de maneira exponencial, mas não para o limite zero. Isso pode ser observado claramente nos diagramas de configuração nas figuras 5.4 (a) e 5.6 (a). Esse primeiro regime corresponde a espiral do lado esquerdo dessas figuras. Posteriormente, durante a maior parte da evolução o sistema passa para um segundo regime, representado nas mesmas figuras pela circunferência do lado direito o que corresponde a oscilações perfeitamente harmônicas. Por fim, em um intervalo de tempo muito curto, comparado a dinâmica completa, a mistura colapsa para zero. Durante todos esses ciclos, o comportamento das populações é basicamente monotônico, e a perda de coerência ocorre no instante em que a população do estado fundamental atinge um valor menor do que 0,5. Isso pode ser observado nas figuras 5.5 (a) e 5.3 (b).

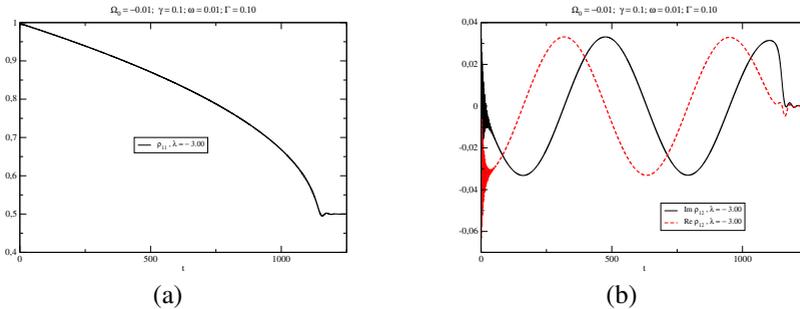


Figura 20: Nesse gráfico apresentamos uma forte presença de não-linearidade o que podemos observar na fig 5.5 (a) que não apresenta oscilações, devido ao valor de λ e decai ligeiramente ao valor de máxima mistura devido ao termo de dissipação. O gráfico 5.5 (b) corresponde a dinâmica da fig 5.4 (a) onde a primeira parcela da dinâmica está relacionada às oscilações com perda de amplitude sendo seguida das oscilações mais longas no tempo.

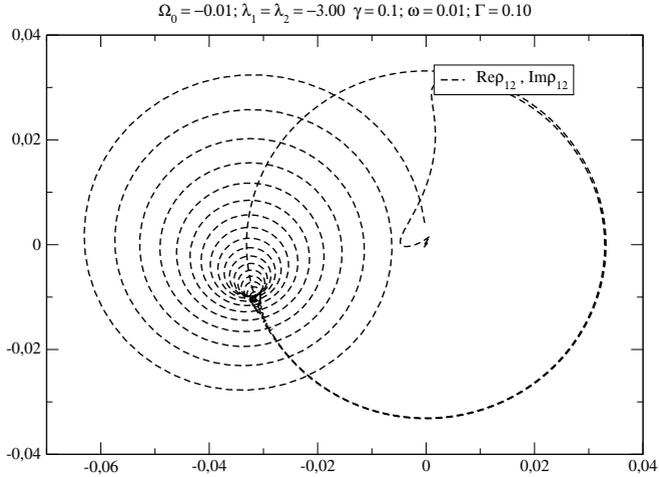


Figura 21: Diagrama de Argant para caso em que o sistema percorre dois regimes dinâmicos distintos.

Nas figuras 5.7 e 5.8 apresentamos um quadro comparativo das dinâmicas para diversos valores do parâmetro λ . Na figura 5.7 o termo de dissipação possui o mesmo valor da diferença de energia dos estados. Partindo de $\lambda = 0$, regime no qual não há não-linearidade, o sistema oscila decaindo exponencialmente devido ao termo dissipativo. Esse regime pode ser comparado a um oscilador harmônico no regime sub-amortecido. Conforme aumentamos valores de λ o sistema suprime cada vez mais as oscilações e retarda o tempo com que se atinge o estado de máxima mistura. Na figura 5.8 é apresentado o mesmo quadro para um valor de dissipação 10 vezes mais intenso, que faz com que o estado atinja um estado de mistura aleatória muito mais rápido. Nesse regime o sistema se comporta basicamente como um oscilador super-amortecido.

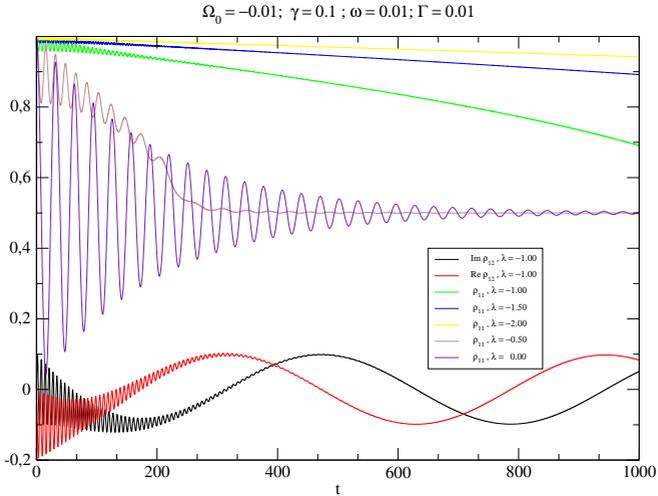


Figura 22: Dinâmica de população para diferentes valores de λ , a curva roxa corresponde a $\lambda = 0$ e podemos observar as oscilações de rabi que são amortecidas pelo termo de dissipação, conforme aumentamos os valores de não-linearidade as oscilações são suprimidas e tendem ao valor de máxima mistura. As curvas preta e vermelha correspondem às partes real e imaginária da coerência para $\lambda = 0$

