

Universidade Federal de Uberlândia Curso de Bacharelado em Física de Materiais

Modelo de Jaynes Cummings

Isabella Pereira Tobias

Uberlândia

2019

Isabella Pereira Tobias

Modelo de Jaynes-Cummings

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao colegiado do curso de Física de Materiais da Universidade Federal de Uberlândia, para obtenção do título de Bacharel em Física de Materiais, como requisito parcial para conclusão de curso.

Instituto de Física - INFIS

Orientador: Prof. Dr. Augusto Miguel Alcalde Milla

Uberlândia 2019 Isabella Pereira Tobias

Modelo de Jaynes-Cummings

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao colegiado do curso de Física de Materiais da Universidade Federal de Uberlândia, para obtenção do título de Bacharel em Física de Materiais, como requisito parcial para conclusão de curso.

Uberlândia, 11 de julho de 2019:

Prof. Dr. Augusto Miguel Alcalde Milla Orientador

> **Prof. Dr. Viviane Pilla** Membro da banca

Prof. Dr. Daiane Damasceno Borges Membro da banca

> Uberlândia 2019

 \hat{A} minha mãe Maiza Silva, por sempre estar comigo.

Agradecimentos

Agradeço à minha mãe, Maiza Silva, pelo apoio emocional e financeiro

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Augusto Alcalde, por todos os conselhos, pela paciência e ajuda nesses dois últimos períodos.

Aos meus amigos pelos incentivos durante minha trajetória neste curso.

Aos professores que me guiaram até aqui.

À Universidade Federal de Uberlândia pelo apoio financeiro para realização deste trabalho de pesquisa.

"Um homem inteligente pode transformar-se num João-bobo, quando não sabe valer-se de seus recursos naturais." (William Shakespeare)

Resumo

O intuito deste trabalho é estudar o comportamento físico da interação radiação-matéria pela introdução de conceitos envolvidos no Modelo de Jaynes-Cummings, a partir do estudo dos modelos semiclássico e quântico para a interação entre a radiação do campo eletromagnético e um átomo de dois níveis. Para compreendê-lo precisamente foi empreendida uma revisão abrangente dos conceitos matemáticos da mecânica quântica. Em seguida, a interação foi estudada considerando os dois modelos supracitados e a aproximação de onda girante (RWA, rotating wave approximation). Através do cálculo da probabilidade de ocupação, diversos regimes de parâmetros serão explorados, em particular, para testar os limites do modelo e suas aplicações em diversas situações de interesse.

Palavras-chaves: oscilações de Rabi. RWA. Jaynes-Cummings.

Abstract

This paper aims to study the physical behaviour of radiation-matter interaction by introducing concepts involved in the Jaynes-Cummings model, based on the study of semiclassical and quantum models for the interaction between electromagnetic field radiation and a two-level atom. To understand it precisely, a wider review of the mathematical concepts of quantum mechanics was undertaken. Subsequently, the interaction was studied considering the two models mentioned above and the rotating wave approximation (RWA). By calculating the probability of occupation, several parameter regimes will be particularly explored in order to test the limits of the model and its applications in various situations of interest.

Keywords: Rabi oscillations. RWA. Jaynes-Cummings.

Lista de ilustrações

Figura 1 –	Sistema de dois níveis com energia de transição $\hbar\omega_a$, um modo de campo	
	eletromagnético com frequência aproximadamente ressonante $\omega_c \sim \omega_a$	
	$(\Delta \sim 0)$ induz transições entre os dois níveis	27
Figura 2 –	Representação esquemática das energias para um átomo de dois níveis.	
	A escolha do zero de energia é arbitrária	33
Figura 3 –	Microcavidade óptica em uma dimensão. A largura da cavidade define	
	as frequências dos modos de campo confinados.	36
Figura 4 –	Diagrama esquemático dos termos girantes (esquerda) e contra-girantes	
	(direita). A seta amarela orientada para a direita indica a emissão de	
	um fóton e orientada para a esquerda a absorção de um fóton	44
Figura 5 $-$	Diagrama esquemático das transições ópticas induzidas pelos termos	
	ressonantes e não ressonantes para $\Delta = 0$	47
Figura 6 –	Autoenergias do modelo de Jaynes-Cummings em função da dessintonia	
	Δ para $g = 0.5, \omega_c = 10, n = 0 \mathrm{e} n = 1 \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots $	49
Figura 7 $-$	Diferença de energias correspondentes aos autovalores de Jaynes-Cummings	
	como função da dessintonia, para $n=0$ e $n=1$	49
Figura 8 –	Autovalores dos Hamiltonianos de Jaynes-Cummings e Rabi em função	
	do acoplamento g	50
Figura 9 –	Autovalores no modelo de Jaynes-Cummings para pequenos valores do	
	acoplamento g e para diversos regimes de dessintonia \hdots	51
Figura 10 –	Autovalores como função de Δ	52
Figura 11 –	Autoenergias para o modelo de Jaynes-Cummings em linhas sólidas.	
	Em linhas tracejadas, as energias para o caso desacoplado $\ \ldots \ \ldots \ \ldots$	52
Figura 12 –	Probabilidades de ocupação do estado excitado e fundamental do SDN $\hfill \hfill \hf$	
	para o caso ressonante $\Delta = 0$.	55
Figura 13 –	Probabilidade de ocupação do estado excitado. Caso ressonante $\Delta=0$	
	e sem acoplamento $g = 0. \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	57
Figura 14 –	Caso ressonante com acoplamento e variando o numero de fótons	58
Figura 15 –	Caso fora da ressonância com acoplamento e variando o numero de fótons	59
Figura 16 –	Efeito do aumento da dessintonia sobre a probabilidade de ocupação	
	do estado excitado, com acoplamento e variando o numero de fótons. $\ .$	60
Figura 17 –	Efeito do aumento do acoplamento sobre a probabilidade de ocupação,	
	caso ressonante e variando o numero de fótons.	61
Figura 18 –	Efeitos do aumento da dessintonia, com acoplamento forte e variando o	
	numero de fótons	62

Figura 19 –	a) Probabilidade de ocupação calculada usando a RWA (hamiltoniano	
	de Jaynes-Cummings), b) calculado usando a contribuição dos termos	
	não-ressonantes (hamiltoniano de Rabi).	63
Figura 20 –	Probabilidade de ocupação mostrando o efeito do aumento do numero	
	de fótons.	64
Figura 21 –	Probabilidade de ocupação calculada usando hamiltoniana de Rabi.	
	Caso fora da ressonância e fora do limite de validade da RWA	65
Figura 22 –	Representação esquemática da esfera de Bloch. Os estados quânticos	
	puros de um sistema de dois níveis são representados por pontos sobre	
	a superfície esfera.	65
Figura 23 –	Probabilidade de ocupação para um estado inicial com iguais contribui-	
	ções de $ +\rangle$ e $ -\rangle.$ Caso ressonante variando o numero de fótons $\ .$	66
Figura 24 –	Efeito da dessintonia sobre a probabilidade de ocupação quando o estado $\hfill \hfill \hfill$	
	inicial é uma superposição	68
Figura 25 –	Colapsos e ressurgimentos considerando a aproximação RWA, conside-	
	rando o efeito do aumento do numero médio de fótons	71
Figura 26 –	Inversão de população de um SDN com estado do campo inicial coerente.	
	O regime é fora da ressonância na aproximação RWA	72

Sumário

1	INTRODUÇÃO 12
2	FORMALISMO QUÂNTICO
2.1	Espaços Vetoriais
2.2	Independência Linear e Bases
2.3	Operadores Lineares e Representação Matricial
2.4	Produto Interno
2.5	Autovetores e Autovalores
2.6	Operadores Adjuntos
2.7	Produto Tensorial
2.8	Operadores Unitários
2.9	Operador de Evolução
2.10	Representações
2.10.1	Representação de Schrödinger
2.10.2	Representação de Heisenberg
2.10.3	Representação de Interação
2.11	Matriz Densidade
3	POSTULADOS DA MECÂNICA QUÂNTICA
3.1	Postulado I
3.2	Postulado II
3.3	Postulado III
3.4	Postulado IV
3.5	Postulado V
3.5 4	Postulado V
3.5 4 4.1	Postulado V 26 INTERAÇÃO RADIAÇÃO-MATÉRIA 27 Campo de Radiação 28
3.544.14.2	Postulado V26INTERAÇÃO RADIAÇÃO-MATÉRIA27Campo de Radiação28Modelo Semi-clássico29
 3.5 4 4.1 4.2 4.2.1 	Postulado V 26 INTERAÇÃO RADIAÇÃO-MATÉRIA 27 Campo de Radiação 28 Modelo Semi-clássico 29 Partícula Carregada Imersa em um Campo Eletromagnético 29
 3.5 4 4.1 4.2 4.2.1 4.2.2 	Postulado V26INTERAÇÃO RADIAÇÃO-MATÉRIA27Campo de Radiação28Modelo Semi-clássico29Partícula Carregada Imersa em um Campo Eletromagnético29Hamiltoniano de Dipolo Elétrico Quântico31
 3.5 4 4.1 4.2 4.2.1 4.2.2 5 	Postulado V 26 INTERAÇÃO RADIAÇÃO-MATÉRIA 27 Campo de Radiação 28 Modelo Semi-clássico 29 Partícula Carregada Imersa em um Campo Eletromagnético 29 Hamiltoniano de Dipolo Elétrico Quântico 31 TRATAMENTO INTEIRAMENTE QUÂNTICO PARA A INTERA-
 3.5 4 4.1 4.2 4.2.1 4.2.2 5 	Postulado V26INTERAÇÃO RADIAÇÃO-MATÉRIA27Campo de Radiação28Modelo Semi-clássico29Partícula Carregada Imersa em um Campo Eletromagnético29Hamiltoniano de Dipolo Elétrico Quântico31TRATAMENTO INTEIRAMENTE QUÂNTICO PARA A INTERA-33
 3.5 4 4.1 4.2 4.2.1 4.2.2 5 5.1 	Postulado V 26 INTERAÇÃO RADIAÇÃO-MATÉRIA 27 Campo de Radiação 28 Modelo Semi-clássico 29 Partícula Carregada Imersa em um Campo Eletromagnético 29 Hamiltoniano de Dipolo Elétrico Quântico 31 TRATAMENTO INTEIRAMENTE QUÂNTICO PARA A INTERA- 33 ÇÃO RADIAÇÃO-MATÉRIA 33 Hamiltoniano Atômico, H_A 33
 3.5 4 4.1 4.2 4.2.1 4.2.2 5 5.1 5.2 	Postulado V26INTERAÇÃO RADIAÇÃO-MATÉRIA27Campo de Radiação28Modelo Semi-clássico29Partícula Carregada Imersa em um Campo Eletromagnético29Hamiltoniano de Dipolo Elétrico Quântico31TRATAMENTO INTEIRAMENTE QUÂNTICO PARA A INTERA-33ÇÃO RADIAÇÃO-MATÉRIA33Hamiltoniano Atômico, H_A 33Hamiltoniano do Campo, H_C 35

5.4	Hamiltoniano de Interação Átomo-Campo, H_{int}	41
6	MODELO DE JAYNES-CUMMINGS	44
7	RESULTADOS E DISCUSSÕES	57
8	CONCLUSÕES	73
	REFERÊNCIAS	74
	APÊNDICE A – MATRIZES DE PAULI	77

1 Introdução

O modelo de Jaynes-Cummings na sua versão mais simples é um modelo de óptica quântica que descreve a interação de um átomo de dois níveis com um único modo quantizado de campo eletromagnético confinado em uma cavidade óptica. Inicialmente proposto por Edwin Jaynes e Fred Cummings em 1963 (1, 2), teve sua primeira demonstração experimental em 1984 por Rempe, Walther e Klein (3). Ele é de grande relevância em física atômica, óptica quântica e física de estado sólido, tanto experimental quanto teoricamente. Recentemente o modelo auxilia a desvendar aspectos importantes do controle coerente de excitações e processamento quântico de informação (4, 5, 6).

