

ELITON TRINDADE GOMES



PROPAGAÇÃO DE PULSOS DE LUZ EM SISTEMAS ATÔMICOS

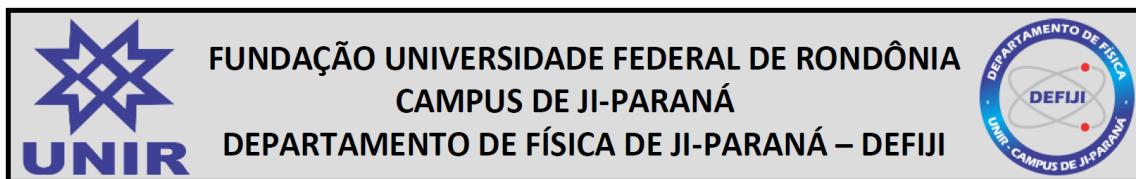
**JI-PARANÁ, RO
MÊS E ANO DA DEFESA**

ELITON TRINDADE GOMES

PROPAGAÇÃO DE PULSOS DE LUZ EM SISTEMAS ATÔMICOS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Departamento de Física de Ji-Paraná, Universidade Federal de Rondônia, Campus de Ji-Paraná, como parte dos quesitos para a obtenção do Título de Bacharel em Física, sob orientação do Prof. Dr. Marco Polo Moreno de Souza.

JI-PARANÁ, RO
MÊS E ANO DA DEFESA



ATA DE AVALIAÇÃO DO TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO DO CURSO DE (LICENCIATURA PLENA/BACHARELADO) EM FÍSICA

Aos xxx dias do mês de xxx do ano de xxx, às xxx, no xxx, reuniu-se a Banca Julgadora composta pelo professor orientador Dr. Marco Polo Moreno de Souza e pelos examinadores Nome do professor da banca e Nome do professor da banca, para avaliarem o Trabalho de Conclusão de Curso, do Curso de Bacharelado em Física, intitulado “**PROPAGAÇÃO DE PULSOS DE LUZ EM SISTEMAS ATÔMICOS**”, do discente *ELITON TRINDADE GOMES*. Após a apresentação, o candidato foi arguido pelos integrantes da Banca Julgadora por xxx (xxx) minutos. Ao final da arguição, a Banca Julgadora, em sessão reservada, **aprovou** o candidato com nota xxx (xxx), em uma avaliação de 0 (zero) a 10 (dez). Nada mais havendo a tratar, a sessão foi encerrada às xxx, dela sendo lavrada a presente ata, assinada por todos os membros da Banca Julgadora.

Prof. Dr. Marco Polo Moreno de Souza - DEFIJI/CJP/UNIR
Orientador

Prof. Nome do professor da banca - DEFIJI/CJP/UNIR

Prof. Nome do professor da banca - DEFIJI/CJP/UNIR

DEDICATÓRIA

Digite a dedicatória aqui.

AGRADECIMENTOS

Digite os agradecimentos aqui.

EPÍGRAFE

Digite a epígrafe aqui.

RESUMO

[illegible]

Palavras-chave: palavra-chave 1. palavra-chave 2. palavra-chave 3.

LISTA DE TABELAS

4.1 Funções trigonométricas e hiperbólicas. 27

5.1 Funções trigonométricas e hiperbólicas. 29

LISTA DE FIGURAS

4.1	Níveis de energia de um hipotético "átomo de dois níveis". A "dessintonia" $\delta = \omega_0 - \omega$ é a diferença entre $(E_2 - E_1)/\hbar$ e ω . A radiação da frequência angular ω é quase ressonante com a transição $E_1 \rightarrow E_2$, quando $\delta \ll \omega_0 - \omega$	22
5.1	Espectro de um laser de femtossegundos.	29

SUMÁRIO

1	Introdução	1
2	Propagação de ondas eletromagnéticas em meio linear	3
2.1	Equações de Maxwell	3
2.2	propagação de onda em meio linear	5
2.3	Propagação de onda em um meio atômico de 2 níveis	10
3	Mecânica Quântica e Operador Densidade	13
3.1	Matriz densidade	13
3.1.1	Propriedades do Operador Densidade	14
3.1.2	Evolução Temporal do Operador Densidade	17
4	Interação sistema atômico de dois níveis com radiação	19
4.1	Hamiltoniano para um sistema atômico de dois níveis	19
4.2	Sistema atômico de dois níveis	21
4.3	Equações	27
4.4	Tabelas	27
4.5	Códigos	27
4.6	Citação	27
5	Outro capítulo	29
6	Conclusão	31
	Título do Primeiro Apêndice	35
	Título do Segundo Apêndice	37

1 INTRODUÇÃO

Digite a introdução aqui.

2 PROPAGAÇÃO DE ONDAS ELETROMAGNÉTICAS EM MEIO LINEAR

Neste capítulo, revisitamos conceitos importantes do eletromagnetismo, que permitirá estudarmos a propagação de pulsos eletromagnéticos no meio atômico de 2 níveis. Para isso, primeiramente apresentaremos a propagação num meio linear e depois expandiremos para o caso de um meio atômico.

2.1 EQUAÇÕES DE MAXWELL

Em princípio, sabemos que as leis do electromagnetismo para um meio podem ser resumidas nas quatro equações de Maxwell [1, 2]:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \varrho_l \text{ (Lei de Gauss),} \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{J}_l \text{ (Lei de Ampère),} \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \text{ (Lei de Faraday),} \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \text{ (Lei de Gauss para o magnetismo).} \quad (2.4)$$

A lei de Gauss apresenta a existência de cargas elétricas positiva e negativa, sendo ϱ_l (C/m^3) a densidade de carga elétrica livre. A lei de Ampère estabelece que uma densidade de corrente elétrica \mathbf{J}_l (A/m^2), ou, um deslocamento elétrico \mathbf{D} (C/m^2) variável no tempo produz uma distribuição de campo magnetizante \mathbf{H} (A/m). A lei de Faraday estabelece que a variação no campo magnético \mathbf{B} (Wb/m^2) produz uma distribuição de campo elétrico \mathbf{E} (V/m). A lei de Gauss para o magnetismo informa a não existência de cargas magnéticas. O deslocamento elétrico \mathbf{D} e o campo magnetizante \mathbf{H} se relacionam com \mathbf{E} and \mathbf{B} a partir das equações:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (2.5)$$

e

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} + \mathbf{M}, \quad (2.6)$$

sendo \mathbf{P} a polarização elétrica e \mathbf{M} magnetização de um meio material. A polarização ocorre quando sujeitamos um dielétrico a um campo elétrico. Isso acarreta uma distorção da distribuição interna de cargas, gerando dipolo elétricos que contribuem com o campo elétrico interno total no meio, ou seja, o campo externo separa as carga positiva e negativa do material, e esta contribui para uma componente adicional para o campo. Assim, o momento dipolar por unidade de volume é o que chamamos de polarização elétrica e obedece a seguinte definição:

$$\mathbf{P} \equiv \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{p}_i. \quad (2.7)$$

A magnetização da matéria ocorre quando é aplicado um campo magnético externo. Dois mecanismos atômicos que justificam esse fenômeno são: o paramagnetismos, em que os dipolos

referentes aos spin (momento angular intrínseco) de elétrons sem par se alinham ao campo magnético externo, e o diamagnetismo, no qual o campo magnético externo provoca mudança na velocidade orbital, ocasionado, mudança no momento de dipolo orbital em sentido oposto a campo magnético externo. Portanto, podemos definir a magnetização \mathbf{M} como momento do dipolo magnético resultante por unidade de volume, conforme equação:

$$\mathbf{P} \equiv \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{p}_i. \quad (2.8)$$

Levando em conta que o meio atômico estudado neste TCC é eletricamente neutro e não magnético, podemos desconsiderar ϱ_l , \mathbf{J}_l e \mathbf{M} , fazendo

$$|\varrho_l| = |\mathbf{J}_l| = |\mathbf{M}| = 0. \quad (2.9)$$

Aplicando o operador rotacional à lei de Faraday (2.3), obtemos:

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) + \nabla \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= 0 \\ \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} + \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{B}) &= 0. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Usando as relações (2.5) e (2.6) na lei de Ampère (2.2), respeitando as condições (2.9), obtemos:

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}). \quad (2.11)$$

Substituindo esse resultado em (2.10) e usando o fato de que $\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) = 0$, obtemos a seguinte equação de onda para o campo elétrico que se propaga no eixo z [3]:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2}. \quad (2.12)$$

Veja que o termo a esquerda da igualdade é equivalente equação de ondas para a propagação da luz no vácuo, enquanto que o termo no lado direito representa a interação do campo eletromagnético com o meio material.

A polarização \mathbf{P} pode ser decomposta em duas partes :

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^L + \mathbf{P}^{NL}, \quad (2.13)$$

onde \mathbf{P}^L representa contribuições que variam de forma linear e \mathbf{P}^{NL} as contribuições que variam de forma não-linear com o campo elétrico aplicado [4, 5].

No próximo subcapítulo 2.2 apresentamos a solução para um pulso de campo eletromagnético que interagem com material linear e, posteriormente, no subcapítulo 2.3, apresentamos o caso não linear que se aplica ao sistema atômico de dois níveis, ao qual estudaremos no Capítulo 4.