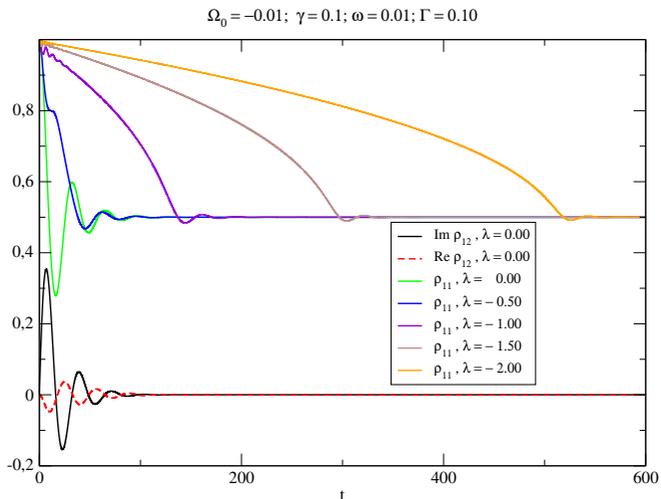


Figura 23: dinâmica de população e mistura sob forte dissipação

Apesar de termos apresentado apenas o caso quase degenerado, no regime dissipativo, o comportamento do sistema é análogo quando os níveis de energia são mais espaçados. Omitiremos aqui uma série de simulações realizadas com uma gama muito grande de parâmetros para não sobrecarregar o leitor.

6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Nesta dissertação estudamos a interação de um sistema de dois níveis na presença de um campo eletromagnético externo, perturbado nos termos diagonais por um fator não linear. Consideramos o termo perturbativo como sendo a densidade de carga do sistema de modo que esse tipo de perturbação gera equações de movimento não linear. A resolução do sistema foi feita através da Equação de Lioville-von-Neumann, e o conjunto de equações diferenciais acopladas foi reduzido a uma forma integrável para sistemas sem dissipação.

A principal motivação deste trabalho partiu da análise de dinâmica de carga em sistemas moleculares, onde havia a presença de carga local como perturbação. Fisicamente, a presença de carga em alguma região da molécula proporciona uma polarização da mesma. Essa polarização leva à regimes de auto-confinamento, que podem ser reproduzidos a partir da equação de auto-confinamento discreta. Verificamos, estudando essa equação, que a não-linearidade gerada pelo termo $\lambda\rho$ faz com que o sistema de equações tenha uma forte dependência das condições iniciais. No contexto de células solares, a dinâmica de separação de carga dirigida por foto excitação faz com que a carga seja excitada para um orbital molecular gerando um par elétron-buraco, entretanto esse par pode se recombinar emitindo fóton, assim não temos acesso ao elétron excitado. Portanto, um longo tempo de estado de carga separada é ideal para o transporte em células solares, que pode ser observado com a inclusão de um potencial não-linear em [4] e que conseguimos mostrar neste trabalho através do regime de auto-confinamento presente na dinâmica para alguma configuração dos valores de parâmetros. A forte dependência das condições iniciais pode ser visualizada do seguinte ponto de vista: a presença de carga na diagonal principal sob a ação do campo externo faz com que no tempo inicial já exista uma certa perturbação de carga local agindo no sistema, por isso temos que obrigar as equações a permanecer no domínio entre 0 e 1.

Para trabalhos futuros pretendemos descrever a dissipação com modelos mais robustos, trabalhar com um sistemas de mais níveis e investigar a possibilidade de existência de caos na dinâmica das equações uma vez que encontramos para valores altos de dephasing diagramas como o da figura abaixo.