Este modelo é utilizado para estudar aspectos básicos da interação radiação-matéria no chamado regime de acoplamento fraco. Nessas condições, a interação entre os fótons presentes nos modos da cavidade e o átomo é reversível, sendo mais rápida que os processos irreversíveis devido à perda de fótons. O átomo emite um fóton no modo ressonante que permanece na cavidade até ser reabsorvido pelo átomo antes de ser perdido. Este tratamento é também conhecido como eletrodinâmica quântica de cavidades (QED), embora simplificado, ele é útil para descrever razoavelmente bem sistemas físicos de interesse, onde dois níveis atômicos são ressonantes com o campo da cavidade e os outros estão em grande dessintonia dos mesmos.

É comum, por exemplo, utilizar essa aproximação em átomos de metais alcalinos como Li, Na, Rb e Cs. A característica comum a esses elementos é que eles possuem somente um elétron na última camada atômica ocupada e a distribuição de carga é radial. Os outros elétrons estão tão presos que são praticamente insensíveis aos processos abordados neste trabalho. Na ultima década, o modelo teve um grande ressurgimento devido a aplicações em sistemas de estado sólido e computação quântica. No contexto do estado sólido, o modelo de Jaynes Cummings foi aplicado para descrever a interação entre estados de éxciton em pontos quânticos imersos em microcavidades ópticas (7, 8) e para descrever qubits supercondutores em cavidades micro-ondas (9). A grande versatilidade e possibilidades de aplicações em diversos sistemas faz com que o modelo continue vigente principalmente no estudo de processos de controle coerente de excitações, construção de portas quânticas e estudos de processos fundamentais da interação radiação-matéria.

A teoria envolvida é bastante ampla, já que o átomo e o campo na cavidade são tidos como quantidades quânticas, isso é essencial para o entendimento do modelo de Jaynes-Cummings, que serve de base para a compreensão do fenômeno de colapsos e renascimentos, algo que a teoria clássica não é capaz de explicar, indicando que este tipo de problema se encontra basicamente na fronteira entre o mundo clássico e o mundo quântico. Este trabalho se baseia em fundamentos estudados e explicados pela mecânica quântica a fim de apresentar uma descrição precisa acerca de um átomo sujeito à incidência de radiação eletromagnética. Como premissa, foram discutidos conceitos matemáticos da mecânica quântica que constituem uma parte importante para compreensão dos temas pertinentes ao campo de pesquisa da Óptica Quântica. Assim, é possível enunciar postulados básicos da física quântica. E a partir deles, o comportamento de qualquer sistema físico pode ser estudado.

Para estudar o sistema físico de interesse para este trabalho, considerou-se a matéria sendo composta por um átomo no qual o elétron de valência possui frequência de transição entre dois níveis eletrônicos particulares próxima à frequência de incidência do campo de radiação. A teoria semiclássica e quântica foi abordada meticulosamente, o campo eletromagnético aplicado pode ser comparado sobre estas duas modalidades, apresentando diferenças chamativas entre uma e outra.

O trabalho está didaticamente dividido em outros sete capítulos. No segundo, revisou-se os conceitos matemáticos da álgebra linear que se fazem necessários para a compreensão dos postulados da mecânica quântica, assunto este que confere título ao capítulo 3 que tratou dos princípios que regulam a estrutura da física de partículas de baixíssima escala espacial. No capítulo 4, estudou-se intimamente o tema interação radiação-matéria, obtendo o hamiltoniano a nível semiclássico que descreve a interação considerando apenas os níveis atômicos quantizados. Após uma análise inteiramente quântica, foi apresentado o hamiltoniano quântico no capítulo 5. No capítulo 6 foi deduzido o modelo de Jaynes-Cummings, apresentando gráficos que comprovam a eficiência desta teoria. No sétimo capítulo, foram apresentadas discussões exemplificadas com gráficos que atestam a competência do Modelo de Jaynes-Cummings, com os resultados obtidos ao variar parâmetros. Por fim, no capítulo 8 são apresentadas as conclusões do trabalho.

2 Formalismo Quântico

O estado dinâmico de um sistema quântico é descrito por um vetor de estado $|\psi\rangle$. Os possíveis vetores de estado são elementos de um espaço linear vetorial complexo, normalmente chamado de espaço de estados ou espaço de Hilbert.

2.1 Espaços Vetoriais

Um espaço vetorial consiste em um conjunto de vetores, $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \cdots\}$, juntamente com um conjunto de escalares $\{a, b, c, \cdots\} \in \mathbb{C}$ que estão sujeitos à duas operações: adição vetorial e multiplicação escalar.

Na adição de vetores, a *soma* de quaisquer dois vetores é outro vetor: $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle$. Seguindo propriedades, ela é comutativa: $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle$; associativa: $|\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = (|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle$. Existe um vetor nulo ou vetor zero, $|0\rangle$, com a propriedade $|\alpha\rangle + |0\rangle = |\alpha\rangle$ para todo vetor $|\alpha\rangle$ e para todo vetor $|\alpha\rangle$ existe um vetor inverso associado, $|-\alpha\rangle$, tal que $|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle = 0$

Na multiplicação de escalares, o *produto* de qualquer escalar com um vetor é um outro vetor: $a |\alpha\rangle = |\gamma\rangle$. Essa operação é distributiva em relação à adição vetorial $a(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = a |\alpha\rangle + a |\beta\rangle$ e em relação à adição escalar: $(a + b) |\alpha\rangle = a |\alpha\rangle + b |\alpha\rangle$. É também associativa em relação à multiplicação ordinária de escalares: $a(b |\alpha\rangle) = (ab) |\alpha\rangle$. A Multiplicação pelos escalares 0 e 1 tem os efeitos: $0 |\alpha\rangle = |0\rangle$; $1 |\alpha\rangle = |\alpha\rangle$, e evidentemente, $|-\alpha\rangle = (-1) |\alpha\rangle$.

2.2 Independência Linear e Bases

Uma combinação linear de um conjunto de vetores $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle \cdots \}$ é uma expressão da forma $a |\alpha\rangle + b |\beta\rangle + c |\gamma\rangle + \ldots$, onde $a, b, c \cdots$ são escalares. Um vetor do conjunto é linearmente independente se não puder ser escrito como uma combinação linear dos outros elementos do conjunto. Por extensão, um conjunto de vetores é linearmente independente se cada um é linearmente independente de todo o resto.

Uma coleção de vetores B gera o espaço vetorial se qualquer vetor do espaço pode ser escrito como uma combinação linear dos membros de B. Consideremos por exemplo, dois vetores não colineares, $|v_1\rangle \in |v_2\rangle$. Um outro vetor, $|v\rangle$, do espaço vetorial pode ser decomposto segundo as direções de $|v_1\rangle \in |v_2\rangle$ (10). Nesse caso é necessário encontrar dois escalares $\alpha_1 \in \alpha_2$, tais que

$$|v\rangle = \alpha_1 |v_1\rangle + \alpha_2 |v_2\rangle, \qquad (2.1)$$

nessa representação, o vetor $|v\rangle$ é uma combinação linear de $|v_1\rangle$ e $|v_2\rangle$.

Um conjunto de vetores linearmente independentes que gera o espaço é chamado de base. No exemplo citado, os vetores $|v_1\rangle \in |v_2\rangle$ são chamados de base. É possível decompor o vetor $|v\rangle$ de forma genérica como

$$|v\rangle = \sum_{i} \alpha_{i} |v_{i}\rangle \tag{2.2}$$

Os vetores não nulos $|v_1\rangle, \cdot, |v_n\rangle$ são linearmente independentes se e somente se existir um conjunto de número complexos $(\alpha_1, ..., \alpha_n)$ com $\alpha_i = 0$ e i = 1, ..., n tal que

$$\alpha_1 |v_1\rangle + \alpha_2 |v_2\rangle + \dots + \alpha_n |v_n\rangle = 0 \tag{2.3}$$

O número de vetores em qualquer base é chamado de dimensão do espaço. Neste trabalho, a dimensão n é finita.

2.3 Operadores Lineares e Representação Matricial

Considerando dois espaços vetoriais $V \in W$, um operador é entendido como uma função \hat{O} que a cada vetor de entrada $|x\rangle$ pertencente ao espaço vetorial V produz um novo vetor de saída $\hat{O} |x\rangle$ pertencente a W.

$$\hat{O}: V \to W$$
$$\hat{O} \to |x\rangle$$

Para essa função ser chamada de operador linear é necessário que V coincida com W e obedeça a seguinte propriedade: $\hat{O}(\alpha |x\rangle + \beta |y\rangle) = \alpha \hat{O} |x\rangle + \beta \hat{O} |y\rangle$, com $\alpha \in \beta \in \mathbb{C}$, e $|x\rangle e |y\rangle \in V$

Uma propriedade útil dos operadores lineares é poder representá-los através de uma matriz de dimensão igual à dimensão do espaço vetorial. Considerando novamente o operador linear \hat{O} que atua no espaço vetorial V, sendo uma base desse espaço $|e\rangle_i$, e como $\hat{O} |e\rangle_i$ é um vetor de V, pode-se escrevê-lo na base $|e\rangle_i$ como

$$\widehat{O} \left| e \right\rangle_{i} = \sum_{j} O_{ij} \left| e \right\rangle_{j} \tag{2.4}$$

onde os coeficientes da expansão definem uma matriz O_{ij} .