2.2 PROPAGAÇÃO DE ONDA EM MEIO LINEAR

A equação de propagação da onda (2.12), normalmente é resolvida somente usando métodos numéricos. No entanto, podemos realizar simplificações e aproximações que, ainda assim, nos permita lidar com problemas práticos da propagação de pulsos em um meio material [5]. Para um meio linear, podemos reescrever a equação (2.12) da seguinte forma:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} E(z, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} E(z, t) = \mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} P^L(z, t). \quad (2.14)$$

Sabemos que em um meio linear, a polarização se relaciona com o campo elétrico a partir da susceptibilidade elétrica χ_e [1, 2], seguindo a seguinte expressão:

$$P^L(z, t) = \epsilon_0 \int_{-\infty}^t dt' \chi_e(t - t') E(z, t'). \quad (2.15)$$

Isso nos diz que um material não pode polarizar instantaneamente em resposta a um campo aplicado, ou seja, a polarização é uma convolução do campo elétrico em tempos anteriores, onde a susceptibilidade é dada por $\chi_e(\Delta t)$. Podemos estender o limite superior desta integral ao infinito considerando que

$$\chi_e(\Delta t) = 0 \text{ para } \Delta t < 0. \quad (2.16)$$

Reescrevendo (2.15) no domínio da frequência, obtemos:

$$\begin{aligned} \tilde{P}^L(z, \omega) &= \epsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} dt P^L(z, t) e^{-i\omega t} \\ &= \epsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_e(t - t') E(z, t') e^{-i\omega t} \\ &= \epsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_e(t) E(z, t') e^{-i\omega(t+t')} \\ &= \epsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} dt' E(z, t') \int_{-\infty}^{\infty} dt \chi_e(t) e^{-i\omega(t+t')} \\ &= \epsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} dt \chi_e(t) e^{-i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} dt' E(z, t') e^{-i\omega t'} \\ &= \epsilon_0 \tilde{\chi}_e(\omega) \tilde{E}(z, \omega). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Realizando transformada de Fourier inversa sobre (2.14), obtemos:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] E(z, t) &= \mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} P^L(z, t) \\ \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{E}(z, \omega) e^{i\omega t} \right] &= \mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{P}^L(z, \omega) e^{i\omega t} \right] \\ \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \right] \tilde{E}(z, \omega) &= -\mu_0 \omega^2 \tilde{P}^L(z, \omega). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Substituindo (2.17) em (2.18) e usando o fato de que $c^2 = \frac{1}{\mu_0 \epsilon_0}$, obtemos:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \mu_0 \omega^2 \epsilon_0 \right] \tilde{E}(z, \omega) &= -\mu_0 \omega^2 \epsilon_0 \tilde{\chi}_e(\omega) \tilde{E}(z, \omega) \\ \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \mu_0 \omega^2 \epsilon_0 (1 + \chi_e(\omega)) \right] \tilde{E}(z, \omega) &= 0 \\ \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \mu_0 \omega^2 \epsilon(\omega) \right] \tilde{E}(z, \omega) &= 0, \end{aligned} \quad (2.19)$$

onde

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 (1 + \chi_e(z, \omega)) \quad (2.20)$$

é a permissividade elétrica do material. Para resolvermos a equação (2.18), assumimos a susceptibilidade elétrica e a permissividade elétrica do material são reais. Assim, a solução da E.D.O. na direção $+z$ é:

$$\tilde{E}(z, \omega) = \tilde{E}(0, \omega) e^{-ik(\omega)z}, \quad (2.21)$$

onde $k(\omega)$ é a constante de propagação, obtida a partir da relação de dispersão da óptica linear

$$k^2(\omega) \equiv \omega^2 \epsilon(\omega) \mu_0 = \frac{\omega^2}{c^2} n(\omega), \quad (2.22)$$

em que $n(\omega)$ é o índice de refração do material. Para uma análise mais minuciosa, precisamos expandir $k(\omega)$ em série de Taylor, fixando ω_0 na frequência central ω_c

$$k(\omega) = k(\omega_c) + \underbrace{\left. \frac{\partial k}{\partial \omega} \right|_{\omega_c} (\omega - \omega_c) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 k}{\partial \omega^2} \right|_{\omega_c} (\omega - \omega_c)^2 + \dots}_{\Delta \kappa} \quad (2.23)$$

Assim,

$$k(\omega) = k(\omega_c) + \Delta \kappa. \quad (2.24)$$

Substituindo (2.24) na equação de onda (2.21), temos:

$$\tilde{E}(z, \omega) = \tilde{E}(0, \omega) e^{-ik_c z} e^{-i\Delta \kappa z}, \quad (2.25)$$

onde

$$k_c^2 = k^2(\omega_c) = \omega_c^2 \epsilon(\omega_c) \mu_0 = \frac{\omega_c^2}{c^2} n(\omega_c). \quad (2.26)$$

Para o caso prático que nos interessa neste TCC, centralizamos a amplitude de Fourier em um número de onda médio k_c , tendo valor significativo apenas quando o intervalo $\Delta \kappa$ é pequeno comparado a k_c . No apêndice A é introduzido uma função da envoltória que varia lentamente no tempo, após a separação de um termo que oscila rapidamente. Partindo desse princípio, podemos definir uma envoltória que varia lentamente na coordenada espacial:

$$\tilde{\mathcal{E}}(\omega, z) \equiv \tilde{E}(\omega + \omega_c, 0) e^{-i\Delta \kappa z}. \quad (2.27)$$

Isso requer que

$$\left| \frac{d}{dz} \tilde{\mathcal{E}}(\omega, z) \right| \ll k_c \left| \tilde{\mathcal{E}}(\omega, z) \right|, \quad (2.28)$$

pois partimos do fato que:

$$\left| \frac{\Delta\kappa}{k_c} \right| \ll 1. \quad (2.29)$$

Aplicando a transformada de Fourier inversa à equação (2.24), obtemos:

$$\begin{aligned} E(z, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{E}(z, \omega) e^{i\omega t} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} d\omega \tilde{E}(z, \omega) e^{i\omega t} + c.c. \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} d\omega \tilde{E}(0, \omega) e^{-ik_c z - i\delta z} e^{i\omega t} + c.c. \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} d\omega \tilde{E}(0, \omega + \omega_c) e^{-ik_c z - i\delta z} e^{i(\omega + \omega_c)t} + c.c. \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^{\infty} d\omega \tilde{E}(0, \omega + \omega_c) e^{-i\delta z} e^{i\omega t} \right] e^{i\omega_c t - ik_c z} + c.c. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Substituindo (2.27) em (2.30), temos:

$$E(z, t) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \tilde{\mathcal{E}}(z, \omega) e^{i\omega t} \right] e^{i\omega_c t - ik_c z} + c.c. \quad (2.31)$$

Assim, ao aplicarmos a relação do apêndice A, obtemos

$$E(z, t) = \frac{1}{2} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) e^{i\omega_c t - ik_c z} + c.c. \quad (2.32)$$

onde $\mathcal{E}(z, t)$ é a envoltória do pulso que varia lentamente no espaço e no tempo.

Agora, precisamos obter uma expressão para $P^L(z, t)$. Para isso, reescrevemos (2.16) em termos de $\epsilon(\omega)$ e expandimos $\epsilon(\omega)$ em série de Taylor em torno de ω_c , assim como fizemos para $k(\omega)$, de forma que:

$$\begin{aligned} \tilde{P}^L(z, \omega) &= [\epsilon(\omega) - \epsilon_0] \tilde{E}(z, \omega) \\ &= \left[\epsilon(\omega_c) + (\omega - \omega_c) \frac{\partial \epsilon}{\partial \omega} \Big|_{\omega_c} + \frac{(\omega - \omega_c)^2}{2!} \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial \omega^2} \Big|_{\omega_c} + \cdots + \right. \\ &\quad \left. + \frac{(\omega - \omega_c)^n}{n!} \frac{\partial^n \epsilon}{\partial \omega^n} \Big|_{\omega_c} - \epsilon_0 \right] \tilde{E}(z, \omega) \\ &= \left[\epsilon(\omega_c) - \epsilon_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\omega - \omega_c)^n}{n!} \frac{\partial^n \epsilon}{\partial \omega^n} \Big|_{\omega_c} \right] \tilde{E}(z, \omega). \end{aligned} \quad (2.33)$$

Aplicando transformada de Fourier inversa à equação (2.33), temos:

$$\begin{aligned}
\tilde{P}^L(z, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\epsilon(\omega_c) - \epsilon_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (\omega - \omega_c)^n \frac{\partial^n \epsilon}{\partial \omega^n} \Big|_{\omega_c} \right] \tilde{E}(z, \omega) e^{i\omega t} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\epsilon(\omega_c) - \epsilon_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (\omega - \omega_c)^n \frac{\partial^n \epsilon}{\partial \omega^n} \Big|_{\omega_c} \right] \tilde{E}(0, \omega) e^{-ik_c z - i\Delta\kappa z} e^{i\omega t} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\epsilon(\omega_c) - \epsilon_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \omega^n \frac{\partial^n \epsilon}{\partial \omega^n} \Big|_{\omega_c} \right] \tilde{E}(0, \omega + \omega_c) e^{-ik_c z - i\Delta\kappa z} e^{i(\omega + \omega_c)t} \\
&= \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\epsilon(\omega_c) - \epsilon_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \omega^n \frac{\partial^n \epsilon}{\partial \omega^n} \Big|_{\omega_c} \right] \tilde{E}(0, \omega + \omega_c) e^{-i\Delta\kappa z} e^{i\omega t} \right\} e^{i\omega_c t - ik_c z}
\end{aligned} \tag{2.34}$$