Como perspectiva futura, buscamos também entender melhor, do ponto de vista físico, o que representam os cruzamentos na dinâmica diabática assim como encontrar mais sistemas na natureza que possam ser descritos pela nossa abordagem. Pretendemos investigar a presença de caos em óptica

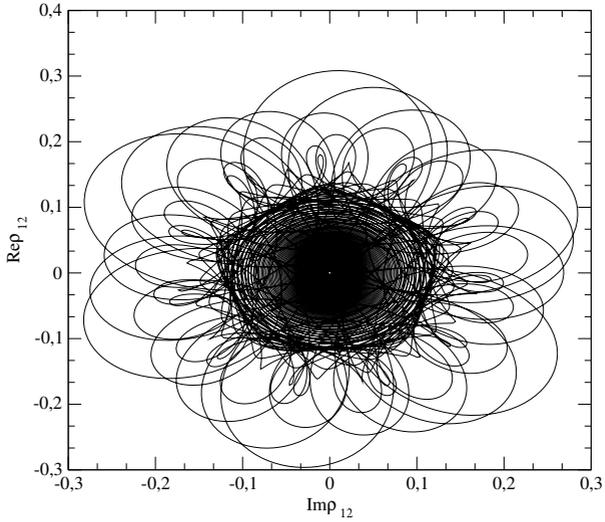


Figura 24: Diagrama de Argant representando uma possibilidade de assinatura de Caos no sistema quando sujeito a valores grandes de *dephasing*.

quântica não-linear, uma vez que *Bajer*[53] mostra que os diagramas de configuração para sistemas não-lineares em estudos envolvendo controle de fótons é muito próximo da Fig. 6.1 que encontramos em nosso sistema.

APÊNDICE A – Hamiltoniano de acoplamento mínimo

Neste apêndice será demonstrado o hamiltoniano de acoplamento mínimo. Dentro da formulação variacional, podemos definir um funcional chamado *ação* como

$$\boxed{S[q_k] = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q_k, \dot{q}_k, t)}, \quad (\text{A.1})$$

onde a função $L(q, \dot{q}, t)$ é a *Lagrangiana* do sistema e q as coordenadas generalizadas. Segundo ainda o princípio de Hamilton, dentre todas as infinitas trajetórias possíveis de evolução do sistema, a trajetória *física* será aquela para a qual a variação da ação seja zero

$$\boxed{\delta S[q_k] = 0}, \quad (\text{A.2})$$

onde a variação de uma coordenada generalizada δq_k é dada por

$$\delta q_k(t) = q_k^*(t) - q_k(t). \quad (\text{A.3})$$

Além disso, $q_k^*(t)$ representa uma trajetória “teste” e $q_k(t)$ uma trajetória física. Temos ainda que para os instantes inicial e final

$$\delta q_k(t_1) = \delta q_k(t_2) = 0. \quad (\text{A.4})$$

Isto implica que *todas* as trajetórias começam e terminam no mesmo ponto. Tendo em vista o princípio de Hamilton, podemos obter as equações de movimento que regem o sistema:

$$\begin{aligned} \delta S[q_k] &= \int_{t_1}^{t_2} dt \delta L = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_k \left(\frac{\partial L}{\partial q_k} \delta q_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta \dot{q}_k \right) = 0 \\ \delta \dot{q}_k &= \frac{d}{dt} \delta q_k \longrightarrow \delta S[q_k] = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_k \left(\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \delta q_k = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$\boxed{\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) = 0}$$

Estas equações são as chamadas *equações de Euler-Lagrange*. Para campos, ao invés de N graus de liberdade, agora temos ∞ graus de liberdade. Enquanto que para partículas podemos escrever a Lagrangiana generalizada como

$$L = \sum_{i,j=1}^{N=3n} \left[\frac{1}{2} M_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j - \frac{1}{2} K_{ij} q_i q_j \right]$$

em teoria de campos estes índices se tornam contínuos, de modo que agora temos

$$\Sigma \rightarrow \int d^3x$$

então

$$L = \int d^3x \mathcal{L}(u_\mu, \partial_\nu u_\mu, x^\alpha) \quad (\text{A.6})$$

onde \mathcal{L} é chamada *densidade de Lagrangiana*. Nesta notação, a ação é

$$S[u_\mu] = \int dt \int d^3x \mathcal{L} = \frac{1}{c} \int c dt \int d^3x \mathcal{L} = \frac{1}{c} \int d^4x \mathcal{L} \equiv \int d^4\xi \sqrt{-g} \mathcal{L} \quad (\text{A.7})$$

onde na última passagem, redefinimos $\mathcal{L} \equiv \mathcal{L}/c$. Logo o princípio de Hamilton para campos pode ser escrito como

$$\delta S[u_\mu] = \int d^4x \delta \mathcal{L} = \int d^4\xi \sqrt{-g} \delta \mathcal{L} = 0 \quad (\text{A.8})$$

Temos ainda a seguinte propriedade que será útil

$$\begin{aligned} \delta u_\mu &\equiv u_\mu^* - u_\mu \quad ; \quad \delta(\partial_\nu u_\mu) = \partial_\nu u_\mu^* - \partial_\nu u_\mu \\ \partial_\nu(\delta u_\mu) &= \partial_\nu u_\mu^* - \partial_\nu u_\mu \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$$\delta(\partial_\nu u_\mu) = \partial_\nu(\delta u_\mu)$$