Dada uma base de V, pode-se representar todos os vetores de V por matrizes colunas enquanto os operadores lineares são dados por matrizes O_{ij} . Quando a dimensão de V é finita, o espaço vetorial é equivalente a \mathbb{C}^n .

2.4 Produto Interno

O produto interno de dois vetores $|\alpha\rangle \in |\beta\rangle$ é um número complexo escrito como $\langle \alpha | \beta \rangle$, em que $\langle \alpha |$ é o vetor dual de $|\alpha\rangle^1$, sendo o dual um operador linear que leva elementos do espaço V para números complexos \mathbb{C} (11). O produto interno tem as seguintes propriedades

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle^*, \qquad (2.5)$$

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \ge 0 \quad e \quad \langle \alpha | \alpha \rangle = 0 = | 0 \rangle,$$

$$(2.6)$$

$$\langle \alpha | (b |\beta\rangle + c |\gamma\rangle) = b \langle \alpha |\beta\rangle + c \langle \alpha |\gamma\rangle.$$
(2.7)

Um espaço vetorial com um produto interno é chamado de espaço interno do produto, o espaço de Hilbert é um exemplo. Como o produto interno de qualquer vetor consigo mesmo é um número não-negativo, sua raiz quadrada é real e chamada de norma do vetor. Um vetor *unitário*, cuja norma é 1, é considerado normalizado,

$$||\alpha|| \equiv \sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle} = 1 \tag{2.8}$$

Dois vetores cujo produto interno é zero são chamados ortogonais. A normalização de um vetor é feita dividindo o vetor por sua norma $\frac{|v\rangle}{||v\rangle||}$.Uma coleção de vetores normalizados mutuamente ortogonais é chamado de conjunto ortonormal:

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij} \tag{2.9}$$

É sempre mais conveniente escolher uma base ortonormal, e nesse caso, o produto interno de dois vetores pode ser escrito em termos de seus componentes:

$$\langle \alpha | \beta \rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots + a_n^* b_n$$
 (2.10)

A norma se torna:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = |a_1|^2 + |a_2|^2 + \dots + |a_n|^2,$$
 (2.11)

e as componentes são

$$a_i = \langle e_i | \alpha \rangle \tag{2.12}$$

¹ Para cada elemento $|\psi\rangle \in V$, existe um elemento $\langle \psi | \in V^*$, onde V^* denota o espaço dual de V, que recebe o nome de bra. Os bras não são estados propriamente ditos: eles, na verdade, atuam sobre vetores de estado $|\psi\rangle$ da mesma forma que um funcional linear

Neste trabalho serão utilizadas apenas bases ortonormais. Para estabelecer uma conexão entre produto interno e sua representação matricial pode-se usar uma base ortonormal $|i\rangle$ com vetores $|v\rangle = \sum_{i} v_i |i\rangle$ e $|w\rangle = \sum_{j} w_j |j\rangle$, então:

$$\langle v|w\rangle = \sum_{i,j} v_i^* w_j \langle i|j\rangle \sum_{i,j} v_i^* w_j \delta_{ij} = \sum_i v_i^* w_i = [v_1^* \dots v_n^*] \begin{vmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_n \end{vmatrix}$$
(2.13)

2.5 Autovetores e Autovalores

A partir de um operador linear \hat{O} em um espaço vetorial tal que $O |v\rangle = v |v\rangle$, v é tido como um número complexo conhecido como autovalor de O, correspondente ao seu autovetor $|v\rangle$. Sua função característica é dada por $c(\lambda) = \det |O - \lambda \mathbb{1}|$, onde $\mathbb{1}$ é matriz identidade. As soluções da equação $c(\lambda) = 0$ são os autovalores do operador \hat{O} .

Para construir os autovetores correspondentes é geralmente mais simples substituir cada λ encontrado na seguinte equação:

$$\widehat{O}a = \lambda a \tag{2.14}$$

onde a é um vetor. As soluções para os componentes de a para cada λ serão os respectivos autovetores.

2.6 Operadores Adjuntos

O adjunto de um operador \hat{O} é, por vezes, chamado de conjugado Hermitiano de \hat{O} . Sendo \hat{O} um operador linear sobre um espaço de Hilbert ($O : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$) isso significa que existe um único operador linear \hat{O}^{\dagger} sobre \mathcal{H} , tal que todo vetor $|v\rangle \in |w\rangle$, por exemplo, $\in a \mathcal{H}$,

$$(|v\rangle, \hat{O} |w\rangle) \equiv (\hat{o}^{\dagger} |v\rangle, |w\rangle), \qquad (2.15)$$

onde \hat{O}^{\dagger} é conhecido como o adjunto ou Hermitiano conjugado de \hat{O} . Por definição: $(\hat{O}\hat{A})^{\dagger} = \hat{O}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$, onde \hat{A} é um outro operador.

Por convenção, sendo $|v\rangle$ um vetor, então $|v\rangle^{\dagger} \equiv \langle v|$. Com isso, $(\hat{O} |v\rangle)^{\dagger} = \langle v | \hat{O}^{\dagger}$. A matriz desse tipo de operador é representada através da transposição conjugada dos elementos dessa matriz,

$$\hat{O}^{\dagger} = (\hat{O}^*)^T \tag{2.16}$$

onde * indica conjugação complexa e T indica a operação de transposição. O operador \hat{O} é considerado normal se $\hat{O}\hat{O}^{\dagger} = \hat{O}^{\dagger}\hat{O}$; desta forma, um operador hermitiano é também um operador normal.

2.7 Produto Tensorial

Sejam V e W espaços de Hilbert de dimensões M e N, respectivamente, podendo ser finitos ou infinitos. Se V está associado com o vetor $|v\rangle$ e W está associado com $|w\rangle$, então $V \otimes W$ são combinações lineares do produto de $|v\rangle$ e $|w\rangle$ entre os elementos de $|v\rangle$ em V e $|w\rangle$ em W (12). E deve satisfazer algumas propriedades básicas, sendo a um escalar arbitrário:

$$a(|v\rangle \otimes |w\rangle) = (a |v\rangle) \otimes |w\rangle = |v\rangle \otimes (a |w)\rangle$$
(2.17)

$$(|v_1\rangle + |v_2\rangle) \otimes |w\rangle = |v_1\rangle \otimes |w\rangle + |v_2\rangle \otimes |w\rangle$$
(2.18)

$$|v\rangle \otimes (|w_1\rangle + |w_2\rangle) = |v\rangle \otimes |w_1\rangle + |v\rangle \otimes |w_2\rangle$$
(2.19)

A representação matricial do produto tensorial de $v \otimes w$ é dada por

 $\begin{bmatrix} v_1w_1 & v_1w_2 & \dots & v_1w_n \\ v_2w_1 & v_2w_2 & \dots & v_2w_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_mw_1 & v_mw_2 & \dots & v_mw_n \end{bmatrix}$

2.8 Operadores Unitários

Por definição, um operador \hat{U} é unitário se seu inverso \hat{U}^{-1} é igual ao seu adjunto \hat{U}^{\dagger} :

$$\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{\dagger} \tag{2.20}$$

Considerando dois vetores arbitrários $|v_1\rangle \in |v_2\rangle \in$ ao espaço vetorial V, e suas transformadas $|\tilde{v_1}\rangle \in |\tilde{v_2}\rangle$ sob a ação de \hat{U} :

$$\begin{aligned} |\tilde{v}_1\rangle &= \hat{U} |v_1\rangle \\ |\tilde{v}_2\rangle &= \hat{U} |v_2\rangle \end{aligned}$$
(2.21)

Ao calcular o produto escalar de $\langle \tilde{v}_1 | \tilde{v}_2 \rangle$, é obtido:

$$\langle \tilde{v}_1 | \tilde{v}_2 \rangle = \langle v_1 | \hat{U}^{\dagger} \hat{U} | v_2 \rangle = \langle v_1 | v_2 \rangle$$
(2.22)

A transformação unitária associada ao operador \hat{U} conserva o produto escalar em V. Quando V tem dimensão finita, essa propriedade é característica de um operador unitário.

2.9 Operador de Evolução

A transformação de $|\psi(t_0)\rangle$, o vetor de estado no instante inicial t_0 , em $|\psi(t)\rangle$, o vetor de estado em um instante arbitrário, é linear. Existe um operador linear $U(t, t_0)$ tal que:

$$|\psi(t)\rangle = U(t,t_0) |\psi(t_0)\rangle \tag{2.23}$$

E sendo $U(t, t_0)$ um operador unitário

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = H(t) U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$
(2.24)

Portanto,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = H(t)U(t,t_0)$$
(2.25)

Agora considerando o parâmetro t_0 , que aparece em $U(t, t_0)$ como uma variável t':

$$|\psi(t)\rangle = U(t,t') |\psi(t')\rangle \tag{2.26}$$

Da mesma forma,

$$|\psi'(t)\rangle = U(t',t'') |\psi(t'')\rangle$$
(2.27)

2.10 Representações

2.10.1 Representação de Schrödinger

A Representação de Schrödinger é uma formulação da mecânica quântica em que o estado de um sistema evolui com o tempo, e a evolução para um sistema quântico fechado é provocada por operador unitário chamado de operador da evolução temporal (13). O operador de evolução temporal $U(t, t_0)$ é definido como:

$$|\psi(t)\rangle = U(t,t_0) |\psi(t_0)\rangle \tag{2.28}$$

Na forma diferencial,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right\rangle = \hat{H}\left|\psi\right\rangle \tag{2.29}$$

Usualmente para operadores,

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0 \tag{2.30}$$

E os valores esperados de observáveis são:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \, \hat{A} \, | \psi(t) \rangle \tag{2.31}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{A}\rangle = i\hbar\left[\langle\psi|\hat{A}|\frac{\partial\psi}{\partial t}\rangle + \langle\frac{\partial\psi}{\partial t}|\hat{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi\rangle\right] = \langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle$$
(2.32)

Ou ainda,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \hat{A}\right\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}Tr(\hat{A}\rho) = Tr([\hat{A}\hat{H}]\rho)$$
(2.33)

onde \hat{H} é o Hamiltoniano, $[\centerdot, \centerdot]$ é o comutador de \hat{A} e \hat{H} e Tr é o traço de uma matriz quadrada.