Substituindo (2.27) em (2.34) e fazendo a mudança de notação $\frac{\partial^n \epsilon}{\partial \omega^n} \Big|_{\omega_c} = \epsilon^{(n)}(\omega_c)$, obtemos:

$$\begin{aligned}
P^L(z, t) &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \left[\epsilon(\omega_c) - \epsilon_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\epsilon^{(n)}(\omega_c)}{n!} \omega^n \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, \omega) e^{i\omega t} \right\} e^{i\omega_c t - ik_c z} + c.c. \\
&= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \left[\epsilon(\omega_c) - \epsilon_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \epsilon^{(n)}(\omega_c)}{n!} \frac{\partial^n}{\partial t^n} \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, \omega) e^{i\omega t} \right\} e^{i\omega_c t - ik_c z} + c.c. \\
&= \frac{1}{2} \left\{ \left[\epsilon(\omega_c) - \epsilon_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \epsilon^{(n)}(\omega_c)}{n!} \frac{\partial^n}{\partial t^n} \right] \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \tilde{\mathcal{E}}(z, \omega) e^{i\omega t} \right\} e^{i\omega_c t - ik_c z} + c.c. \\
&= \frac{1}{2} \left\{ \left[\epsilon(\omega_c) - \epsilon_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \epsilon^{(n)}(\omega_c)}{n!} \frac{\partial^n}{\partial t^n} \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) \right\} e^{i\omega_c t - ik_c z} + c.c. \\
&= \frac{1}{2} \tilde{\mathcal{P}}^{\mathcal{L}}(z, t) e^{i\omega_c t - ik_c z} + c.c.,
\end{aligned} \tag{2.35}$$

onde $\mathcal{P}^{\mathcal{L}}(z, t)$ é a envoltória da polarização que varia lentamente em relação ao espaço e o tempo. O próximo passo é substituir o campo elétrico (2.32) e a polarização (2.35) na equação de propagação de onda (2.14). Assim, temos:

$$\begin{aligned}
\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2ik_c \frac{\partial}{\partial z} - k_c^2 \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) &= \frac{1}{c^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2i\omega_c \frac{\partial}{\partial t} - \omega_c^2 \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) + \mu_0 \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2i\omega_c \frac{\partial}{\partial t} - \omega_c^2 \right] \tilde{\mathcal{P}}(z, t) \\
&= \mu_0 \epsilon_0 \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2i\omega_c \frac{\partial}{\partial t} - \omega_c^2 \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) + \frac{\mu_0}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2i\omega_c \frac{\partial}{\partial t} - \omega_c^2 \right] \left[\epsilon(\omega_c) - \epsilon_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \epsilon^{(n)}(\omega_c) \frac{\partial^n}{\partial t^n} \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t).
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Levando e conta que $(c^2)^{-1} = \mu_0 \epsilon_0$, temos:

$$\begin{aligned}
 \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2ik_c \frac{\partial}{\partial z} - k_c^2 \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) &= \mu_0 \epsilon_0 \left[\cancel{\frac{\partial^2}{\partial t^2}} + 2i\omega_c \cancel{\frac{\partial}{\partial t}} - \omega_c^2 \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) + \mu_0 \epsilon(\omega_c) \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \right. \\
 &+ 2i\omega_c \frac{\partial}{\partial t} - \omega_c^2 \left. \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) - \mu_0 \epsilon_0 \left[\cancel{\frac{\partial^2}{\partial t^2}} + 2i\omega_c \cancel{\frac{\partial}{\partial t}} - \right. \\
 &- \omega_c^2 \left. \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \mu_0 \epsilon^{(n)}(\omega_c) \left[\frac{\partial^{n+2}}{\partial t^{n+2}} + \right. \\
 &+ 2i\omega_c \frac{\partial^{n+1}}{\partial t^{n+1}} - \omega_c^2 \frac{\partial^n}{\partial t^n} \left. \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) \\
 \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2ik_c \frac{\partial}{\partial z} - k_c^2 \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) &= \mu_0 \epsilon(\omega_c) \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2i\omega_c \frac{\partial}{\partial t} - \omega_c^2 \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) - \\
 &- i\mu_0 \left[2i\omega_c \epsilon^{(1)}(\omega_c) \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \omega_c^2 \epsilon^{(1)}(\omega_c) \frac{\partial}{\partial t} + \right. \\
 &+ \frac{i\omega_c^2 \epsilon^{(2)}(\omega_c)}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left. \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) - \\
 &- \sum_{n=3}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \left[n(n-1) \mu_0 \epsilon^{(n-2)}(\omega_c) + \right. \\
 &+ 2n\mu_0 \omega_c \epsilon^{(n-1)}(\omega_c) + \mu_0 \omega_c^2 \epsilon^{(n)}(\omega_c) \left. \right] \frac{\partial^n}{\partial t^n} \tilde{\mathcal{E}}(z, t). \quad (2.37)
 \end{aligned}$$

Partindo do fato que $k_c^2 = \mu_0 \epsilon(\omega_c) \omega_c^2$, temos

$$\begin{aligned}
 \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2ik_c \frac{\partial}{\partial z} - k_c^2 \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) &= -\cancel{k_c^2} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) + i\mu_0 \omega_c \left[\omega_c \epsilon^{(1)}(\omega_c) + 2\epsilon(\omega_c) \right] \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) \\
 &+ \mu_0 \left[\epsilon(\omega_c) + 2\omega_c \epsilon^{(1)}(\omega_c) + \frac{\omega_c^2 \epsilon^{(2)}(\omega_c)}{2} \right] \frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) \\
 &- \sum_{n=3}^{\infty} \frac{(-i)^n}{2n!} \left[n(n-1) \mu_0 \epsilon^{(n-2)}(\omega_c) + 2n\mu_0 \omega_c \epsilon^{(n-1)}(\omega_c) \right. \\
 &+ \mu_0 \omega_c^2 \epsilon^{(n)}(\omega_c) \left. \right] \frac{\partial^n}{\partial t^n} \tilde{\mathcal{E}}(z, t). \quad (2.38)
 \end{aligned}$$

Calculando a velocidade de grupo $(v_g)^{-1} = \frac{\partial k}{\partial \omega} \big|_{\omega_c}$ e $k_c'' = \frac{\partial^2 k}{\partial \omega^2} \big|_{\omega_c}$, obtemos:

$$\frac{1}{v_g} = \frac{\mu_0 \omega_c}{2k_c} \left[\omega_c \epsilon^{(1)}(\omega_c) + 2\epsilon(\omega_c) \right] \quad (2.39)$$

e

$$k_c'' = -\frac{1}{k_c v^2} + \frac{\mu_0}{k_c} \left[\epsilon(\omega_c) + 2\omega_c \epsilon^{(1)}(\omega_c) + \frac{\omega_c^2 \epsilon^{(2)}(\omega_c)}{2} \right]. \quad (2.40)$$

Substituindo (2.39) e (2.40) em (2.38), obtemos:

$$\begin{aligned}
\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2ik_c \frac{\partial}{\partial z} \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) &= \frac{ik_c}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{E}(z, t) + \frac{k_c k''}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) + \frac{1}{2v_g^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) - \\
&- \sum_{n=3}^{\infty} \frac{(-i)^n}{2n!} \left[n(n-1)\mu_0 \epsilon^{(n-2)}(\omega_c) + 2n\mu_0 \omega_c \epsilon^{(n-1)}(\omega_c) + \right. \\
&+ \left. \mu_0 \omega_c^2 \epsilon^{(n)}(\omega_c) \right] \frac{\partial^n}{\partial t^n} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) \\
\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2ik_c \frac{\partial}{\partial z} \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) &= \left[\frac{1}{2v_g^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{ik_c}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \right] \tilde{\mathcal{E}}(z, t) + \frac{k_c k''}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) + \\
&- \sum_{n=3}^{\infty} \frac{(-i)^n}{2n!} \left[n(n-1)\mu_0 \epsilon^{(n-2)}(\omega_c) + 2n\mu_0 \omega_c \epsilon^{(n-1)}(\omega_c) + \right. \\
&+ \left. \mu_0 \omega_c^2 \epsilon^{(n)}(\omega_c) \right] \frac{\partial^n}{\partial t^n} \tilde{\mathcal{E}}(z, t). \tag{2.41}
\end{aligned}$$

Partindo da aproximação no qual

$$\left| \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) \right| \ll k_c \left| \frac{\partial}{\partial z} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) \right| \tag{2.42}$$

e

$$\left| \frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) \right| \ll \omega_c \left| \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) \right|, \tag{2.43}$$

finalmente, reduzimos a equação de propagação de onda (2.41) à:

$$\frac{\partial}{\partial z} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) + \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) - \frac{ik''}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) + \mathcal{D} = 0 \tag{2.44}$$

onde k_c'' é o termos de dispersão de velocidade de grupo GVD e

$$\mathcal{D} = \frac{i\mu_0}{2k_c} \sum_{n=3}^{\infty} \frac{(-i)^n}{2n!} \left[n(n-1)\epsilon^{(n-2)}(\omega_c) + 2n\omega_c \epsilon^{(n-1)}(\omega_c) + \omega_c^2 \epsilon^{(n)}(\omega_c) \right] \frac{\partial^n}{\partial t^n} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) \tag{2.45}$$

é o termo que representa a dispersão de ordem superior.

Não temos interesse de resolver esta equação. Apenas utilizaremos essa aproximação para derivar a equação para o meio atômico de dois níveis no subcapítulo 2.3.