De forma análoga a antes, podemos escrever as equações de Euler-Lagrange para campos a partir de (A.8). Integrando a densidade de lagrangiana numa região Ω que evolui no tempo

$$\begin{aligned}
\delta S[u_\mu] &= \int_{\Omega} d^4 \xi \sqrt{-g} \delta \mathcal{L} \\
&= \int d^4 \xi \sqrt{-g} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_\mu} \delta u_\mu + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\nu u_\mu)} \delta (\partial_\nu u_\mu) \right] \\
&= \int_{\Omega} d^4 \xi \partial_\nu \left[\sqrt{-g} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\nu u_\mu)} \delta u_\mu \right] \\
&+ \int_{\Omega} d^4 \xi \left[\sqrt{-g} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_\mu} - \partial_\nu \left(\sqrt{-g} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\nu u_\mu)} \right) \right] \delta u_\mu \\
&= \oint_{\partial \Omega} dS_\mu \left[\sqrt{-g} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\nu u_\mu)} \delta u_\mu \right] \\
&+ \int_{\Omega} d^4 \xi \sqrt{-g} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_\mu} - \frac{1}{\sqrt{-g}} \partial_\nu \left(\sqrt{-g} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\nu u_\mu)} \right) \right] \delta u_\mu \quad (\text{A.10})
\end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_\mu} - \frac{1}{\sqrt{-g}} \partial_\nu \left(\sqrt{-g} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\nu u_\mu)} \right) = 0} \quad (\text{A.11})$$

No espaço de Minkowski onde $\sqrt{-g} = 1$, pode ainda ser escrita como

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_\mu} - \partial_\nu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\nu u_\mu)} \right) = 0} \quad (\text{A.12})$$

Se tivermos $u_\mu = A_\mu$ onde A_μ é o quadripotencial do campo, podemos construir a Lagrangiana do campo eletromagnético e, obter as equações de Maxwell. Definindo

$$S[A_\mu] = S_{int}[A_\mu] + S_{campo}[A_\mu]$$

Temos

$$S_{int} = \int d^4 x \mathcal{L}_{int} \quad \boxed{\mathcal{L}_{int} = -\frac{1}{c^2} A_\mu J^\mu} \quad (\text{A.13})$$

\mathcal{L}_{campo} deve ser invariante por transformação de calibre. Conhecemos dois invariantes que satisfazem isto, mas só um deles funcionaria, pois

$$F_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu} = (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) \tilde{F}^{\mu\nu} = 2\partial_\mu A_\nu \tilde{F}^{\mu\nu} = 2[\partial_\mu (A_\nu \tilde{F}^{\mu\nu}) - A_\nu \partial_\mu \tilde{F}^{\mu\nu}]$$

Onde o termo cancelado é zero pois é uma das equações de Maxwell. No entanto, não podemos usar este invariante, pois integrando esta equação o teorema de Gauss faria surgir um divergente, o que quebraria a invariabilidade. Temos então que

$$\mathcal{L}_{campo} \propto F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \Rightarrow \boxed{\mathcal{L}_{campo} = -\frac{1}{16\pi c}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}} \quad (\text{A.14})$$

Do princípio de Hamilton

$$\delta S = \int d^4x [\delta \mathcal{L}_{int} + \delta \mathcal{L}_{campo}] = 0$$

$$\boxed{\delta \mathcal{L}_{int} = -\frac{1}{c^2}J^\mu \delta A_\mu} \quad (\text{A.15})$$

Finalmente,

$$\begin{aligned} \delta S &= \int d^4x \left[-\frac{1}{c^2}J^\nu \delta A_\nu - \frac{1}{4\pi c}F^{\mu\nu} \partial_\mu (\delta A_\nu) \right] = \\ &= -\frac{1}{4\pi c} \int d^4x \partial_\mu (F^{\mu\nu} \delta A_\nu) + \frac{1}{4\pi c} \int d^4x \left[\partial_\mu F^{\mu\nu} - \frac{4\pi}{c}J^\nu \right] \delta A_\nu = 0 \\ &\qquad \qquad \qquad \delta A_\nu \neq 0 \quad \boxed{\partial_\mu F^{\mu\nu} = \frac{4\pi}{c}J^\nu} \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Onde o termo cortado fora cortado por que, ao integrar com o teorema de Gauss, trocamos a integral volumétrica por uma integral na borda, e $\delta A_\nu \equiv 0$ na borda. Deste modo, recuperamos as equações de Maxwell.

Partícula carregada em campo eletromagnético

Separando a ação em duas partes

$$S = S_{particula} + S_{interacao}$$

S_{int} é fácil de calcular:

$$\begin{aligned} S_{int} &= -\frac{1}{c^2} \int_{\Omega} d^4x' A_{\mu}(x') J^{\mu}(x') = \\ J^{\mu}(x') &= ec \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \frac{dx^{\mu}}{d\tau} \delta^4(x' - x(\tau)) = \\ S_{int} &= -\frac{e}{c} \int_{\Omega} d^4x' \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \frac{dx^{\mu}}{d\tau} \delta^4(x' - x(\tau)) A_{\mu}(x') = \\ &= -\frac{e}{c} \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \frac{dx^{\mu}}{d\tau} A_{\mu}(x(\tau)) = \\ &= -\frac{e}{c} \int_{x_1}^{x_2} A_{\mu} dx^{\mu} \Rightarrow \boxed{S_{int} = -\frac{e}{c} \int_{x_1}^{x_2} A_{\mu} dx^{\mu}} \end{aligned}$$