Se \hat{A} é independente do tempo, como deve ser na representação de Schrödinger e comuta com \hat{H} , é referido como uma constante de movimento.

2.10.2 Representação de Heisenberg

Na Representação de Heisenberg, os operadores são dependentes do tempo e o estados quânticos são independentes do tempo, $|\psi\rangle$ não se modifica com o tempo, e um observador \hat{A} satisfaz a equação:

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}(t)] + \left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right)$$
(2.34)

onde aqui também \hat{H} é o Hamiltoniano e [.,.] é o comutador de $\hat{A} \in \hat{H}$.

Isto demonstra o contraste com a Representação de Schrödinger, na qual os operadores são constantes e o estado quântico se desenvolve no tempo. Estas duas representações apenas se diferem pela mudança na dependência do tempo. Formalmente, a Representação de Heisenberg é a formulação da mecânica matricial numa base arbitrária, onde o Hamiltoniano não é necessariamente diagonal.

2.10.3 Representação de Interação

Considerando que na Representação de Schrödinger e na Representação de Heisenberg, o vetor do estado quântico ou o operador possuem dependência com o tempo. A Representação de Interação, também chamada de Representação de Dirac, é uma intermediação entre essas duas representações.

O vetor do estado quântico, $|\psi_S(t)\rangle$, e um operador na Representação de Interação, (A_I) , são definidos, respectivamente, como

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{iH_{0,S}t/\hbar} |\psi_S(t)\rangle$$

$$A_I(t) = e^{iH_{0,S}t/\hbar} A_S(t) e^{-iH_{0,S}t/\hbar}.$$
(2.35)

onde $|\psi_S(t)\rangle$ é o mesmo vetor da Representação de Schrodinger e H_0 é a parte do Hamiltoniano independente do tempo.

A equação de Schrödinger na representação de interação será

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = H_{1,I}(t) |\psi_I(t)\rangle$$
(2.36)

onde

$$H_{1,I}(t) = e^{iH_{0,S}t/\hbar} H_{1,S}(t) e^{-iH_{0,S}t/\hbar}$$
(2.37)

aqui a perturbação hamiltoniana da Representação de interação se torna um hamiltoniano dependente do tempo, a não ser que $[H_{1,s}, H_{0,s}] = 0$.

2.11 Matriz Densidade

A matriz densidade² ou operador densidade é uma representação alternativa do estado de um sistema quântico para o qual se utiliza a função de onda. Embora descrever um sistema quântico dessa forma seja equivalente a usar a função de onda, ganha-se vantagens práticas para certos problemas dependentes do tempo.

A matriz de densidade é formalmente definida como o produto externo da função de onda e seu conjugado,

$$\rho(t) \equiv |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \tag{2.38}$$

Isto implica que ao especificar um estado $|\psi\rangle$, a integral $\langle \psi | \rho | \psi \rangle$ mostra a probabilidade de encontrar a partícula no estado $|\psi\rangle$. O nome Matriz Densidade deriva da observação de que ela desempenha o papel quântico de uma densidade de probabilidade. Na descrição estatística de um observável clássico obtido a partir de momentos de uma distribuição de probabilidade P, ρ desempenha o papel de P no caso quântico:

$$\langle O \rangle = \int OP(O)dO \tag{2.39}$$

$$\langle O \rangle = \langle \psi | O | \psi \rangle = Tr[O\rho]$$
(2.40)

onde Tr [...] refere-se ao traço sobre os elementos diagonais da matriz.

A última expressão, para um sistema descrito por uma função de onda, é obtida da seguinte maneira,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} c_n(t) |n\rangle$$
(2.41)

² Esta seção não é obrigatória na leitura, já que não foi usada para deduzir nenhuma equação do trabalho. No entanto, o calculo numérico da dinâmica do sistema e os valores esperados dependentes do tempo foram obtidos no formalismo da matriz densidade.

o valor esperado de um operador será:

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_{n,m} c_n(t) c_m^*(t) \langle m | \hat{O} | n \rangle$$
(2.42)

Também é possível obter elementos da matriz densidade da forma,

$$\rho(t) = \sum_{n,m} c_n(t) c_m^*(t) |n\rangle \langle m| \equiv \sum_{n,m} \rho_{nm}(t) |n\rangle \langle m|$$
(2.43)

Os elementos da matriz densidade, ρ_{nm} , são compostos pelos coeficientes de evolução temporal:

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_{n,m} O_{mn} \rho_{nm}(t) = Tr[\hat{O}\rho(t)]$$
(2.44)

A matriz de densidade é uma ferramenta prática quando se lida com estados mistos. Estados puros são aqueles caracterizados por uma única função de onda. Estados mistos referem-se a combinações estatísticas em que se tem informações imperfeitas sobre o sistema, para o qual se deve realizar médias estatísticas para descrever os observáveis quânticos. Um estado misto refere-se a qualquer caso em que subdivida um sistema microscópico ou macroscópico em um conjunto que inicialmente não há relação de fase entre os elementos da combinação. Exemplos incluem um conjunto em equilíbrio térmico e estados independentemente preparados.

Dada uma combinação estatística, e pode-se descrever a probabilidade p_k de ocupar o estado quântico $|\psi_k\rangle$, com $\sum_k p_k = 1$; assim, a avaliação dos valores esperados é simplificada com uma matriz densidade:

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \sum_{k} p_k \langle \psi_k(t) | \hat{O} | \psi_k(t) \rangle$$
(2.45)

$$\rho(t) \equiv \sum_{k} p_k \left| \psi_k(t) \right\rangle \left\langle \psi_k(t) \right| \tag{2.46}$$

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = Tr[\hat{O}\rho(t)]. \tag{2.47}$$

O tratamento do valor esperado é o mesmo para estados puros ou mistos, estes diferem apenas na maneira como os elementos de ρ são obtidos.

As propriedades da matriz densidade são:

- 1. ρ é hermitiana: $\rho_{nm}^* = \rho_{nm}$
- 2. Normalização: $Tr(\rho) = 1$
- 3. $Tr(\rho^2)=1$ para estados puros; e $Tr(\rho^2)<1$ para estados mistos

A última expressão reflete o fato de que os elementos da matriz diagonal podem ser 0 ou 1 para estados puros, mas fica entre 0 e 1 para estados mistos. Além disso, ao trabalhar com a matriz densidade, é conveniente tomar nota de algumas propriedades do traço:

- 1. Invariância Cíclica: $Tr(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = Tr(\hat{C}\hat{A}\hat{B}) = Tr(\hat{B}\hat{C}\hat{A})$
- 2. Invariância à transformação unitária: $Tr(S^{\dagger}\hat{A}S) = Tr(\hat{A})$

Descrevendo agora a evolução da matriz densidade, a equação de movimento desta decorre naturalmente da definição de ρ e da equação de Schrödinger dependente do tempo. Usando $\frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \frac{-i}{\hbar} H |\psi\rangle$ e $\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi | = \frac{i}{\hbar} H \langle \psi |$, obtemos

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} [|\psi\rangle \langle\psi|] = -i\frac{1}{\hbar} [H,\rho]$$
(2.48)

Esta equação é conhecida como equação de Liouville-Von Neumann. É isomórfica à equação de movimento de Heisenberg para variáveis internas, já que ρ também é um operador. A solução é

$$\rho(t) = U\rho(0)U^{\dagger} \tag{2.49}$$

a qual contem toda a informação sobre o sistema. Observando que esta equação e a invariância cíclica do traço implicam que a dependência temporal do valor esperado de um operador pode ser calculada pela propagação do mesmo (representação de Heisenberg) ou pela matriz densidade (representação de Schrôdinger ou representação de interação):

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = Tr[\hat{O}\rho(t)] = Tr[\hat{O}U\rho_0 U^{\dagger}] = Tr[\hat{O}(t)\rho_0]$$
(2.50)

Para um hamiltoniano independente do tempo, os elementos da matriz densidade evoluem como:

$$\rho_{nm}(t) = \langle n | \rho(t) | m \rangle = \langle n | | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | | m \rangle = \langle n | U | \psi_0 \rangle \langle \psi_0 | U^{\dagger} | m \rangle$$
(2.51)

$$\rho_{nm}(t) = e^{-i\omega_{nm}(t-t_0)}\rho_{nm}(t_0)$$
(2.52)

A partir disso, pode-se perceber que as populações, $\rho_{nn}(t) = \rho_{nm}(t_0)$, são invariantes no tempo, e as coerências oscilam na divisão de energia ω_{nm} (14), conceito este que será apresentado e utilizado no decorrer deste trabalho.

3 Postulados da Mecânica Quântica

A Mecânica Quântica é uma teoria axiomática porque está bem fundamentada em poucos princípios, axiomas ou postulados. Não há consenso sobre quantos axiomas são necessários para descrever o mecanismo da Mecânica Quântica (15), serão usados, neste trabalho, 5 postulados para descrevê-la.

Os quatro primeiros postulados formam o plano de fundo matemático da Mecânica Quântica, e o quinto fornece a conexão entre a matemática introduzida pelos quatro primeiros e os resultados de um processo de medição. Como regra geral, a declaração de cada postulado será seguida de comentários, para que a significância das palavras contidas nos postulados seja explicada quando são introduzidas.

3.1 Postulado I

A todo sistema físico isolado existe um espaço vetorial complexo com produto interno, conhecido como espaço de estado do sistema. O sistema é totalmente descrito pelo seu vetor de estado, um vetor unitário no espaço de estados.

Há uma diferença entre um estado do ponto de vista clássico e do ponto de vista quântico. Na mecânica clássica conhece-se o estado de um sistema quando são conhecidas todas as posições e todas as velocidades dos pontos do sistema, em um determinado instante; sendo possível predizer todo o futuro, e reconstruir todo o passado do sistema. Na mecânica quântica tal descrição é impossível, uma vez que as coordenadas e as velocidades não podem ser medidas simultaneamente. Assim, a descrição de um estado na mecânica quântica é feita em termos de menos quantidades do que na mecânica clássica. Enquanto a descrição clássica permite prever o movimento futuro com total precisão, a descrição menos detalhada da mecânica quântica não permite essa precisão. Isto significa que, mesmo que se conheça o estado de um elétron, seu comportamento em instantes sucessivos é, em princípio, incerto.