2.3 PROPAGAÇÃO DE ONDA EM UM MEIO ATÔMICO DE 2 NÍVEIS

A discussão sobre propagação de onda no subcapítulo 2.2 se limitava a interação com meios lineares. Porém, o que nos interessa neste TCC é descrever a interação de campo elétrico com meio atômico de dois níveis, que possui polarização não linear em ressonância com o campo elétrico. Para isso, precisamos complementar a equação (2.44) adicionando a polarização do meio atômico não linear, definindo que essa polarização também pode ser decomposta em uma envoltória que varia lentamente no tempo e no espaço e outra contribuição que oscila rapidamente:

$$P^{NL}(z, t) \equiv \frac{1}{2} \tilde{P}^{NL}(z, t) e^{i\omega_c t - ik_c z} + c.c. \tag{2.46}$$

Assim, obtemos a seguinte equação de propagação

$$\frac{\partial}{\partial z} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) + \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) - \frac{ik_c''}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) + \mathcal{D} = \frac{i\mu_0}{2k_c} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2i\omega_c \frac{\partial}{\partial t} - \omega_c^2 \right) \tilde{\mathcal{P}}^{NL}(z, t). \quad (2.47)$$

Como estamos interessados em efeito não lineares da matéria, desconsideramos o termo de dispersão de velocidade de grupo GVD e os termos de ordem superior ($k_c'' = \mathcal{D} = 0$) e partimos do fato que

$$\left| \frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{\mathcal{P}}^{NL}(z, t) \right| \ll \omega_c \left| \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathcal{P}}^{NL}(z, t) \right| \ll \omega_c^2 \left| \tilde{\mathcal{P}}^{NL}(z, t) \right|, \quad (2.48)$$

para obtermos a seguinte aproximação para equação de onda:

$$\frac{\partial}{\partial z} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) + \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathcal{E}}(z, t) = -\frac{i\mu_0}{2k_c} \omega_c^2 \tilde{\mathcal{P}}^{NL}(z, t). \quad (2.49)$$

Por conveniência, vamos fazer uma mudança para um sistema de coordenadas (η, τ) movendo-se com a velocidade do grupo $v_g = \left(\frac{dk}{d\omega} \Big|_{\omega_c} \right)^{-1}$, realizando as seguintes trocas de variáveis:

$$\eta = z \quad \tau = t - \frac{z}{v_g} \quad (2.50)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial \eta} - \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial \tau} \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau}. \quad (2.51)$$

Desse modo, podemos reescrever a equação(2.47) da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial \eta} \tilde{\mathcal{E}}(\eta, \tau) = -\frac{i\mu_0}{2k_c} \omega_c^2 \tilde{\mathcal{P}}^{NL}(\eta, \tau). \quad (2.52)$$

Este resultado final é a equação de onda em sua forma reduzida que permite descrever o comportamento da propagação do campo eletromagnético através de um certo meio atômico. Ela será aplicada no capítulo 4 para meio atômico de dois níveis.

3 MECÂNICA QUÂNTICA E OPERADOR DENSIDADE

Neste capítulo nos dedicamos a apresentar o formalismo do operador densidade, desenvolvido por J. von Neumann em 1927, e suas vantagens em relação à representação de autoestados e autovetores no estudo de sistemas quânticos [6].

3.1 MATRIZ DENSIDADE

Como sabemos, o formalismo usual da mecânica quântica, onde trabalhamos com autoestados e autovalores de um determinado observável (formalismo de Dirac), nos permite fazer previsões sobre um conjunto de sistemas físicos elaborados de forma idêntica [7]. Em termos mais específicos, garantimos que todos os sistemas membros deste ensemble sejam caracterizados por um mesmo ket de estado $|\alpha\rangle$. Assim, este formalismo não é válido se considerarmos, por exemplo, que 70% desses sistemas são caracterizados pelo ket de estado $|\alpha\rangle$ e 30% pelo ket de estado $|\beta\rangle$ (ensemble misto). Para lidar com essa situação, precisamos introduzir o conceito de operador densidade, que nos permitirá descrever quantitativamente conjuntos de sistemas quântico para ensemble puros ou, até mesmo, ensemble mistos completamente aleatórios.

Consideremos o ensemble misto, onde uma fração de sistemas com população relativa w_1 estão no estado $|\alpha^{(1)}\rangle$; outra fração w_2 estão no estado $|\alpha^{(2)}\rangle$, e assim sucessivamente. Podemos dizer, com certa precisão, que um ensemble misto pode ser visto como uma mistura de ensembles puros. As populações w_i devem satisfazer a condição de normalização, ou seja,

$$\sum_i w_i = 1. \quad (3.1)$$

Não é necessário que $|\alpha^{(1)}\rangle, |\alpha^{(2)}\rangle, \dots, |\alpha^{(i)}\rangle$ sejam ortogonais entre si e o número de termos na soma em i na equação (3.1) não precisa ser igual ao número de dimensões N no espaço de Hilbert.

Vamos supor que realizamos a medida de um operador \hat{A} num ensemble misto. É possível calcular o valor médio se houver um número grande de medidas. O resultado é dado pela média sobre o ensembles, definida por:

$$\begin{aligned} [\hat{A}] &\equiv \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | \hat{A} | \alpha^{(i)} \rangle \\ &= \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | \hat{A} \sum_{a'} | a' \rangle \langle a' | | \alpha^{(i)} \rangle \\ &= \sum_i \sum_{a'} w_i \langle \alpha^{(i)} | \hat{A} | a' \rangle \langle a' | \alpha^{(i)} \rangle \\ &= \sum_i \sum_{a'} w_i \langle \alpha^{(i)} | a' \rangle \langle a' | \alpha^{(i)} \rangle a' \\ &= \sum_i \sum_{a'} w_i \langle \alpha^{(i)} | a' \rangle^* \langle \alpha^{(i)} | a' \rangle a' \\ &= \sum_i \sum_{a'} w_i \left\| \langle a' | \alpha^{(i)} \rangle \right\|^2 a', \end{aligned} \quad (3.2)$$

sendo que $|a'\rangle$ é um autovetor do operador \hat{A} e que $\langle \alpha^{(i)} | \hat{A} | \alpha^{(i)} \rangle$ trata-se do valor esperado habitual

para \hat{A} em relação a um estado $|\alpha^{(i)}\rangle$. Vemos na equação (3.2) que estes valores esperados precisam ser ponderados pelas populações relativas w_i . É possível observar também que $\|\langle a'|\alpha^{(i)}\rangle\|^2$ é a probabilidade do estado $|\alpha^{(i)}\rangle$ de ser encontrado em um autoestado $|a'\rangle$ após colapso do ket de estado e que w_i identifica a quantidade relativa de sistemas no estado quântico caracterizado por $|\alpha^{(i)}\rangle$.

Se considerarmos uma base genérica $\{|b'\rangle\}$, podemos reescrever a média sobre o ensemble (3.2) da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 [\hat{A}] &= \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | \sum_{b'} |b'\rangle \langle b'| \hat{A} \sum_{b''} |b''\rangle \langle b''| | \alpha^{(i)} \rangle \\
 &= \sum_i \sum_{b'} \sum_{b''} w_i \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \langle b' | \hat{A} | b'' \rangle \langle b'' | \alpha^{(i)} \rangle \\
 &= \sum_i \sum_{b'} \sum_{b''} w_i \langle b'' | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \langle b' | \hat{A} | b'' \rangle \\
 &= \sum_{b'} \sum_{b''} \left(\sum_i w_i \langle b'' | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \right) \langle b' | \hat{A} | b'' \rangle. \tag{3.3}
 \end{aligned}$$

O termo destacado entre parenteses é o elemento de matriz de um certo operador hermitiano, que denominamos **matriz densidade** ou ainda, **operador densidade** $\hat{\rho}$, conforme equações (3.4) e (3.5):

$$\langle b'' | \hat{\rho} | b' \rangle = \sum_i w_i \langle b'' | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \tag{3.4}$$

De forma geral, o operador densidade é definido como

$$\hat{\rho} \equiv \sum_i w_i |a^{(i)}\rangle \langle a^{(i)}|. \tag{3.5}$$

Uma vez determinado o operador densidade do sistema, podemos caracterizar o ensemble quântico em questão, de modo a obter todas as informações físicas encerradas por tal operador. Substituindo (3.4) em (3.3), podemos reescrever o valor esperado de \hat{A} como:

$$\begin{aligned}
 [\hat{A}] &= \sum_{b'} \sum_{b''} \langle b'' | \hat{\rho} | b' \rangle \langle b' | \hat{A} | b'' \rangle \\
 &= \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}), \tag{3.6}
 \end{aligned}$$

onde a operação $\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A})$ corresponde ao traço do operador resultante do produto entre $\hat{\rho}$ e \hat{A} , ficando assim explícito o poder desta construção, pois o traço independe da representação e pode ser calculado usando uma base conveniente.