A outra parte da ação pode ser construída a partir de valores invariantes. Usamos para isso escalares de Lorentz. Na mecânica não-relativística temos que

$$S_{part} = \int_{t_1}^{t_2} L dt$$

Já que $dt = \gamma(\tau) d\tau$, podemos reescrever a equação acima como

$$S_{part} = \int_{\tau_1}^{\tau_2} L \gamma(\tau) d\tau \quad (\text{A.17})$$

Uma vez que $cd\tau = \sqrt{dS^2}$ é invariante, precisamos que $L\gamma(\tau)$ também seja invariante. Fazendo $L\gamma = \alpha$, temos que

$$L = \frac{\alpha}{\gamma} = \alpha \sqrt{1 - \beta^2} \longrightarrow L = \alpha \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (\text{A.18})$$

No caso não-relativístico, $v \ll c$ e $L = \frac{mv^2}{2}$. Quando $v \ll c$ podemos expandir

a raiz

$$L \simeq \alpha - \frac{\alpha v^2}{2c^2} + \mathcal{O}\left(\frac{v^4}{c^4}\right) = \frac{mv^2}{2} + cte \quad (\text{A.19})$$

Como, dentro das equações de movimento, a lagrangiana aparece sendo atuada por uma derivada, podemos eliminar a constante do primeiro termo da expansão. Logo

$$L = -\frac{\alpha v^2}{2c^2} = \frac{mv^2}{2} \boxed{\alpha = -mc^2} \quad (\text{A.20})$$

Temos então que

$$S_{part} = -mc^2 \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \quad (\text{A.21})$$

e

$$\boxed{S = -mc^2 \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau - \frac{e}{c} \int_{x_1}^{x_2} A_\mu dx^\mu} \quad (\text{A.22})$$

Abrindo o tempo próprio na integral (A.21) em $d\tau = \frac{1}{c} \sqrt{dS^2} = \frac{1}{c} \sqrt{dx^\mu dx_\mu}$

$$S_{part} = -mc^2 \frac{1}{c} \int \sqrt{dx^\mu dx_\mu} = -mc \int d\tau \sqrt{\frac{dx^\mu}{d\tau} \frac{dx_\mu}{d\tau}}$$

Parametrizando x^μ como uma função não-linear de τ por um parâmetro S

$$\begin{aligned} S_{part} &= -mc \int \sqrt{\frac{dx^\mu}{dS} \frac{dx_\mu}{dS}} dS \\ \delta S_{part} &= -mc \int_{S_1}^{S_2} dS \frac{1}{2\sqrt{\frac{dx^\nu}{dS} \frac{dx_\nu}{dS}}} 2 \frac{dx^\mu}{dS} \delta \left(\frac{dx_\mu}{dS} \right) = \\ &= -mc \int_{S_1}^{S_2} dS \frac{d}{dS} \left[\frac{\frac{dx^\mu}{dS} \delta x_\mu}{\sqrt{\frac{dx^\nu}{dS} \frac{dx_\nu}{dS}}} \right] + mc \int_{S_1}^{S_2} dS \frac{d}{dS} \left[\frac{\frac{dx^\mu}{dS}}{\sqrt{\frac{dx^\nu}{dS} \frac{dx_\nu}{dS}}} \right] \delta x_\mu = \\ &= -mc \left[\frac{\frac{dx^\mu}{dS} \delta x^\mu}{\sqrt{\frac{dx^\nu}{dS} \frac{dx_\nu}{dS}}} \right]_{S_1}^{S_2} + mc \int_{S_1}^{S_2} dS \frac{d}{dS} \left[\frac{\frac{dx^\mu}{dS}}{\sqrt{\frac{dx^\nu}{dS} \frac{dx_\nu}{dS}}} \right] \delta x_\mu \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Onde a passagem da primeira integral da terceira linha para o termo cancelado é dada pelo teorema fundamental do cálculo. O termo cancelado é zero pois a variação é zero nas duas extremidades da trajetória. Saindo do parâmetro S

e voltando para o parâmetro τ :

$$d\tau = \frac{1}{c} \sqrt{\frac{dx^v}{dS} \frac{dx_v}{dS}} dS \rightarrow \boxed{\frac{1}{c} \frac{d}{d\tau} = \frac{1}{\sqrt{\frac{dx^v}{dS} \frac{dx_v}{dS}}} \frac{d}{dS}}$$

$$\delta S_{part} = mc \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \frac{d}{d\tau} \left[\frac{1}{c} \frac{dx^\mu}{d\tau} \right] \delta x_\mu = \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \left[m \frac{d^2 x^\mu}{d\tau^2} \right] \delta x_\mu = 0 \quad (\text{A.24})$$