Em um sistema físico, quando $|\psi\rangle$ depende apenas das coordenadas espaciais usuais, $|\psi(x, y, z)\rangle$, se fala em estado de um sistema físico. Quando há evolução, a dependência temporal deve ser levada em consideração: a função $|\psi\rangle$ é chamada de função de onda, dependendo das coordenadas espaciais e do tempo, tendo o seguinte formato $|\psi(x, y, z, t)\rangle$. Geralmente, a função de onda é uma função complexa, isso significa que deve-se trabalhar também com seu complexo conjugado.

Usando o conceito de espaço vetorial, este postulado implica que a superposição de dois estados é novamente um estado do sistema. Se $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ são estados possíveis do

sistema, então:

$$|\psi\rangle = a_1 |\psi_1\rangle + a_2 |\psi_2\rangle \tag{3.1}$$

onde $a_1 e a_2$ são números complexos. Supondo que $|\psi_1\rangle$ representa o estado de uma partícula com um valor para alguma propriedade, como localização, e $|\psi_2\rangle$ também representa o estado de uma partícula com um valor diferente, deve-se considerar, na mecânica quântica, que esses valores superpõem uma partícula em diferentes locais. Essa possibilidade de superposições é a diferença entre um q-bit e um bit clássico.

Também segundo o primeiro postulado é necessário verificar que $|\psi\rangle$ é um vetor unitário:

$$|||\psi\rangle|| = (a_1^* \langle \psi_1| + a_2^* \langle \psi_2|)(a_1 |\psi_1\rangle + a_2 |\psi_2\rangle) = |a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$$
(3.2)

3.2 Postulado II

Todo observável atribuído a um sistema físico é descrito por um operador que atua nos kets que descrevem o sistema. Para todo observável de um sistema físico está associado um operador auto-adjunto (ou hermitiano) permitindo um conjunto completo de autofunções.

Por convenção, um operador Ô atuando em um ket $|\psi\rangle$ é denotado como:

$$\hat{O}: |\psi\rangle \to |\psi'\rangle = \hat{O} |\psi\rangle \tag{3.3}$$

Para cada operador, há estados especiais que não são alterados, pela ação de um operador, exceto por serem multiplicados por uma constante,

$$\hat{O} \left| \psi_a \right\rangle = a_i \left| \psi_a \right\rangle \tag{3.4}$$

onde $|\psi_a\rangle$ são os autoestados e a_i são os autovalores do operador.

3.3 Postulado III

O único resultado possível da medição de um observável \hat{A} é um dos autovalores do operador correspondente a \hat{A} .

Como se mede apenas números reais, os autovalores dos operadores correspondentes aos observáveis deveriam ser reais. Operadores com autovalores reais são herméticos. Os autoestados de um operador hermitiano possuem algumas propriedades importantes, eles são ortogonais:

$$\langle a_j | a_k \rangle \equiv \delta_{jk},\tag{3.5}$$

e abrangem o espaço dos estados, formando uma base. Isto significa que um estado arbitrário pode ser expandido como uma soma, com coeficientes complexos, dos autoestados de um operador hermético. Por essa razão, se diz que o conjunto de estados é completo.

3.4 Postulado IV

Quando a medida de um observável \hat{A} é feita em um estado genérico $|\psi\rangle$, a probabilidade de obter o autovalor a_n é dada pelo quadrado do produto interno de $|\psi\rangle$ com o autoestado: $|\langle a_n | \psi \rangle|^2$.

O número complexo $\langle a_n | \psi \rangle$ é conhecido como probabilidade de amplitude ou amplitude, ou seja, probabilidade para medir a_n como valor de \hat{A} no estado $|\psi\rangle$. Cada estado pode ser expandido como uma superposição de \hat{A} -autoestados:

$$|\psi\rangle = \sum_{n} c_n |a_n\rangle \tag{3.6}$$

como $|\psi\rangle$ deve ser unitário,

$$\sum_{n} |c_n|^2 = 1 \tag{3.7}$$

De acordo com as regras usuais de probabilidade, é possível calcular o valor esperado do observável \hat{A} . Se a probabilidade de observar a_n é $|c_n|^2$, então o valor esperado, denotado por $\langle \hat{A} \rangle$, é:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{n} a_n |c_n|^2. \tag{3.8}$$

3.5 Postulado V

A evolução temporal de um sistema quântico preserva a normalização do ket associado. A evolução temporal do estado de um sistema quântico é descrita como $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$, com U sendo o operador unitário.

Sob a evolução temporal, um estado $|\psi\rangle$ se move pelo espaço de estados em uma trajetória definida por $|\psi(t)\rangle$. A preservação da norma do estado é associada com a conservação de probabilidade. Se o observável \hat{A} é energia, por exemplo, a probabilidade de encontrar o sistema com algum valor para a energia é unitária quando somada com todos os outros possíveis valores. Para que isso seja verdadeiro no tempo, é necessário que a norma do estado permaneça unitária.

Esse postulado requer que $|\psi\rangle$ obe
deça uma equação diferencial da forma

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{A} |\psi(t)\rangle$$
(3.9)

onde \hat{H} é um operador hermitiano conhecido como Hamiltoniano (16). Essa é a equação de Schrödinger escrita como uma equação de operador no espaço de estados.

4 Interação Radiação-Matéria

Um dos tópicos mais importantes da mecânica quântica é a descrição da espectroscopia no que se refere ao estudo da matéria através de sua interação com a radiação eletromagnética. Classicamente, as interações luz-matéria são o resultado de uma oscilação do campo eletromagnético interagindo ressonantemente com partículas carregadas.

A interação entre a radiação e a matéria é entendida a partir da força que o campo elétrico exerce sobre as cargas elétricas do átomo. Sabendo que o campo varia com uma certa frequência ω , a ação deste campo sobre a matéria, nesse caso, a estrutura atômica, tende a criar nas cargas um movimento harmônico com a mesma frequência.

No entanto, este movimento é considerado somente se a frequência do modo natural de vibração das cargas for aproximadamente igual à frequência do campo. Admitindo que a frequência do campo externo é ressonante ou aproximadamente ressonante com a frequência de transição de dois níveis atômicos bem definidos, a ocorrência de transições para outros níveis é praticamente improvável através do mesmo campo de radiação aplicado. Este tipo de estrutura é conhecido como átomo de dois níveis e está ilustrado na figura 4.1:



Figura 1 – Sistema de dois níveis com energia de transição $\hbar\omega_a$, um modo de campo eletromagnético com frequência aproximadamente ressonante $\omega_c \sim \omega_a$ ($\Delta \sim 0$)induz transições entre os dois níveis.

Neste estudo, ponto de partida para a interação radiação-matéria é obter um Hamiltoniano na sua forma mais geral:

$$H = H_M + H_C + H_I \tag{4.1}$$

O Hamiltoniano para a matéria H_M é geralmente independente do tempo, embora não seja necessariamente sempre assim; o termo H_C inclui o campo eletromagnético no Hamiltoniano, e H_I mostra a interação desse campo magnético com a matéria.

Começando por um tratamento semiclássico, a matéria será tratada quanticamente e o campo terá um tratamento clássico. Para o campo, será assumido que a luz apresenta apenas um potencial de interação dependente do tempo que age sobre a matéria, mas a matéria não influencia a luz. Essa suposição pode ser feita porque o interesse aqui é no efeito que a luz tem sobre a matéria.

Desta forma, pode-se ignorar H_C , obtendo um Hamiltoniano que pode ser resolvido na representação:

$$H \approx H_M + H_I(t) = H_0 + V(t) \tag{4.2}$$

onde H_0 é não depende explicitamente do tempo
eV(t) é uma perturbação dependente do tempo.

Começando com a força experimentada por uma partícula carregada em um campo eletromagnético, desenvolvendo um hamiltoniano clássico para este sistema, e então substituindo operadores quânticos para a matéria, será possível derivar o Hamiltoniano para a interação luz-matéria.

4.1 Campo de Radiação

Fazendo uma breve descrição dos campos eletromagnéticos (17) usados para estudo neste trabalho, as equações de Maxwell no vácuo tem a forma:

$$\vec{\nabla}.\vec{E} = 0 \tag{4.3}$$

$$\vec{\nabla}.\vec{B} = 0 \tag{4.4}$$

$$\vec{\nabla} X \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{4.5}$$

$$\vec{\nabla} X \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \tag{4.6}$$

A melhor maneira de construir o hamiltoniano é descrevendo o potencial de interação dependente do tempo. Na eletrostática, usualmente, o campo está relacionado ao potencial eletrostático através de $\vec{E} = -\nabla \varphi$, mas para um campo que varia no tempo e no espaço, o potencial eletrodinâmico deve ser expresso em termos de $\vec{A} = \varphi$, tal que,

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \tag{4.7}$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} X \vec{A} \tag{4.8}$$

Pode-se escolher uma restrição ou calibração que permite descrever a onda. A escolha do calibre de Coulomb ($\varphi = 0$) mantêm invariantes as grandezas físicas, e leva a

uma descrição de ondas planas de \vec{E} e \vec{B} :

$$\vec{\nabla}^2 \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t^2}$$
(4.9)

$$\vec{\nabla}.\vec{A} = 0 \tag{4.10}$$

Esta equação de onda permite que o potencial vetor seja escrito como um conjunto de ondas planas:

$$\vec{A}(\vec{r},t) = A_0 \hat{\epsilon} e^{i(\vec{k}.\vec{r}-\omega t)} - A_0^* \hat{\epsilon} e^{-i(\vec{k}.\vec{r}-\omega t)}$$
(4.11)

Isto descreve uma onda que oscila em um tempo t com uma frequência angular ω e se propaga no espaço ao longo da direção k, com um período espacial $\lambda = 2\pi k$. A onda tem uma amplitude A_0 que é dirigida ao longo do vetor unitário de polarização $\hat{\epsilon}$. Como $\vec{\nabla}.\vec{A} = 0$, tem-se que $\vec{k}.\hat{\epsilon} = 0$ ou \vec{k} é ortogonal a $\hat{\epsilon}$.