3.1.1 Propriedades do Operador Densidade

Vamos agora nos ater a algumas propriedades do operador densidade:

Primeira propriedade: O operador densidade é hermitiano, ou seja:

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger. \tag{3.7}$$

Segunda propriedade: O operador densidade satisfaz a condição de normalização

$$\begin{aligned}
 \text{Tr } \rho &= \sum_i \sum_{b'} w_i \langle b' | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \\
 &= \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | \alpha^{(i)} \rangle \\
 &= 1.
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

Terceira propriedade: Podemos substituir o operador \hat{A} em (3.6) pelo próprio operador densidade, obtendo:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}(\hat{\rho}^2) &= \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{\rho}) \\
 &= \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | \left(\sum_j w_j |\alpha^{(j)}\rangle\langle\alpha^{(j)}| \right) | \alpha^{(i)} \rangle \\
 &= \sum_i \sum_j w_i w_j \langle \alpha^{(i)} | \alpha^{(j)} \rangle \langle \alpha^{(j)} | \alpha^{(i)} \rangle \\
 &= \sum_i \sum_j w_i w_j \langle \alpha^{(i)} | \alpha^{(j)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | \alpha^{(j)} \rangle^* \\
 &= \sum_i \sum_j w_i w_j \left\| \langle \alpha^{(i)} | \alpha^{(j)} \rangle \right\|^2.
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

Esse resultado precisa ser analisado, observando a desigualdade de Cauchy-Schwarz [8]

$$\left\| \langle \alpha^{(i)} | \alpha^{(j)} \rangle \right\|^2 \leq \langle \alpha^{(i)} | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(j)} | \alpha^{(j)} \rangle. \tag{3.10}$$

Como os kets $|\alpha^{(i)}\rangle$ são normalizados, ou seja, $\langle \alpha^{(i)} | \alpha^{(i)} \rangle = \langle \alpha^{(j)} | \alpha^{(j)} \rangle = 1$, obtemos a seguinte propriedade:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1. \tag{3.11}$$

É possível observar que quando se trata de um ensemble puro, ou seja, quando um dos pesos w_i tem valor 1 e o restante de valor 0, então

$$\hat{\rho} = |\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|. \tag{3.12}$$

Nesse caso, $\text{Tr}(\hat{\rho}^2)$ tem valor máximo, isto é,

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1. \tag{3.13}$$

Assim, é fácil provar que o operador densidade de um ensemble puro é idempotente, ou seja:

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \tag{3.14}$$

Para melhor compreensão dessas propriedades, vamos supor, por exemplo, um sistema de dois níveis onde o operador densidade é dado pela matriz

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}. \tag{3.15}$$

No primeiro caso, consideramos que 100% dos sistemas estão no ket estado $|\alpha\rangle$, onde

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle. \quad (3.16)$$

Então, calculamos:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= |\alpha\rangle\langle\alpha| \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \right) \times \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle 0| + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 1| \right) \\ &= \frac{1}{2} (|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Neste caso, é fácil observar que $\hat{\rho}$ satisfaz condição de normalização e, como esperado, representa um caso puro, pois

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{\rho}^2) &= \text{Tr} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \right\} \\ &= \text{Tr} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \right\} \\ &= \text{Tr}(\hat{\rho}) \\ &= 1 \end{aligned} \quad (3.18)$$

Em um segundo caso, temos que 50% dos sistemas estão no ket estado $|\alpha\rangle$ (3.16) e 50% estão no ket estado $|\beta\rangle$, onde

$$|\beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle. \quad (3.19)$$

Assim temos:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \frac{1}{2} |\alpha\rangle\langle\alpha| + \frac{1}{2} |\beta\rangle\langle\beta| \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \right) \times \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle 0| + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 1| \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \right) \times \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle 0| - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 1| \right) \\ &= \frac{1}{2} (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

O segundo caso também obedece a condição de normalização, mas diferente do primeiro caso, se trata de ensemble misto, pois

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}(\hat{\rho}^2) &= \text{Tr} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \right\} \\
 &= \text{Tr} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \right\} \\
 &= \frac{1}{2},
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

ou seja,

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) < 1. \tag{3.22}$$

3.1.2 Evolução Temporal do Operador Densidade

Agora, precisamos determinar como o operador densidade evolui no tempo. Para isso, devemos supor que para um tempo t_0 o operador densidade corresponde à

$$\hat{\rho}(t_0) = \sum_i w_i \left| \alpha^{(i)}(t_0) \right\rangle \left\langle \alpha^{(i)}(t_0) \right|. \tag{3.23}$$

Consideremos que o ensemble não sofre perturbação conforme evolui no tempo, ou seja, as populações relativas w_i se mantêm estáticas. Assim, a alteração de $\hat{\rho}$ acontece unicamente pela evolução temporal dos kets de estado $\left| \alpha^{(i)}(t_0) \right\rangle$.

$$\left| \alpha^{(i)}(t_0) \right\rangle \xrightarrow{\text{evolução temporal}} \left| \alpha^{(i)}(t) \right\rangle \tag{3.24}$$

Sabemos que $\left| \alpha^{(i)}(t) \right\rangle$ satisfaz equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left| \alpha^{(i)}(t) \right\rangle = \hat{H} \left| \alpha^{(i)}(t) \right\rangle, \tag{3.25}$$

então podemos derivar a equação (3.23) de modo que:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(t) &= \frac{\partial}{\partial t} \sum_i w_i \left| \alpha^{(i)}(t) \right\rangle \left\langle \alpha^{(i)}(t) \right| \\
 &= \sum_i w_i \frac{\partial}{\partial t} \left(\left| \alpha^{(i)}(t) \right\rangle \right) \left\langle \alpha^{(i)}(t) \right| + \sum_i w_i \left| \alpha^{(i)}(t) \right\rangle \frac{\partial}{\partial t} \left(\left\langle \alpha^{(i)}(t) \right| \right).
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

Substituindo (3.25) em (3.26), obtemos a equação

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \left(\sum_i w_i \left| \alpha^{(i)}(t) \right\rangle \left\langle \alpha^{(i)}(t) \right| \right) - \frac{1}{i\hbar} \left(\sum_i w_i \left| \alpha^{(i)}(t) \right\rangle \left\langle \alpha^{(i)}(t) \right| \right) \hat{H} \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \hat{\rho} - \frac{1}{i\hbar} \hat{\rho} \hat{H} \\
 &= -\frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}, \hat{H}],
 \end{aligned} \tag{3.27}$$

conhecida como equação de **Liouville-von Neumann**, que descreve a evolução temporal do operador densidade [6, 9]. Embora essa equação seja semelhante a equação de Heisenberg, exceto por um sinal negativo (−), é preciso lembrar que estamos trabalhando na formulação Schrödinger, visto que $\hat{\rho}$ é construído a partir de kets e bras que evoluem no tempo e obedecem a equação de Schrödinger.

4 INTERAÇÃO SISTEMA ATÔMICO DE DOIS NÍVEIS COM RADIAÇÃO

Neste capítulo aplicaremos a equação von-Neumann, que obtemos no capítulo 3, e a equação reduzida, obtida ao final do capítulo 2, a um sistema de dois níveis que sofre perturbação de um pulso de campo elétrico. Para isso, primeiramente, vamos obter o hamiltoniano que descreve a interação do átomo de dois níveis com a onda eletromagnética.

4.1 HAMILTONIANO PARA UM SISTEMA ATÔMICO DE DOIS NÍVEIS

Antes de obtermos o hamiltoniano para um sistema de dois níveis, vamos nos ater a um sistema clássico composto de uma partícula carregada na presença de um campo eletromagnético[10]. Nesta condição, a força que atua para a partícula com carga q corresponde à

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (4.1)$$

Podemos reescrever o campo elétrico (\mathbf{E}) e magnético (\mathbf{B}), escolhendo o potencial escalar $\phi(\mathbf{r}, t)$ e o potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \quad (4.2)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (4.3)$$

Assim, reescrevendo a força de Lorentz (4.1) em termos destes potenciais, temos que

$$\mathbf{F} = q \left(-\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi + \mathbf{v} \times \nabla \times \mathbf{A} \right). \quad (4.4)$$

Usando a identidade vetorial

$$\mathbf{v} \times \nabla \times \mathbf{A} = \nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{A}, \quad (4.5)$$

obtemos

$$\mathbf{F} = q \left[-\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi + \nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{A} \right]. \quad (4.6)$$

Partindo do fato que \mathbf{A} varia no tempo e no espaço, temos que sua derivada total é

$$\begin{aligned} d\mathbf{A} &\equiv \mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{v}dt, t + dt) - \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \\ &= \left(v_x \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x} + v_y \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial y} + v_z \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial z} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) dt \\ &= \left[(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{A} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right] dt. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Logo,

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{A} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \quad (4.8)$$

Substituindo esse resultado na equação (4.6), temos:

$$\mathbf{F} = q \left[-\frac{d\mathbf{A}}{dt} - \nabla\phi + \nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \right]. \quad (4.9)$$

Assim, a equação de movimento para uma partícula carregada se torna

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q \left[-\frac{d\mathbf{A}}{dt} - \nabla\phi + \nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \right]. \quad (4.10)$$

ou

$$m \frac{d}{dt} [\mathbf{v} + q\mathbf{A}] = -\nabla[q\phi + q(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A})]. \quad (4.11)$$

examinando esta equação, podemos reescreve-la na forma de uma equação de Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \right) = \nabla L, \quad (4.12)$$

se adotarmos a lagrangiana

$$L = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 + q(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - q\phi. \quad (4.13)$$

Como vamos trabalhar com um sistema atômico, é necessário adicionar a essa equação o potencial eletrostático $V(\mathbf{r})$, referente a interação do elétron com o núcleo atômico, e usar a carga do elétron $q = e$. Assim, obtemos

$$L = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 + e(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - e\phi - V(\mathbf{r}). \quad (4.14)$$

Aplicando a transformação de legendre apropriada a lagrangiana, usando a definição de momento conjugado $p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} = mv_i + eA_i$, obtemos o hamiltoniano de acoplamento mínimo [11, 12]

$$H = (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + e\phi + V(\mathbf{r}). \quad (4.15)$$

Esse hamiltoniano é invariante à transformação de calibre

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\gamma \quad (4.16)$$

$$\phi' = \phi - \frac{\partial\gamma}{\partial t}, \quad (4.17)$$

onde λ é a função de calibre.