Como $\delta x_\mu \neq 0$, temos que o termo entre colchetes deve ser igual a zero. Chegamos, finalmente, às *Equações de Euler-Lagrange para o problema*

$$\boxed{m \frac{d^2 x^\mu}{d\tau^2} = 0} \quad (\text{A.25})$$

Esta é a parte da ação da partícula. Temos ainda que calcular o que sai da ação da interação:

$$\begin{aligned} \delta S_{int} &= -\frac{e}{c} \int [\delta A_v dx^v + A_v \delta(dx^v)] \\ &= -\frac{e}{c} \int [\partial_\mu A_v \delta x^\mu dx^v + d(A_v \delta x^v) - \partial_v A_\mu dx^v \delta x^\mu] \\ &= -\frac{e}{c} (A_v \delta x^v) \Big|_{x_1(\tau_1)}^{x_2(\tau_2)} - \frac{e}{c} \int [\partial_\mu A_v - \partial_v A_\mu] \delta x^\mu dx^v \\ &\quad - \frac{e}{c} \int_{\tau_1}^{\tau_2} (F_{\mu\nu}) \frac{dx^\nu}{d\tau} d\tau \delta x^\mu \\ \delta S_{int} &= \boxed{-\frac{e}{c} \int_{\tau_1}^{\tau_2} (F_v^\mu \frac{dx^\mu}{d\tau}) d\tau \delta x_\mu} \end{aligned}$$

Então, como $\delta S_{part} + \delta S_{int} = 0$

$$\begin{aligned} \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \left[m \frac{d^2 x^\mu}{d\tau^2} - \frac{e}{c} F_v^\mu \frac{dx^\nu}{d\tau} \right] \delta x_\mu = 0 \\ \boxed{m \frac{d^2 x^\mu}{d\tau^2} = \frac{e}{c} F_v^\mu \frac{dx^\nu}{d\tau}} \quad (\text{A.26}) \\ \text{ou} \quad \boxed{\frac{dp^\mu}{d\tau} = \frac{e}{c} F_v^\mu u^\nu} \end{aligned}$$

**Hamiltoniano para partícula carregada em um campo eletromagnético
- formulação relativística e aproximação não-relativística**

Para obter a hamiltoniano, podemos partir da lagrangiana do campo:

$$\begin{aligned}
 S &= \int L dt = -mc^2 \int d\tau - \frac{e}{c} \int A_\mu dx^\mu = \\
 &= \int \left(-mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right) dt - \frac{e}{c} \int (A_0 dx^0 - \vec{A} \cdot d\vec{x}) = \\
 &= \int \left(-mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right) dt - \frac{e}{c} \int \left(\phi dx^0 (cdt) - \vec{A} \cdot d\vec{x} \frac{dt}{dt} \right) \quad (A.27) \\
 S &= \int L dt = \int \left(-mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - \frac{e}{c} \phi c + \frac{e}{c} \vec{A} \cdot \vec{v} \right) dt
 \end{aligned}$$

$$\boxed{L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - e\phi + \frac{e}{c} \vec{A} \cdot \vec{v}}$$

Podemos fazer uma transformada de Legendre nessa lagrangiana para obter o hamiltoniano:

$$H = \sum_k \frac{\partial L}{\partial v^k} v^k - L$$

$$\frac{\partial L}{\partial v^k} = -mc^2 \frac{1}{2\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \left(-2\frac{v^k}{c^2} \right) + \frac{e}{c} A^k = \frac{mv^k}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} + \frac{e}{c} A^k = p^k + \frac{e}{c} A^k = \mathcal{P}^k \quad (A.28)$$

onde p^k são as componentes espaciais do quadritensor momento

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \gamma m v^k \right)$$

e \mathcal{P}^k é o chamado *momento canônico*. O hamiltoniano é então

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{mv^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} + \frac{e}{c} A^k v^k + mc^2 \sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} + e\phi - \frac{e}{c} \vec{A} \cdot \vec{v} = \\
 &= \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \left[\frac{v^2}{c^2} + 1 - \frac{v^2}{c^2} \right] + e\phi = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} + e\phi \quad (\text{A.29}) \\
 &\quad \boxed{H = E + e\phi}
 \end{aligned}$$

Podemos reescrever o momento canônico em termos da hamiltoniano. Dividindo a equação (A.29) por c e rearranjando

$$\frac{H}{c} = \frac{E}{c} + \frac{e}{c} \phi \Rightarrow \mathcal{P}^k = p^k + \frac{e}{c} A^k$$

$$\boxed{\mathcal{P}^\mu \equiv \left(\frac{H}{c}, \mathcal{P}^k \right); p^\mu = \left(\frac{E}{c}, p^k \right)}$$

(A.30)

$$\boxed{\mathcal{P}^\mu = p^\mu + \frac{e}{c} A^\mu \longrightarrow p^\mu = \mathcal{P}^\mu - \frac{e}{c} A^\mu}$$

$$p^\mu p_\mu = m^2 c^2 \rightarrow \left(\frac{E}{c} \right)^2 - \vec{p}^2 = m^2 c^2 \rightarrow \left(\frac{H}{c} - \frac{e}{c} \phi \right)^2 - \left(\vec{\mathcal{P}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = m^2 c^2$$

$$\frac{H}{c} = \frac{e}{c} \phi + \sqrt{m^2 c^2 + \left(\vec{\mathcal{P}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}$$

$$\boxed{H = e\phi + \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \left(\vec{\mathcal{P}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}}$$