4.2 Modelo Semi-clássico

A interação semi-clássica descreve uma partícula cujos níveis de energia são quantizados e um campo que, no caso deste estudo, por conveniência, é assumido como sendo monocromático incidindo sobre um átomo de dois níveis com uma dada polarização,

$$\vec{E}(\vec{r},t) = E_0 \cos(\vec{k_0}.\vec{r} - \omega t - \varphi_0)\hat{\epsilon}$$
(4.12)

4.2.1 Partícula Carregada Imersa em um Campo Eletromagnético

Para encontrar o hamiltoniano clássico que descreve uma partícula carregada em um campo em termos do potencial vetorial, pode-se começar a partir da Força de Lorentz em uma partícula com massa m e carga com valor absoluto |e|:

$$\vec{F} = e(\vec{E} + \dot{\vec{r}} \times \vec{B}) \tag{4.13}$$

Substituindo os campos elétrico e magnético, respectivamente, pelas equações [4.7] e [4.8], tem-se:

$$\vec{F} = e(-\vec{\nabla}\varphi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} + \dot{\vec{r}} \times \vec{\nabla} \times \vec{A})$$
(4.14)

Agora fazendo uso das seguintes identidades vetoriais para simplificar a equação acima: \vec{r}

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{dA}{dt} - (\dot{\vec{r}}.\vec{\nabla})\vec{A}$$
(4.15)

$$\dot{\vec{r}} \times \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{\nabla} (\dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}) - (\dot{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla}) \vec{A}$$
(4.16)

Desta forma, a equação [4.14] se torna,

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}(e\varphi - e\dot{\vec{r}}.\vec{A}) - \frac{d\vec{A}}{dt}$$
(4.17)

Esta equação se assimila com a relação existente no contexto da Mecânica Clássica onde a força de um sistema é relacionada com a sua energia potencial matematicamente como $\vec{F} = -\vec{\nabla}U$. Comparando esta relação com a equação [4.17], é viável assumir que $U = e\varphi - e\dot{\vec{r}}.\vec{A}.$

Assim sendo, pode-se obter a Lagrangeana do problema que por definição (18) é tomada como sendo diferença entre as energias cinética (T) e potencial (U):

$$L = T - U = \frac{m\ddot{\vec{r}}^2}{2} - e\varphi + e\dot{\vec{r}}.\vec{A},$$
(4.18)

onde $T = \frac{m\ddot{\vec{r}}^2}{2}$.

O Hamiltoniano clássico está relacionado à Lagrangiana como:

$$H = \vec{p}.\vec{r} - L = \vec{p}.\vec{r} - \frac{m\vec{r}^2}{2} + e\varphi - e\vec{r}.\vec{A}$$
(4.19)

Usando a definição de \vec{p} a partir da Lagrangeana:

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} = m.\dot{\vec{r}} + e\vec{A}$$
(4.20)

é possível escrever,

$$\dot{\vec{r}} = \frac{\vec{p} - e\vec{A}}{m} \tag{4.21}$$

Agora substituindo [4.21] em [4.19],

$$H = \frac{\vec{p}(\vec{p} - e\vec{A})}{m} - \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m} - \frac{e(\vec{p} - e\vec{A}).\vec{A}}{m} + e\varphi$$
(4.22)

Logo, o Hamiltoniano clássico para uma partícula carregada em um campo eletromagnético é

$$H = \frac{[\vec{p} - e\vec{A}(\vec{r}, t)]^2}{2m} + e\varphi(\vec{r}, t)$$
(4.23)

No calibre de Couloumb, $\varphi=0,$ o último termo é desprezado e o Hamiltoniano tem a aparência:

$$H = \frac{[\vec{p} - e\vec{A}(\vec{r}, t)]^2}{2m}$$
(4.24)

abrindo essa equação para obter algo da forma $H = H_0 + V(t)$,

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{e}{2m}(\vec{p}.\vec{A} + \vec{A}.\vec{p}) + \frac{e^2\vec{A}^2}{2m}$$
(4.25)

Geralmente, o último termo é considerado pequeno em comparação com o termo cruzado, e deve ser ponderado para campos muito intensos ou quando a intensidade do campo é extremamente alta, o que não é o caso do problema sendo resolvido aqui. Então, para campos fracos, tem-se a expressão que demonstra soluções em que se pode formular a representação de interação sendo, $H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} e V(t) = \frac{e}{2m} (\vec{p}.\vec{A} + \vec{A}.\vec{p}).$

4.2.2 Hamiltoniano de Dipolo Elétrico Quântico

Agora é viável substituir o momento na mecânica clássica pela mecânica quântica (19), o potencial vetorial permanece clássico e modula apenas a força de interação.

$$\vec{p} \to -i\hbar \vec{\nabla}.$$
 (4.26)

Assim, o potencial tem a forma,

$$V(t) = \frac{i\hbar}{2m} e(\vec{\nabla}.\vec{A} + \vec{A}.\vec{\nabla})$$
(4.27)

Observando pela regra da cadeia, $\vec{\nabla}.\vec{A} = (\vec{\nabla}.\vec{A}) + \vec{A}.\vec{\nabla}$, isso significa que quando aplicada a uma função de onda $\vec{\nabla}.\vec{A} |\psi\rangle = (\vec{\nabla}.\vec{A}) |\psi\rangle + \vec{A}.(\vec{\nabla} |\psi\rangle)$; o último termo é zero porque nesse problema está sendo utilizado o calibre de Coulomb $(\vec{\nabla}.\vec{A}) = 0$). Assim, $\vec{\nabla}.\vec{A} = \vec{A}.\vec{\nabla}$ e o potencial tem a forma,

$$V(t) = \frac{i\hbar}{m} e\vec{A}.\vec{\nabla}$$
(4.28)

Fazendo uso novamente da definição de momento e aplicando a equação [4.11], o Hamiltoniano de interação tem o formato,

$$V(t) = -\frac{e}{m}\vec{A}.\vec{p} = -\frac{e}{m}[A_0\hat{\epsilon}.\vec{p}e^{i(\vec{k}.\vec{r}-\omega t)} + A_0\hat{\epsilon}.\vec{p}e^{-i(\vec{k}.\vec{r}-\omega t)}]$$
(4.29)

Na aproximação do dipolo elétrico, se o comprimento de onda do campo for muito maior que a dimensão da partícula $(\lambda \to \infty)$, $(|k| \to 0)$ acontece que $e^{i(\vec{k}.\vec{r})} \approx 1$ (20).

$$V(t) = \frac{-eA_0}{m} [\hat{\epsilon}\vec{p}e^{-i\omega t} - \hat{\epsilon}\vec{p}e^{i\omega t}]$$
(4.30)

Ao aplicar a equação [4.7] é possível encontrar $A_0 = \frac{iE_0}{2\omega}$, e o Hamiltoniano do Modelo semi-clássico procurado é apresentado como:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{ieE_0}{2m\omega} [\hat{\epsilon}\vec{p}e^{-i\omega t} - \hat{\epsilon}\vec{p}e^{i\omega t}]$$
(4.31)

Também é interessante ir um pouco mais além e apresentar o Hamiltoniano do Dipolo Elétrico:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{eE_0}{m\omega}(\hat{\epsilon}.\vec{p})\sin(\omega t)$$
(4.32)

.

Como o campo elétrico pode ser definido de modo que $\vec{E}(t) = E_0 \sin(\omega t)\hat{\epsilon}$, a equação [4.32] se torna:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{m\omega}(\vec{E}(t).\vec{p}).$$
 (4.33)

5 Tratamento Inteiramente Quântico para a Interação Radiação-Matéria

Depois de apresentada a teoria semi-clássica, este capítulo vem para exibir uma análise inteiramente quântica do Hamiltoniano para a Interação Radiação-Matéria.

5.1 Hamiltoniano Atômico, H_A

No final século XIX, o físico alemão Niels Bohr sugeriu que a relação entre a energia proveniente das transições atômicas e a frequência envolvida neste processo é dada como $E = hv = \hbar\omega$. É feita uma simplificação para representar o átomo como um sistema de dois níveis, como simbolizado na figura [2]



Figura 2 – Representação esquemática das energias para um átomo de dois níveis. A escolha do zero de energia é arbitrária.

Os estados superior e inferior do sistema são escritos como $|+\rangle \in |-\rangle$, respectivamente e são autoestados do Hamiltoniano atômico, H_A :

$$H_A \left| \pm \right\rangle = \hbar \omega_{\pm} \left| \pm \right\rangle \tag{5.1}$$

com autovalores de energia $\hbar \omega_{\pm}$. O operador H_A também pode ser escrito utilizando o operador unitário, 1:

$$H_A = \mathbb{1}H_A\mathbb{1} \tag{5.2}$$

Sendo $|i\rangle$ uma base ortonormal completa, a relação de completude da Mecânica Quântica pode ser útil,

$$\sum_{i} \left| i \right\rangle \left\langle i \right| = \mathbb{1} \tag{5.3}$$

CAPÍTULO 5. TRATAMENTO INTEIRAMENTE QUÂNTICO PARA A INTERAÇÃO RADIAÇÃO-MATÉRIA

agora aplicando a equação [5.3] em [5.2], a expressão para H_A se torna,

$$H_A = \sum_{i} |i\rangle \langle i| H_A \sum_{j} |j\rangle \langle j| = \sum_{i} |i\rangle \sum_{j} \hbar \omega_j \langle i|j\rangle \langle j|, \qquad (5.4)$$

sabendo que para bases ortonormais $\langle i|j\rangle=\delta_{ij},$ a equação acima se torna,

$$H_A = \sum_{i} |i\rangle \,\hbar\omega_i \,\langle i| = \sum_{i} \hbar\omega_i \,|i\rangle \,\langle i| \,.$$
(5.5)

Por conveniência, como mostrado na figura supracitada, a referência de energia zero foi colocada para um valor precisamente a meio caminho entre as energias dos dois estados (21):

$$\hbar\omega_{+} - \hbar\omega_{-} = \hbar(\omega_{+} - \omega_{-}) = \hbar\omega_{a}$$
(5.6)

Desta forma, um conjunto com novos valores é apresentado para as energias:

$$\langle +|H_A|+\rangle = \frac{\hbar\omega_a}{2} \langle +|+\rangle \tag{5.7}$$

е

$$\langle -|H_A|-\rangle = -\frac{\hbar\omega_a}{2}\langle -|-\rangle.$$
(5.8)

A partir desses novos valores, o operador H_A da equação [5.5] pode ser reescrito como:

$$H_A = \left(\frac{\hbar\omega_a}{2}\right)\left|+\right\rangle\left\langle+\right| + \left(-\frac{\hbar\omega_a}{2}\right)\left|-\right\rangle\left\langle-\right| = \frac{\hbar\omega_a}{2}\left(\left|+\right\rangle\left\langle+\right| - \left|-\right\rangle\left\langle-\right|\right) \tag{5.9}$$