A equação de Schrödinger dependente do tempo é

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi. \quad (4.18)$$

Para resolvermos esta equação é ideal realizar uma transformação unitária \hat{U} , considerando que $\psi' = \hat{U}\psi$. Isso é necessário para simplificarmos a equação que obteremos do termo responsável pela interação da radiação com o átomo. Precisamos manter a equação de Schrödinger invariante a esta transformação unitária, então escrevemos o novo hamiltoniano da seguinte forma:

$$\hat{H}' = \hat{U} \hat{H} \hat{U}^\dagger + i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \hat{U}^\dagger. \quad (4.19)$$

Escolhendo a transformação unitária $\hat{U} = e^{i\frac{e}{\hbar}\gamma}$, obtemos o seguinte hamiltoniano \hat{H}'

$$\hat{H}' = (\mathbf{p} - e\mathbf{A}')^2 + q\phi' + V(\mathbf{r}), \quad (4.20)$$

onde \mathbf{A}' e ϕ' são dados pelas equações (4.16) e (4.17).

Fazendo $\phi = 0$ e realizando a escolha do calibre de Coulomb, onde $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, temos:

$$\hat{H}' = (\mathbf{p} - e\mathbf{A} - e\nabla\gamma)^2 - e\frac{\partial\gamma}{\partial t} + V(\mathbf{r}). \quad (4.21)$$

Supondo que os átomos estão imersos em uma onda plana monocromática, podemos escrever o potencial vetor da seguinte forma:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{A_0(\omega)\hat{\epsilon}}{2} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} + c.c. \quad (4.22)$$

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = 2\pi \cdot \frac{r}{\lambda}$, onde λ é o comprimento de onda do campo. Em geral, o comprimento de onda é muito maior, $4000 \leq 8000 \leq 0 \text{ \AA}$, comparadas as dimensões atômicas, $|\mathbf{r}| \simeq 10^0 \text{ \AA}$. Por isso, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \ll 1$. Assim, podemos desprezar os termos de ordem maior que 0 da seguinte expansão em série de Taylor de $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{A_0(\omega)\hat{\epsilon}}{2} e^{-i\omega t} \left[1 + (i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \frac{1}{2}(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})^2 + \dots \right], \quad (4.23)$$

implicando que $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \simeq \mathbf{A}(t) = \frac{A_0(\omega)\hat{\epsilon}}{2} e^{-i\omega t}$. Agora, escolhendo a função de calibre de Coulomb como $\gamma = -\mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{r}$, obtemos

$$\nabla\lambda = -\mathbf{A}(t) \quad (4.24)$$

e

$$\frac{\partial\lambda}{\partial t} = -\mathbf{r} \frac{\partial\mathbf{A}(t)}{\partial t} = \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t). \quad (4.25)$$

Substituindo estes resultados na equação do hamiltoniano \hat{H}' (4.21), obtemos

$$\hat{H}' = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}, \quad (4.26)$$

onde $\mathbf{d} = e\mathbf{r}$ é o momento de dipolo elétrico e e é a carga do elétron. Os dois primeiros termos se referem ao átomo não perturbado ($H_0 = \mathbf{p}^2/2m + V(\mathbf{r})$) e o último termo é referente a interação com o campo elétrico na aproximação de dipolo ($H_{int} = -\mathbf{d}\mathbf{E}$) [11, 12]. Esta aproximação será utilizada no decorrer deste trabalho.

4.2 SISTEMA ATÔMICO DE DOIS NÍVEIS

Neste TCC, usaremos o sistema de dois níveis, sistema quântico simples que é descrito em duas dimensões no espaço de Hilbert. Com esse sistema, poderemos estudar de maneira simples e detalhada as principais propriedades físicas inerentes ao processo de interação de radiação com a matéria. Isso é possível, pois, apesar de sua simplicidade, existem fenômenos quânticos em que a sua utilização é satisfatória. Alguns exemplos são problemas que envolvem polarização de fótons, spin do elétron, oscilações dos neutrinos e o caso em que aplicaremos, um sistema atômico que possui dois níveis em ressonância (ou próximo da ressonância) com o campo eletromagnético aplicado e os demais níveis estão em dessintonia total com esse campo [3].

Para um sistema de dois níveis interagindo com campo eletromagnético, utilizamos o Hamiltoniano com aproximação dipolar, que apresentamos no subcapítulo anterior.

$$H_{int} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}. \quad (4.27)$$

Essa equação representa a energia de um dipolo elétrico inserido num campo elétrico E . Para isso, consideramos que um único elétron é o responsável pelo surgimento do momento de dipolo elétrico[].

O sistema de dois níveis sem perturbação possui dois valores prováveis de energia. O estado $|1\rangle$ com energia $E_1 = \hbar\omega_1$ e o estado $|2\rangle$ com energia $E_2 = \hbar\omega_2$. De acordo com descrição de Bohr, a transição entre os níveis atômicos $|1\rangle$ e $|2\rangle$ é dada pela frequência

$$\omega_{21} = \omega_2 - \omega_1 \quad (4.28)$$

$$= (E_2 - E_1)/\hbar. \quad (4.29)$$

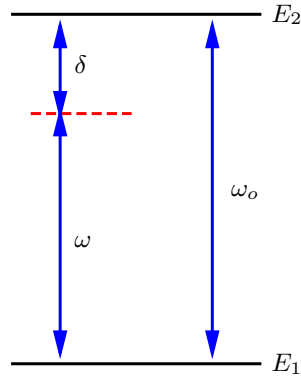


Figura 4.1: Níveis de energia de um hipotético "átomo de dois níveis". A "dessintonia" $\delta = \omega_0 - \omega$ é a diferença entre $(E_2 - E_1)/\hbar$ e ω . A radiação da frequência angular ω é quase ressonante com a transição $E_1 \rightarrow E_2$, quando $\delta \ll \omega_0 - \omega$.

A função de onda para o sistema de dois níveis é

$$|\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle, \quad (4.30)$$

onde c_1 e c_2 as amplitudes de probabilidade de encontrar o átomo nos estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$, respectivamente. Apesar de ser possível obter as equações de movimento para nosso sistema utilizando a representação de Schrödinger, é mais conveniente utilizarmos o formalismo de matriz densidade, que apresentamos no capítulo 3. Isso é necessário, pois estamos trabalhando com um grande número de átomos interagindo com o campo. Neste caso, o cálculo das amplitudes de probabilidade seria muito complexo, pois teríamos que calcular esta amplitude para cada átomo do nosso sistema. Em contrapartida, no formalismo de matriz densidade não precisamos ter a informação completa do vetor onda, pois nos importamos apenas com as informações estatísticas do operador densidade. Assim, diminuimos o custo computacional para lidar com um número grande de átomos interagindo com o campo.

A matriz densidade para um sistema de dois níveis descrito pela equação (4.30), e dado por:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1 c_2^* \\ \frac{c_2 c_1^*}{|c_1|^2} & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

Sendo que, as componentes da diagonal principal correspondem as probabilidade de encontrar as populações atômicas no estado fundamental ($|1\rangle$) ou estado excitado ($|2\rangle$). Os elementos fora da diagonal principal correspondem a coerência entre os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$. Os elementos ρ_{nm} da matriz densidade se relaciona às amplitudes de probabilidade da seguinte forma:

$$\rho_{nm} = \sum_i w_i c_n^i c_m^{i*} \quad (4.32)$$

O hamiltoniano do átomo livre, com aproximação de dois níveis, é dado por

$$\hat{H}_0 = \hbar\omega_1 |1\rangle\langle 1| + \hbar\omega_2 |2\rangle\langle 2| \quad (4.33)$$

sendo $\hbar\omega_1$ e $\hbar\omega_2$ são os valores de energia para os estado $|1\rangle$ e $|2\rangle$, respectivamente.

Um campo eletromagnético externo clássico, com frequência ω_c , é dado por

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}\mathbf{E}_0 e^{i\omega_c t} + c.c. \quad (4.34)$$

O átomo não possui momento de dipolo quanto está num estado de energia, então $\langle 1|\hat{d}|1\rangle = \langle 2|\hat{d}|2\rangle = 0$. Assim, podemos definir

$$\hat{d} = d_{12} |1\rangle\langle 2| + d_{21} |2\rangle\langle 1|. \quad (4.35)$$

A partir das equações (4.33) e (4.34), podemos reescrever o hamiltoniano da interação na aproximação de dipolo da seguinte forma

$$\hat{H}_{int} = -\left(\frac{1}{2}\mathbf{E}_0 e^{i\omega_c t} + \frac{1}{2}\mathbf{E}_0^* e^{-i\omega_c t}\right)d_{12} |1\rangle\langle 2| - \left(\frac{1}{2}\mathbf{E}_0 e^{i\omega_c t} + \frac{1}{2}\mathbf{E}_0^* e^{-i\omega_c t}\right)d_{21} |2\rangle\langle 1|. \quad (4.36)$$