(A.31)

No limite não-relativístico, podemos expandir a raiz em (A.27) para $v^2/c^2 \ll 1$:

$$L = -mc^2 \sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} + \frac{e}{c} \vec{A} \cdot \vec{v} - e\phi \simeq -mc^2 + \frac{m}{2} v^2 + \mathcal{O}\left(\frac{v^4}{c^4}\right) + \frac{e}{c} \vec{A} \cdot \vec{v} - e\phi$$

Aqui, novamente usamos o argumento de que, uma vez que a lagrangiana entra na conta sob uma derivada, podemos eliminar a constante $-mc^2$. Logo

$$\vec{\mathcal{P}} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} + \frac{e}{c}\vec{A} \simeq m\vec{v} + \mathcal{O}\left(\frac{v^2}{c^2}\right) + \frac{e}{c}\vec{A} \rightarrow m\vec{v} = \vec{\mathcal{P}} - \frac{e}{c}\vec{A} \quad (\text{A.32})$$

$$\vec{v} = \frac{1}{m} \left(\vec{\mathcal{P}} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)$$

Escrevemos finalmente a hamiltoniano não-relativística como

$$H = \frac{\partial L}{\partial v^k} v^k - L = mv^2 + \frac{e}{c}\vec{A} \cdot \vec{v} - \frac{m}{2}v^2 - \frac{e}{c}\vec{A} \cdot \vec{v} + e\phi = \frac{m}{2}v^2 + e\phi$$

Substituindo \vec{v} obtida em (A.32)

$$\boxed{H = \frac{1}{2m} \left(\vec{\mathcal{P}} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 + e\phi} \quad (\text{A.33})$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] RABI, I.I. On the process of space quantization, *Phys. Rev. Lett*, **49**, p. 324-328 (1936)
- [2] EILBECK, J.C., LOMDAHL P.S. and SCOTT A.C. - "The discrete self-trapping equation ", *Physica D: Nonlinear Phenomena*, **3**, p. 318- 338 (1985)
- [3] GREGG, B. A. Excitonic Solar Cells. *The Journal of Physical Chemistry B*, **107**, p. 4688-4698 (2003)
- [4] REGO, L. G.C. Rego, MAZON, K.T., HAMES, B. C.; JOSWIG, J. O. - "Intramolecular Polarization Induces Electron-Hole Charge Separation in Light-Harvesting Molecular Triads ", *J.Phys.Cehm.c.*, **118**, p. 126-134 (2013)
- [5] HOUSE, J. E.- *Fundamentals of Quantum Chemistry* Academic Press, 2004
- [6] GÜLEN, S.; BASKAL, S. Non-Linearity, dissipation and transport in a molecular trimer. *J. Phys. : Condes. Matter*, **5**, p. 899-906 (1993)
- [7] BISCHOP, A. R.; CAMPBELL, D. K.; KUMAR, P.; TRULLINGER, S. Nonlinearity in Solid State Physics (Berlim: Springer, 1987).
- [8] PNEVMATIKOS, S.; BOUNKI, T. Singular Behavior and Nonlinear Dynamics (Singapore: World Scientific, 1989).
- [9] CHRISTIANSEN, P. L.; SCOTT, A. C. Davidov's Soliton Revisited: Self-Trapping Vibrational Energy in Protein (Plenum , New York, 1990).
- [10] EINSTEIN, A. Quantentheorie des einatomigen gases. *SITZUNGSBERICHTE DER PREUSSISCHEN AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN PHYSIKALISCH-MATHEMATISCHE KLASSE*, **3**, (1925)
- [11] ANDERSON, M. H.; MATTHEWS, M. R.; WIEMAN, C. E.; CORNELL, E. A.; HALJAN, D. S.; HALL, M. J.; HOLLAND, J. E.; WILLIAMS, C. E. *Phys. Rev. lett.* **83**, 3358 (1999).
- [12] PITAEVSKII, L.; STRINGARI, S. Bose Einstein condensation (Oxford University, New York, 2003).