Discutindo agora a representação matricial do Hamiltoniano atômico, com uma expansão de $|+\rangle \langle +|$ nas bases $|\pm\rangle$ e depois aplicando a ortogonalidade:

$$|+\rangle\langle+| \iff \begin{pmatrix} \langle+|+\rangle\langle+|+\rangle & \langle+|+\rangle\langle+|-\rangle \\ \langle-|+\rangle\langle+|+\rangle & \langle-|+\rangle\langle+|-\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(5.10)

Esta última matriz pode ser escrita como a soma de duas outras:

$$|+\rangle\langle+|\iff \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right]$$
(5.11)

A primeira matriz entre colchetes é a matriz identidade 1, a segunda matriz é a representação de Pauli $\hat{\sigma}_z$ para operador de spin, o que resulta em

$$|+\rangle \langle +| \Longleftrightarrow \frac{\mathbb{1} + \hat{\sigma_z}}{2} \tag{5.12}$$

Repetindo o mesmo processo para $|-\rangle \langle -|$, tem-se

$$|-\rangle \langle -| \Longleftrightarrow \frac{\mathbb{1} - \hat{\sigma_z}}{2} \tag{5.13}$$

CAPÍTULO 5. TRATAMENTO INTEIRAMENTE QUÂNTICO PARA A INTERAÇÃO RADIAÇÃO-MATÉRIA

Ao substituir esses novos valores na equação [5.9], uma nova expressão para H_A é obtida em termos de $\hat{\sigma}_z$:

$$H_A = \frac{\hbar\omega_a}{2} \left(\frac{\mathbb{1} + \hat{\sigma_z}}{2} - \frac{\mathbb{1} - \hat{\sigma_z}}{2} \right)$$
(5.14)

Portanto, o operador Hamiltoniano para o átomo é

$$\hat{H}_A = \frac{\hbar\omega_a}{2}\hat{\sigma}_z \tag{5.15}$$

5.2 Hamiltoniano do Campo, H_C

As unidades gaussianas propõem uma mudança de unidades atômicas nas expressões da mecânica quântica (22). Os modos clássicos de cavidade decorrem destas unidades, e no seu desenvolvimento as quantidades $\epsilon_0 \in \mu_0$ são iguais a 1.

Em unidades gaussianas, as equações de Maxwell, para um campo livre sem carga, se tornam: $\begin{subarray}{c} \end{subarray}$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \tag{5.16}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} - \frac{\epsilon_0 \mu_0}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0 \tag{5.17}$$

$$\vec{\nabla}.\vec{E} = 0 \tag{5.18}$$

$$\vec{\nabla}.\vec{B} = 0 \tag{5.19}$$

Tomando o rotacional da equação [5.16], aplicando a equação [5.17] e usando a identidade matemática $\nabla \times (\nabla \times E) = \nabla \cdot (\nabla \cdot E) - \nabla^2 E$, tem-se a equação de onda em \vec{E} :

$$\vec{\nabla}^2 \vec{E} - \frac{\epsilon_0 \mu_0}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0$$
(5.20)

Esta equação pode agora ser submetida às condições de contorno da cavidade. Pensando no exemplo de uma cavidade conforme a figura 3:

Onde foi escolhido o eixo z como a direção ao longo do comprimento da cavidade e uma polarização \vec{E} na direção \hat{x} . Desta forma, o primeiro termo da equação [5.20] se torna uma derivada de segunda ordem em z, o que leva a própria equação [5.20] se tornar uma equação diferencial em z e t:

$$\frac{\partial^2 E(z,t)}{\partial z^2} - \frac{\epsilon_0 \mu_0}{c^2} \frac{\partial^2 E(z,t)}{\partial t^2} = 0$$
(5.21)


Figura 3 – Microcavidade óptica em uma dimensão. A largura da cavidade define as frequências dos modos de campo confinados.

As paredes da cavidade são condutores elétricos perfeitos e a componente transversal, componente em \hat{x} , do campo elétrico se anula em z = 0 e z = L, sendo L o comprimento da cavidade. É possível encontrar uma solução para esta equação através do uso de separação de variáveis da forma:

$$E_m(z,t) = E_{0m} \sin(kz) e^{-i\Omega_m t} \hat{x};$$

$$k = \frac{m\pi}{L}, m = 1, 2, 3, ...$$
(5.22)

onde, m é o modo de campo de amplitude de E_{0m} , k é o vetor de onda do modo m de propagação, e Ω_m é frequência de modo m. Para obter Ω_m , a solução encontrada é substituída na equação de onda [5.21]:

$$(-k^{2} + \frac{\epsilon_{0}\mu_{0}\Omega_{m}^{2}}{c^{2}})E_{0}\sin(kz)e^{-i\Omega_{m}t}\hat{x} = 0$$
(5.23)

$$k^2 = \frac{\epsilon_0 \mu_0 \Omega_m^2}{c^2} \tag{5.24}$$

e, aplicando a definição de k, a frequência de modo de cavidade encontrada é:

$$\Omega_m = \frac{mc\pi}{L\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}.\tag{5.25}$$

Agora com o objetivo de encontrar soluções para \vec{B} , pode se usar $\vec{E}(z,t)$ na equação [5.17]:

$$\frac{\partial B_y(z,t)}{\partial z}\hat{x} = -i\frac{\epsilon_0\mu_0\Omega_m}{c}E_{0m}\sin(kz)e^{-i\Omega_m t}\hat{x}$$
(5.26)

$$\vec{B}_m(z,t) = -i\frac{\epsilon_0\mu_0\Omega_m}{c}E_{0m}\cos(kz)e^{-i\Omega_m t}\hat{y}$$
(5.27)

empregando a [5.24], a expressão para indução magnética na cavidade é:

$$\vec{B}_m(z,t) = -i\frac{\epsilon_0\mu_0\Omega_m}{c}E_{0m}\cos(kz)e^{-i\Omega_m t}\hat{y}$$
(5.28)

Em geral, os campos elétrico e magnético encontrados na cavidade podem ser expandidos em termos das quantidades de modo:

$$\vec{E}(z,t) = \sum_{m} E_{0m} \sin(kz) e^{-i\Omega_m t} \hat{x}$$

$$\vec{B}(z,t) = \sum_{m} -i\sqrt{\epsilon_0 \mu_0} E_{0m} \cos(kz) e^{-i\Omega_m t} \hat{y}$$
(5.29)

Sabendo que a densidade de energia clássica que é dada por $U = \epsilon_0 \vec{E}.\vec{E} + \frac{1}{\mu_0}\vec{B}.\vec{B}$ (23), é possível aplicar as expansões feitas em [5.29], calculando a dependência do tempo representada por $\langle \rangle$ para encontrar U:

$$U = \sum_{m,m'} [\epsilon_0 \langle \vec{E}_m^*(z,t) . \vec{E}_{m'}(z,t) \rangle + \frac{1}{\mu_0} \langle \vec{B}_m^*(z,t) . \vec{B}_{m'}(z,t) \rangle]$$

$$U = \sum_{m,m'} \frac{1}{2} [E_{0m} E_{0m'} \sin^2(k_m z) + \frac{\epsilon_0 \mu_0}{\mu_0} E_{0m} E_{0m'} \cos^2(k_m z)]$$
(5.30)

Integrar essa densidade de energia no volume da cavidade produz a energia H total da cavidade. Como as quantidades dos campos estão expandidas em modos ortogonais, $m \neq m'$, essa integração simplifica as quantidades $E_{0m}E_{0m'}$, tal que

$$H = \sum_{m} \frac{1}{2} \int_{V} d\nu [\epsilon_0 E_m^2 \sin^2(k_m z) + \frac{\epsilon_0 \mu_0}{\mu_0} E_m^2 \cos^2(k_m z)]$$
(5.31)

Esta equação sobre z com o volume da cavidade unidimensional sendo Lmostra que a energia total é:

$$H = \sum_{m} \frac{1}{2} \left[\epsilon_0 \frac{L}{2} E_{0m}^2 + \frac{\epsilon_0 \mu_0}{\mu_0} \frac{L}{2} E_{0m}^2 \right].$$
(5.32)

Agora fazendo algumas substituições para simplificar o cálculo da energia total,

$$E_{0m}e^{-i\Omega_m t} = Q_m(t) \left[\frac{2\Omega_m^2}{\epsilon_0 L}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$-iE_{0m}e^{-i\Omega_m t} = -iQ_m(t) \left[\frac{2\Omega_m^2}{\epsilon_0 L}\right]^{\frac{1}{2}} = \dot{Q}(t) \left[\frac{2}{\epsilon_0 L}\right]^{\frac{1}{2}}$$
(5.33)

os termos $Q_m(t)$ e $\dot{Q}(t)$ são a coordenada de modo e a velocidade de modo, respectivamente. As expressões para $\vec{E} \in \vec{B}$ se tornam:

$$\vec{E}(z,t) = Q_m(t) \left[\frac{2\Omega_m^2}{\epsilon_0 L}\right]^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \hat{x}$$

$$\vec{B}(z,t) = \dot{Q}_m(t) \sqrt{\epsilon_0 \mu_0} \left[\frac{2}{\epsilon_0 L}\right]^{\frac{1}{2}} \cos\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \hat{y}$$
(5.34)

Essas novas expressões podem ser substituídas na equação [5.32],

$$H = \sum_{m} \frac{1}{2} \left[\epsilon_0 \frac{L}{2} \left(\frac{2\Omega_m^2}{\epsilon_0 L} \right) Q_m^2 + \frac{\epsilon_0 \mu_0}{\mu_0} \frac{L}{2} \left(\frac{2}{\epsilon_0 L} \right) \dot{Q}_m^2 \right] = \sum_{m} \frac{1}{2} \left(\Omega_m^2 Q_m^2 + \dot{Q}_m^2 \right)$$
(5.35)

A transição para uma expressão na mecânica quântica para o campo elétrico, assim como a energia total da cavidade, envolve uma conversão direta das variáveis Q_m^2 e \dot{Q}_m^2 em operadores \hat{Q}_m e \hat{P}_m :

$$\hat{Q}_m = \left[\frac{\Omega_m}{\hbar}\right]^{\frac{1}{2}} Q \Longrightarrow \Omega_m^2 Q_m^2 = \hbar \Omega_m \hat{Q}_m^2$$

$$\hat{P}_m = \left[\frac{1}{\hbar \Omega_m}\right]^{\frac{1}{2}} \dot{Q} \Longrightarrow \dot{Q}_m^2 = \hbar \Omega_m \dot{P}_m^2$$
(5.36)

aplicando esses novos operadores na equação [5.35], o operador correspondente à energia total \hat{H}_C será:

$$\hat{H}_C = \sum_m \frac{\hbar\Omega_m}{2} \left(\hat{Q}_m^2 + \hat{P}_m^2 \right) \tag{5.37}$$