Agora vamos nos aproveitar do fato que o sistema atômico de dois níveis está próximo à ressonância com o campo eletromagnético, para realizar uma aproximação ao hamiltoniano. Primeiramente, vamos fazer uma transformação unitária ao hamiltoniano (4.35) para sairmos da representação de Schrödinger para a representação de Dirac. Para isso, aplicamos o operador de transformação unitária

$$\hat{U} = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} = e^{i\omega_1 t} |1\rangle\langle 1| + e^{i\omega_2 t} |2\rangle\langle 2|, \quad (4.37)$$

e, assim, obtemos o seguinte hamiltoniano

$$\begin{aligned} \hat{H}_{D,int} &= \hat{U} \hat{H}_{int} \hat{U}^\dagger \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\omega_1 t} & 0 \\ 0 & e^{i\omega_2 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -d_{12}\mathbf{E} \\ -d_{21}\mathbf{E} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\omega_1 t} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_2 t} \end{pmatrix} \\ &= (\mathbf{E}_0 e^{i\omega_c t} + \mathbf{E}_0^* e^{-i\omega_c t}) \frac{d_{12}}{2} e^{-i\omega_{21} t} |1\rangle\langle 2| \\ &+ (\mathbf{E}_0 e^{i\omega_c t} + \mathbf{E}_0^* e^{-i\omega_c t}) \frac{d_{21}}{2} e^{i\omega_{21} t} |2\rangle\langle 1| \\ &= (\mathbf{E}_0 e^{i\delta t} + \mathbf{E}_0^* e^{-i(\omega_c + \omega_{21})t}) \frac{d_{12}}{2} |1\rangle\langle 2| \\ &+ (\mathbf{E}_0 e^{i(\omega_c + \omega_{21})t} + \mathbf{E}_0^* e^{-i\delta t}) \frac{d_{21}}{2} |2\rangle\langle 1|, \end{aligned} \quad (4.38)$$

onde $\delta = \omega_c - \omega_{21}$ é a dessintonia entre o campo e o átomo. Como o campo está próximo da ressonância com átomo, $\delta \ll \omega_c + \omega_{21}$. Isso significa que os termos que oscilam com frequência $(\omega_c + \omega_{21})$ oscilam rapidamente em relação ao termos que oscilam com frequência δ , por isso podemos ignorar esse termos, utilizando a aproximação de onda girante (RWA - Rotating Wave Approximation)[11]. Nesta condições, a equação do hamiltoniano (equação anterior) se reduz em

$$\hat{H}_{D,int} = \frac{d_{12}}{2}\mathbf{E}_0 e^{i\delta t} |1\rangle\langle 2| + \frac{d_{21}}{2}\mathbf{E}_0^* e^{-i\delta t} |2\rangle\langle 1|, \quad (4.39)$$

Finalmente, podemos retornar o hamiltoniano a representação de Schrödinger:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{int} &= \hat{U}^\dagger \hat{H}_{D,int} \hat{U} \\
&= \begin{pmatrix} e^{-i\omega_1 t} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_2 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{d_{12}}{2} \mathbf{E}_0 e^{i\delta t} \\ \frac{d_{21}}{2} \mathbf{E}_0^* e^{-i\delta t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\omega_1 t} & 0 \\ 0 & e^{i\omega_2 t} \end{pmatrix} \\
&= \frac{d_{12}}{2} \mathbf{E}_0 e^{i\delta t} e^{i\omega_{21} t} |1\rangle\langle 2| + \frac{d_{21}}{2} \mathbf{E}_0^* e^{-i\delta t} e^{-i\omega_{21} t} |2\rangle\langle 1| \\
&= \frac{d_{12}}{2} \mathbf{E}_0 e^{i\omega_c t} |1\rangle\langle 2| + \frac{d_{21}}{2} \mathbf{E}_0^* e^{-i\omega_c t} |2\rangle\langle 1|. \tag{4.40}
\end{aligned}$$

Com isso, a expressão para o Hamiltoniano total do sistema de dois níveis com perturbação de campo eletromagnético é dada por:

$$\hat{H}_0 = \hbar\omega_1 |1\rangle\langle 1| + \hbar\omega_2 |2\rangle\langle 2| - \frac{d_{12}}{2} \mathbf{E}_0 e^{i\omega_c t} |1\rangle\langle 2| - \frac{d_{21}}{2} \mathbf{E}_0^* e^{-i\omega_c t} |2\rangle\langle 1| \tag{4.41}$$

No capítulo 3 nós obtemos a equação de J. von-Neuman (3.27), que descreve a evolução temporal da matriz densidade. Vamos utilizar essa equação para obtermos a evolução temporal para o sistema interagente, mas precisaremos inserir de forma fenomenológica o termo de decaimento referente a emissão espontânea ou ocasionados por colisões entre átomos[4]. Assim, equação (3.27) para o elemento da matriz densidade se torna

$$\frac{d\hat{\rho}_{nm}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}, \hat{H}]_{nm} - \gamma_{nm}(\rho_{nm} - \rho_{nm}^{(eq)}) \tag{4.42}$$

O termo à direita é o termo fenomenológico de decaimento, ao qual, indica que a relaxação da população ρ_{nm} para seu valor de equilíbrio $\rho_{nm}^{(eq)}$ ocorre a uma taxa γ_{nm} . Assumimos que $\gamma_{nm} = \gamma_{mn}$, por se tratar de uma taxa de decaimento. Além disso, supomos que

$$\rho_{nm}^{(eq)} = 0 \text{ para } n \neq m. \tag{4.43}$$

Isso significa que em equilíbrio térmico os estados excitados podem conter população ($\rho_{nn}^{(eq)}$ pode ser diferente de zero), porém essa excitação térmica não pode produzir superposição coerente de estados atômicos ($\rho_{nm}^{(eq)} = 0$ para $n \neq m$). Outra maneira de descrever os fenômenos de decaimento é considerarmos que os elementos fora da diagonal principal da matriz densidade relaxam, conforme descrito acima, mas para descrevermos os termos da diagonal principal, de forma a permitir que a população decaia dos níveis mais altos para níveis mais baixos, representados da seguinte forma:

$$\frac{d\hat{\rho}_{nm}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}, \hat{H}]_{nm} - \gamma_{nm}\rho_{nm} \text{ para } n \neq m \tag{4.44}$$

$$\frac{d\hat{\rho}_{nn}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}, \hat{H}]_{nn} + \sum_{E_m > E_n} \Gamma_{nm}\rho_{mm} - \sum_{E_m < E_n} \Gamma_{mn}\rho_{nn} \tag{4.45}$$

onde Γ_{nm} representa a taxa por átomo em que a população decai do estado $|m\rangle$ para o estado $|n\rangle$ e γ_{nm} representa a taxa de relaxamento de ρ_{nm} .

Considerando que o estado $|n\rangle$ tem um tempo de vida $\tau = 1/\Gamma_n$, onde Γ_n é a taxa de decaimento total da população fora do nível $|n\rangle$ dada por

$$\Gamma_n = \sum_{E'_n < E_n} \Gamma_{n'n}, \tag{4.46}$$

podemos dizer que a probabilidade de encontrar o sistema no estado $|n\rangle$ diminui da seguinte forma:

$$|c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2 e^{-\Gamma_n t}. \quad (4.47)$$

Assim, a amplitude de probabilidade, que varia no tempo, obedece a relação

$$c_n(t) = c_n(0) e^{-i\omega_n t} e^{-\frac{\Gamma_n t}{2}}. \quad (4.48)$$

A amplitude de probabilidade para um estado $|m\rangle$ obedece a mesma forma

$$c_m(t) = c_m(0) e^{-i\omega_m t} e^{-\frac{\Gamma_m t}{2}}. \quad (4.49)$$

Isso significa que a coerência entre os dois estados deve variar, conforme

$$c_n(t)c_m^*(t) = c_n(0)c_m^*(0) e^{-i\omega_{mn}t} e^{-(\Gamma_n + \Gamma_m)\frac{t}{2}}. \quad (4.50)$$

Sabemos que ρ_{mn} é obtido a partir da média dos ensembles de $c_n c_m^*$ e sua taxa de decaimento é γ_{mn} . Com isso, obtemos uma relação entre as taxas de decaimento dos elementos fora da diagonal principal com os elementos da diagonal principal, dada por

$$\gamma_{mn} = \frac{1}{2}(\Gamma_n + \Gamma_m). \quad (4.51)$$

Para calculamos os elementos ρ_{nm} da matriz densidade com $n \neq m$, para sistema de dois níveis, partimos da equação (4.44). Assim podemos calcular $\dot{\rho}_{12}$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle 1|\hat{\rho}|2\rangle = \frac{i}{\hbar} \langle 1|[\hat{\rho}, \hat{H}]|2\rangle - \gamma_{12}\rho_{12} \quad (4.52)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \langle 1|\hat{\rho}\hat{H} - \hat{H}\hat{\rho}|2\rangle - \gamma_{12}\rho_{12} \quad (4.53)$$

$$= \frac{i}{\hbar} (\langle 1|\hat{\rho}\hat{H}|2\rangle - \langle 1|\hat{H}\hat{\rho}|2\rangle) - \gamma_{12}\rho_{12} \quad (4.54)$$

$$= \frac{i}{\hbar} (\hbar\omega_2\rho_{12} - \frac{d_{12}}{2}E_0 e^{i\omega_c t}\rho_{11} - \hbar\omega_1\rho_{12} + \frac{d_{12}}{2}E_0 e^{i\omega_c t}\rho_{22}) - \gamma_{12}\rho_{12} \quad (4.55)$$

$$= (i\omega_{21} - \gamma_{12})\rho_{12} + i\frac{d_{12}}{2\hbar}E_0 e^{i\omega_c t}(\rho_{22} - \rho_{11}) \quad (4.56)$$

e $\dot{\rho}_{21}$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle 2|\hat{\rho}|1\rangle = \frac{i}{\hbar} \langle 2|[\hat{\rho}, \hat{H}]|1\rangle - \gamma_{21}\rho_{21} \quad (4.57)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \langle 2|\hat{\rho}\hat{H} - \hat{H}\hat{\rho}|1\rangle - \gamma_{21}\rho_{21} \quad (4.58)$$

$$= \frac{i}{\hbar} (\langle 2|\hat{\rho}\hat{H}|1\rangle - \langle 2|\hat{H}\hat{\rho}|1\rangle) - \gamma_{21}\rho_{21} \quad (4.59)$$

$$= \frac{i}{\hbar} (\hbar\omega_1\rho_{21} - \frac{d_{21}}{2}E_0^* e^{-i\omega_c t}\rho_{22} - \hbar\omega_2\rho_{21} + \frac{d_{21}}{2}E_0^* e^{-i\omega_c t}\rho_{11}) - \gamma_{21}\rho_{21} \quad (4.60)$$

$$= -(i\omega_{21} + \gamma_{21})\rho_{21} - i\frac{d_{21}}{2\hbar}E_0^* e^{-i\omega_c t}(\rho_{22} - \rho_{11}). \quad (4.61)$$

O calculo para os elementos da diagonal principal da matriz densidade são obtidos pela equação (4.45).

