

**ELITON TRINDADE GOMES**



**PROPAGAÇÃO DE PULSOS DE LUZ EM SISTEMAS ATÔMICOS**

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



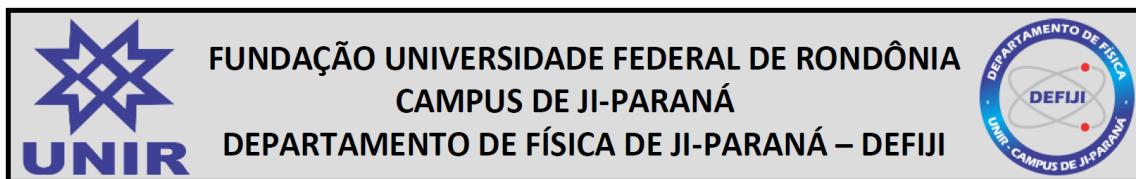
**ELITON TRINDADE GOMES**

**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 $\omega$ . A radiação da frequência angular $\omega$ 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

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Propagação de ondas eletromagnéticas em meio linear</b>	<b>3</b>
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
<b>3</b>	<b>Mecânica Quântica e Operador Densidade</b>	<b>13</b>
3.1	Matriz densidade . . . . .	13
3.1.1	Propriedades do Operador Densidade . . . . .	14
3.1.2	Evolução Temporal do Operador Densidade . . . . .	17
<b>4</b>	<b>Interação sistema atômico de dois níveis com radiação</b>	<b>19</b>
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
<b>5</b>	<b>Outro capítulo</b>	<b>29</b>
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>31</b>
	<b>Título do Primeiro Apêndice</b>	<b>35</b>
	<b>Título do Segundo Apêndice</b>	<b>37</b>



## 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 [5, 6]:

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

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

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

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

A lei de Gauss apresenta a existência de cargas elétricas positiva e negativa, sendo  $\varrho_l$  ( $C/m^3$ ) 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  $\varrho_l$ ,  $\mathbf{J}_l$  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  $z$  [7]:

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

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 [8, 9].

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 [9]. 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  $\chi_e$  [5, 6], 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  $\omega_0$  na frequência central  $\omega_c$

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

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  $\omega_c$ , assim como fizemos para  $k(\omega)$ , de forma que:

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

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  $(\eta, \tau)$  movendo-se com a velocidade do grupo  $v_g = \left(\frac{dk}{d\omega}\bigg|_{\omega_c}\right)^{-1}$ , 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 [1].

#### 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 [2]. 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 [3]

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

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

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

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 [1, 4]. 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  $\lambda$  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  $\phi'$  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  $\lambda$  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 [7].

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

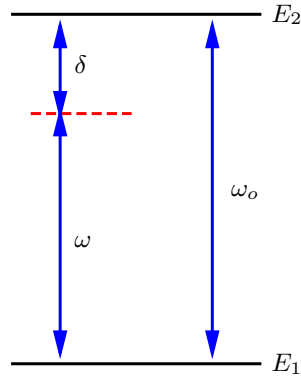
$$H_{int} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}. \quad (4.27)$$

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  $\omega$ . A radiação da frequência angular  $\omega$  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  $\rho_{nm}$  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  $\omega_c$ , 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  $\delta$ , 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[8]. 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  $\rho_{nm}$  para seu valor de equilíbrio  $\rho_{nm}^{(eq)}$  ocorre a uma taxa  $\gamma_{nm}$ . 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  $\Gamma_{nm}$  representa a taxa por átomo em que a população decai do estado  $|m\rangle$  para o estado  $|n\rangle$  e  $\gamma_{nm}$  representa a taxa de relaxamento de  $\rho_{nm}$ .

Considerando que o estado  $|n\rangle$  tem um tempo de vida  $\tau = 1/\Gamma_n$ , onde  $\Gamma_n$  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  $\rho_{mn}$  é obtido a partir da média dos ensembles de  $c_n c_m^*$  e sua taxa de decaimento é  $\gamma_{mn}$ . 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  $\rho_{nm}$  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).

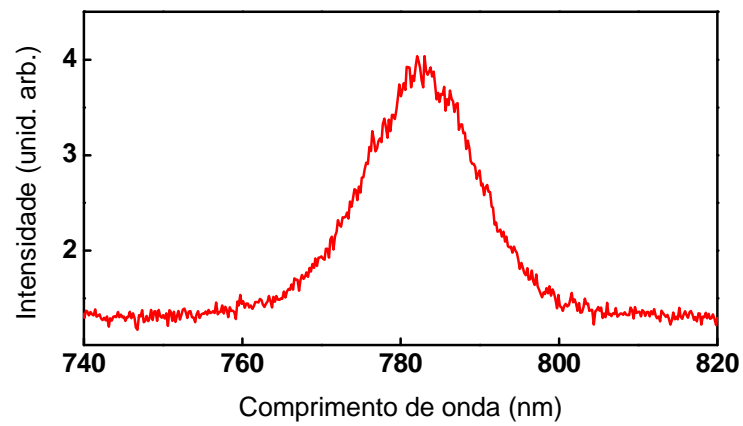


## 5 OUTRO CAPÍTULO

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