- [13] SCOTT, A. *Encyclopedia of non-linear science*. - Taylor & Francis, New York, 2005 aqui vao as referencias do clasen de 87-112
- [14] ALBIEZ, M. et al. Direct observation of tunnelling and non-linear self-trapping in a single bosonic josephson junction. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v.95, p. 010402, 2005
- [15] D'AGOSTA, R.; PRESILLA, C. et al. States without a linear counterpart in bose-einstein condensates. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v.65, p. 043609, 2002
- [16] HASEGAWA, A.; MATSUMOTO, M. *Optical Solitons in Fibers*. [S.1]: Springer: Berlim, Germany, 2003
- [17] EILBECK, J.C., LOMDAHL P.S. and SCOTT A.C. - "The discrete self-trapping equation ", *Physica D: Nonlinear Phenomena*, **3**, p. 318- 338 (1985)
- [18] LEDERER, f; STEGEMAN, I. G.; CHRISTODOULIDES, D. N.; ASSANTO, G.; SEGEV, M.; SILBERBERG, Y. - Discrete Solitons in Optics *Physics Reports* **463** 1-126 (2008)
- [19] ALLEN, L.; EBERLY, J. H. *Optical Resonance and Two-Level Atoms* (Dover, New York, 1981).
- [20] SCULLY, M.O.; ZUBAIRY, M. S. *Quantum Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [21] ROSSI, F.; KUHN, T. *Rev. Mod. Phys* **74**, 895 (2002).
- [22] ROMANETS, P. N.; VASKO, F. T. *Phys. Rev. B* **81**, 241411(R) (2010).
- [23] ANDERSON, M. H.; ESHER, J. R.; MATTHEWS, M. R.; WIEMAN, C. E.; CORNELL, E. A. Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science* **269**, p.198-201, 1995
- [24] PATTON, K. R.; FISCHER, U. R. *Phys. Rev. A* **87**, 052303 (2013).
- [25] BLUM, K. *Physics of Atoms and Molecules* (Plenum Press, New York, 1981).
- [26] W,H, Louisell - *Quantum statistical propoerties of radiation* 1924
- [27] SAKURAI, J.J. *Modern quantum mechanics*, 1994
- [28] COHEN-TANNOUDJI, C., LALOË, B. D.,. *Quantum mechanics* vol.1 Section D_{VI}, ISBN: 978-0-471-16433-3, Wiley (1991).

- [29] YOSHIOKA, D. *The Quantum Hall Effect*, Chapter 2, ISBN: 978-3-642-07720-3, Springer (2002).
- [30] ZHAO, X. G; Quasienergy and Floquet states in a time-periodic driven two-level system *Phys. Rev. B*, **49**- 23 (1994)
- [31] SAMBE, S. Steady States and and Quasienergies of a Quantum-Mechanical System in as Oscillating Field *Phys. Rev. A*, **7**,6 (1973)
- [32] HENNIG, D.; The discrete self-trapping equation and the Painlevé property *J. Phys. A: Math* **25**, 1992
- [33] NITZAN, A.; Chemical dynamics in condensed phases: relaxation, transfers, and reactions in condensed molecular systems, *Oxford University Press*, 2000
- [34] HOLSTEIN, T.; , *Ann. Phys. NY* **8**, 343 (1959).
- [35] SHORE, H. B.; SANDER, L. M. , *Phys. Rev. B* **7**, 4537 (1973).
- [36] RIVIER, N.; COE, J. T. , *J. Phys. C* **10**, 4471 (1977).
- [37] PRELOVSEK, P.; , *J. Phys. C* **12**, 1855 (1979).
- [38] BECK, R.; GÖTZE, W.; PRELOVSEK, P. , *Phys. Rev. A* **20**, 1140 (1979).
- [39] ABRAGAM, A.; The Principles of Nuclear Magnetism *Calrendon Press, Oxford* (1961).
- [40] WIPF, H.; STEINBINDER, D.; NEUMAIER, K.; GUTSMIEDL, P.; MEGERL, A.; DIANOUX, A. J.; ; The Principles of Nuclear Magnetism *Europhys.Lett* **4**, 1379 (1987).
- [41] GOLDING, B.; ZIMMERMAN, M. N.; COPPERSMITH, S.N.; *Phys. Rev. Lett* **66**, 810 (1991).
- [42] CHUN, K.; BIRGE, N.O.; *Phys. Rev. B* **48**, 11500 (1993).
- [43] KOSUGI, N; MATSUO, S.; KONNO, K.; HATAKENAKA, N., *Phys. Rev. B.*, **72**,172509 (2005)
- [44] BREUER, H. P. and PETRUCCIONE F., The Theory of Open Quantum Systems (Oxford University, New York, 2002).
- [45] BLOCH, F.; *Phys. Rev.* **102**, 104 (1956).
- [46] REDFIELD, A.G.; *IBM J. Rev. Develop I* **102**, 19 (1957).

- [47] FANO, U.; *Phys. Rev.* **96**, 869 (1954).
- [48] LIKHAREV, K. K. *Int. J. Theor. Phys.* **21**, 311-325 (1982).
- [49] LLOYD, S. *Sci. Am.* **273**, 140-145 (1995).
- [50] LLOYD, S. *Science* **273**, 1073-1078 (1996).
- [51] LLOYD, S. *Phys. Rev. A* **56**, 3374-3382 (1997).
- [52] LLOYD, S. *Nature* (London) **406**, 1047 (2000); *Phys. Rev. Lett.* **88**, 237901 (2000)
- [53] BAJER, J - Nonlinear phenomena in quantum optics
- [54] RABI, I.I. On the process of space quantization, *Phys. Rev. Lett*, **49**, p. 324-328 (1936)