Assim, $\dot{\rho}_{11}$ é dado por

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle 1|\hat{\rho}|1\rangle = \frac{i}{\hbar} \langle 1|[\hat{\rho}, \hat{H}]|1\rangle + \Gamma_{21}\rho_{22} \quad (4.62)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \langle 1|\hat{\rho}\hat{H} - \hat{H}\hat{\rho}|1\rangle + \Gamma_{21}\rho_{22} \quad (4.63)$$

$$= \frac{i}{\hbar} (\langle 1|\hat{\rho}\hat{H}|1\rangle - \langle 1|\hat{H}\hat{\rho}|1\rangle) + \Gamma_{21}\rho_{22} \quad (4.64)$$

$$= \frac{i}{\hbar} (\hbar\omega_1\rho_{11} - \frac{d_{21}}{2}E_0^*e^{-i\omega_c t}\rho_{12} - \hbar\omega_1\rho_{11} + \frac{d_{12}}{2}E_0e^{i\omega_c t}\rho_{21}) + \Gamma_{21}\rho_{22} \quad (4.65)$$

$$= \frac{d_{12}}{2\hbar}E_0e^{i\omega_c t}\rho_{21} - \frac{d_{21}}{2}E_0^*e^{-i\omega_c t}\rho_{12} + \Gamma_{21}\rho_{22} \quad (4.66)$$

e $\dot{\rho}_{22}$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle 2|\hat{\rho}|2\rangle = \frac{i}{\hbar} \langle 2|[\hat{\rho}, \hat{H}]|2\rangle - \Gamma_{21}\rho_{22} \quad (4.67)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \langle 2|\hat{\rho}\hat{H} - \hat{H}\hat{\rho}|2\rangle - \Gamma_{21}\rho_{22} \quad (4.68)$$

$$= \frac{i}{\hbar} (\langle 2|\hat{\rho}\hat{H}|2\rangle - \langle 2|\hat{H}\hat{\rho}|2\rangle) - \Gamma_{21}\rho_{22} \quad (4.69)$$

$$= \frac{i}{\hbar} (\hbar\omega_2\rho_{22} - \frac{d_{12}}{2}E_0e^{i\omega_c t}\rho_{21} - \hbar\omega_2\rho_{22} + \frac{d_{21}}{2}E_0^*e^{-i\omega_c t}\rho_{12}) - \Gamma_{21}\rho_{22} \quad (4.70)$$

$$= -\frac{d_{12}}{2\hbar}E_0e^{i\omega_c t}\rho_{21} + \frac{d_{21}}{2}E_0^*e^{-i\omega_c t}\rho_{12} - \Gamma_{21}\rho_{22} \quad (4.71)$$

Para simplificarmos essas equações, devemos considerar o fato que $\rho_{11} + \rho_{22} = 1$ e $\rho_{12} = \rho_{21}^*$. Fazendo $d_{12} = d_{21}$, definimos a frequência de Rabi

$$\Omega_0 = \frac{d_{12}}{\hbar}E_0. \quad (4.72)$$

Assim, obtemos

$$\dot{\rho}_{12} = (i\omega_{21} - \gamma_{12})\rho_{12} - i\frac{\Omega_0}{2}e^{i\omega_c t}(1 - 2\rho_{22}) \quad (4.73)$$

$$\dot{\rho}_{22} = -i\frac{\Omega_0}{2}e^{i\omega_c t}\rho_{12}^* + i\frac{\Omega_0^*}{2}e^{-i\omega_c t}\rho_{12} - \Gamma_{21}\rho_{22} \quad (4.74)$$

Podemos reescrever as equações acima, realizando as seguintes mudanças de variáveis

$$\rho_{12} \equiv \sigma_{12}e^{i\omega_c t} \quad (4.75)$$

$$\rho_{22} \equiv \sigma_{22}. \quad (4.76)$$

Assim, obtemos as equações de bloch ópticas

$$\dot{\sigma}_{12} = (i\delta - \gamma_{12})\sigma_{12} - i\frac{\Omega_0}{2}(1 - 2\sigma_{22}) \quad (4.77)$$

$$\dot{\sigma}_{22} = -i\frac{\Omega_0}{2}\sigma_{12}^* + i\frac{\Omega_0^*}{2}\sigma_{12} - \Gamma_{21}\sigma_{22} \quad (4.78)$$

4.3 EQUAÇÕES

Exemplo de equação centralizada:

$$a^2 = b^2 + c^2. \quad (4.79)$$

Substituindo esse resultado o hamiltoniana H'

Exemplo de equação no texto: $e^{ix} = \cos x + i \sin x$. Citação de equação: 4.79.

4.4 TABELAS

Exemplo de tabela:

$\sin x$	$\cos x$	$\tan x$
$\sec x$	$\csc x$	$\cot x$
$\arcsin x$	$\arccos x$	$\arctan x$
$\sinh x$	$\cosh x$	$\tanh x$

Tabela 4.1: Funções trigonométricas e hiperbólicas.

4.5 CÓDIGOS

Exemplo de código (linguagem C):

```

1 #include<stdio.h>
2
3 int k;
4
5 main ()
6 {
7     for (k=1; k<=5; k++)
8         printf("Física - UNIR - Ji-Paraná\n");
9 }
```

4.6 CITAÇÃO

Exemplo de citação:

Bla
Bla
Bla
Bla
Bla
Bla
Bla
Bla Bla Bla Bla Bla Bla Bla Bla Bla Bla Bla Bla Bla Bla Bla Bla Bla Bla Bla Bla

Citando um trabalho: (ARAÚJO, 2004).

5 OUTRO CAPÍTULO

Digite aqui o conteúdo de outro capítulo.

$\sin x$	$\cos x$	$\tan x$
$\sec x$	$\csc x$	$\cot x$
$\arcsin x$	$\arccos x$	$\arctan x$
$\sinh x$	$\cosh x$	$\tanh x$

Tabela 5.1: Funções trigonométricas e hiperbólicas.

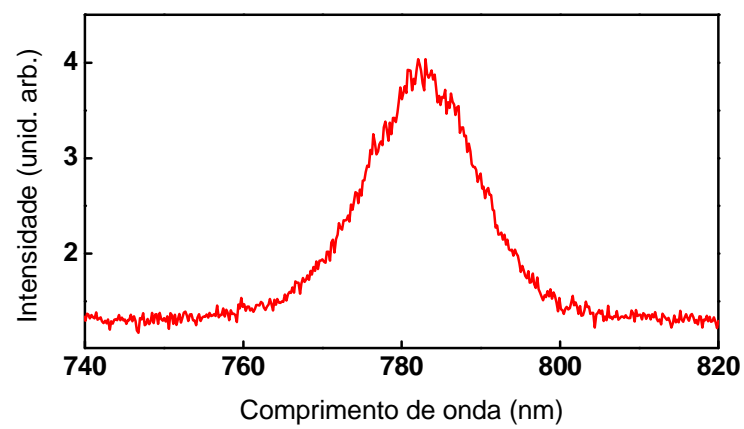


Figura 5.1: Espectro de um laser de femtossegundos.

6 CONCLUSÃO

Digite a conclusão do TCC aqui.

REFERÊNCIAS

- [1] J. Jackson, *CLASSICAL ELECTRODYNAMICS, 3RD ED.* Jhon Wiley, 1998.
- [2] D. Griffiths, *Eletrodinâmica*. Pearson Addison Wesley, 2011.
- [3] L. Allen and J. Eberly, *Optical Resonance and Two-level Atoms*. Dover books on physics and chemistry, Dover, 1987.
- [4] R. W. Boyd, “The nonlinear optical susceptibility,” *Nonlinear optics*, vol. 3, pp. 1–67, 2008.
- [5] J. Diels, W. Rudolph, P. Liao, and P. Kelley, *Ultrashort Laser Pulse Phenomena*. Electronics & Electrical, Elsevier Science, 2006.
- [6] J. Sakurai, J. Napolitano, and S. Dahmen, *Mecânica quântica moderna*. Bookman, 2013.
- [7] H.-P. Breuer, F. Petruccione, *et al.*, *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press on Demand, 2002.
- [8] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics, Volume 1: Basic Concepts, Tools, and Applications*. Wiley, 2019.
- [9] R. Field and A. Tokmakoff, *5.74 Introductory Quantum Mechanics II*. Massachusetts Institute of Technology: MIT OpenCourseWare, Spring 2004.
- [10] J. Taylor, *Mecânica Clássica*. Bookman Editora, 2013.
- [11] M. Scully and M. Zubairy, *Quantum Optics*. Cambridge University Press, 1997.
- [12] P. Meystre and M. Sargent, *Elements of Quantum Optics*. SpringerLink: Springer e-Books, Springer Berlin Heidelberg, 2007.

TÍTULO DO PRIMEIRO APÊNDICE

Digite o primeiro apêndice aqui.

TÍTULO DO SEGUNDO APÊNDICE

Digite o segundo apêndice aqui.