Os operadores de levantamento e abaixamento para um determinado modo de campo, correspondem à adição ou remoção, respectivamente, de um fóton desse modo e podem ser construídos a partir dos operadores \hat{Q}_m e \hat{P}_m :

$$\hat{a}_m = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{Q}_m + i \hat{P}_m \right)$$

$$\hat{a}_m^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{Q}_m - i \hat{P}_m \right)$$
(5.38)

Resolvendo as equações de [5.38] para \hat{Q}_m e \hat{P}_m em termos de \hat{a} e \hat{a}_m^{\dagger} :

$$\hat{Q}_m = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}_m^{\dagger} + \hat{a}_m \right)$$

$$\hat{P}_m = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}_m^{\dagger} - \hat{a}_m \right)$$
(5.39)

esses termos sendo inseridos novamente na equação [5.37] apresentam:

$$\hat{H}_C = \sum_m \frac{\hbar\Omega_m}{2} \left(\hat{Q}_m^{\dagger} \hat{Q}_m + \hat{P}_m^{\dagger} \hat{P}_m \right) = \sum_m \frac{\hbar\Omega_m}{2} \left(\hat{a}_m \hat{a}_m^{\dagger} + \hat{a}_m^{\dagger} \hat{a}_m \right).$$
(5.40)

O comutador $[\hat{a}_m, \hat{a}_m^{\dagger}]$ é desenvolvido em livros sobre Mecânica Quântica e tem valor igual a 1 (12); substituindo na equação acima $\hat{a}_m \hat{a}_m^{\dagger} = \hat{a}_m^{\dagger} \hat{a}_m + 1$, assim, \hat{H}_C se torna:

$$\hat{H}_C = \sum_m \frac{\hbar\Omega_m}{2} \left(2\hat{a}_m^{\dagger} \hat{a}_m + 1 \right) = \sum_m \hbar\Omega_m \left(\hat{a}_m^{\dagger} \hat{a}_m + \frac{1}{2} \right).$$
(5.41)

O termo $\frac{\hbar\Omega_m}{2}$ partilhado por todos os modos leva à energia do ponto zero. Como são as mudanças na energia com relação a alguma referência que podem ser medidas, pode-se excluir o fator $\frac{1}{2}$ acima. Logo, Hamiltoniano do campo resultante será:

$$\hat{H}_C = \sum_m \hbar \Omega_m \hat{a}_m^{\dagger} \hat{a}_m.$$
(5.42)

Quando este operador atua sobre um vetor de estado descrevendo todos os modos da cavidade, a energia total mantida em cada modo é determinada como o número de fótons n_m no modo m vezes da energia $\hbar\Omega_m$ de um único fóton naquele modo:

$$H_C |n_1 n_2 \cdots n_m\rangle = n_1 \hbar \Omega_1 + n_2 \hbar \Omega_2 + \dots + n_m \hbar \Omega_m |n_1 n_2 \cdots n_m\rangle$$
(5.43)

Os estados $|n_1n_2\cdots n_m\rangle$ são, na verdade, os autoestados do Hamiltoniano H_C .

Discutindo a base dos auto
estados do operador \hat{N}

Um estado de Fock, em mecânica quântica, é qualquer estado do espaço de Fock com um número bem definido de partículas em cada estado.

De acordo com a mecânica quântica, o número de partículas de um sistema quântico pode não estar bem definido, sendo possível que, ao fazer-se um medida do número de partículas, se obtenham diferentes resultados. No entanto, em certos casos, o sistema pode ter um estado físico peculiar no qual o número de partículas esteja totalmente bem definido e os estados nos quais isto acontece são precisamente os estados de Fock.

Limitando a um sistema com um só tipo de partícula e um só modo, um estado de Fock representa-se por $|n\rangle$, onde n é um valor inteiro. Isto significa que existem n quanta de excitação nesse modo.

Estes estão definidos para seguir as seguintes relações:

1.
$$a^{\dagger} |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

2.
$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

como consequência destas duas relações e introduzindo o operador número de partículas definido como $\hat{N} = a^{\dagger}a$, pode-se concluir uma terceira correlação: $\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle$.

No contexto do presente trabalho, se considerou apenas um modo de campo na cavidade, de forma que $\Omega_m = \omega_c$ e o hamiltoniano do campo pode ser escrito simplesmente como:

$$\hat{H}_C = \hbar \omega_c \hat{a}^{\dagger} \hat{a}, \qquad (5.44)$$

5.3 Estados Coerentes

Os estados de campo que mais se assemelham aos estados clássicos são os chamados estados coerentes (24). Na óptica quântica, o estado coerente refere-se a um estado do campo eletromagnético quantizado que descreve um tipo máximo de coerência e um tipo clássico de comportamento.

Além disso, em contraste com os autoestados de energia do sistema, a evolução temporal de um estado coerente é concentrada ao longo das trajetórias clássicas. O oscilador

harmônico linear quântico e, portanto, os estados coerentes, surgem na teoria quântica de uma ampla gama de sistemas físicos. Eles ocorrem na teoria quântica da luz (eletrodinâmica quântica) e outras teorias de campo quântico bosônico.

Na ótica clássica, a luz é considerada como ondas eletromagnéticas que irradiam de uma fonte. Muitas vezes, a luz laser coerente é considerada como luz emitida por muitas dessas fontes que estão em fase. Na verdade, a imagem de um fóton em fase com outro não é válida na teoria quântica. A radiação laser é produzida em uma cavidade ressonante onde a frequência de ressonância da cavidade é a mesma que a frequência associada às transições elétricas atômicas, fornecendo fluxo de energia para o campo. À medida que a energia no modo ressonante aumenta, a probabilidade de emissão estimulada, apenas nesse modo, aumenta. Esse é um ciclo de retroalimentação positiva no qual a amplitude no modo ressonante aumenta exponencialmente até que alguns efeitos não lineares o limitem. Como um contra-exemplo, uma lâmpada irradia luz para um continuum de modos, e não há nada que selecione um modo sobre o outro. O processo de emissão é altamente aleatório no espaço e no tempo. Em um laser, no entanto, a luz é emitida em um modo ressonante e esse modo é altamente coerente. Assim, a luz laser é idealizada como um estado coerente. Classicamente se descreve tal estado por um campo elétrico oscilando como uma onda estável.

Um estado coerente distribui sua incerteza da mecânica quântica igualmente entre as coordenadas canonicamente conjugadas, posição e momento, e a incerteza relativa na fase e amplitude são aproximadamente iguais - e pequenas em alta amplitude.

Se o modo contém um grande número de fótons N, as flutuações em torno dos valores médios do campo são pequenas $\frac{1}{\sqrt{N}}$, então a descrição clássica é uma boa aproximação.

Os estados coerentes $|\alpha\rangle$ são auto
estados do operador aniquilação com autovalor complex
o α :

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle, \langle \alpha | \hat{a}^{\dagger} = \alpha^* \langle \alpha |.$$
 (5.45)

O autovalor não é real já que \hat{a} não Hermitiano, isto é, não é um observável. Expandindo na base dos autoestados do operador \hat{N} , se encontra:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$
(5.46)

Desta forma, o estado coerente é uma superposição dos estados de Fock. A evolução temporal do estado coerente é dada por:

$$|\alpha(t)\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n e^{-in\omega t}}{\sqrt{n!}} |n\rangle = |\alpha(0)e^{-i\omega t}\rangle, \qquad (5.47)$$

e agora ao avaliar o campo elétrico médio,

$$\langle \alpha(t) | \hat{E}_x(z) | \alpha(t) \rangle = \varepsilon_0 \sin(kz) \langle \alpha(t) | (\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}) | \alpha(t) \rangle = \varepsilon_0 \sin(kz) | \alpha_0 | \cos(\phi_0 - \omega t)$$
(5.48)

onde $\alpha(0) = |\alpha(0)|e^{i\phi_0}$, ou seja, um campo clássico com amplitude $|\alpha(0)|$ e fase ϕ_0 . A probabilidade de encontrar o campo em um estado com n fótons é

$$P_n = |\langle n | \alpha \rangle|^2 = |e^{-|\alpha|^2/2} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|^2 = e^{-\bar{n}} \frac{\bar{n}^n}{n!}, \qquad (5.49)$$

esta é a distribuição de Poisson com média $\bar{n} = \langle \alpha | \hat{n} | \alpha \rangle = |\alpha|^2$. O desvio padrão desta distribuição é $\Delta n = \sqrt{\langle \hat{n}^2 \rangle - \langle n \rangle^2} = \sqrt{\bar{n}}$ sendo que a largura da distribuição de fótons é $\frac{\Delta n}{\bar{n}}$ vai pra zero quando $\frac{1}{\sqrt{n}}$ para estados coerentes de grandes amplitudes $|\alpha| \gg 1$, o limite clássico.

5.4 Hamiltoniano de Interação Átomo-Campo, H_{int}

No eletromagnetismo, sendo D o momento de dipolo entre o átomo e o campo (25), a energia de interação é dada por:

$$H_{int} = -e\vec{r}.\vec{E} = \vec{D}.\vec{E} \tag{5.50}$$

Para operadores, a equação acima é obtida fazendo a correspondência entre o vetor \vec{r} e o operador \hat{r} :

$$\vec{D} = -e\vec{r} \iff \hat{D} = -e\hat{r} \tag{5.51}$$

Os elementos de matriz de \hat{D} definem as transições onde o dipolo é permitido no sistema atômico. Por simetria, os elementos de matriz $\langle i| - e \overrightarrow{r} |j\rangle$ desaparecem se $i \in j$ estão no mesmo estado. Como \overrightarrow{r} é antisimétrico,

$$\langle i| - e\vec{r} |j\rangle = \int d^3 \mathbb{r} \psi^*(\vec{r}) \vec{r} \psi(\vec{r}) = 0, sei = j$$
(5.52)

Também é possível para elementos de matriz desaparecer para certos $i \neq j$, esse modelo assume transições entre dois níveis de energia no sistema atômico onde o dipolo é permitido. Os autoestados de H_A , $|\pm\rangle$ são usados para representar essa matriz de dipolo:

$$\mathbb{D} = -e \left(\begin{array}{c} \langle +|\,r\,|+\rangle & \langle +|\,r\,|-\rangle \\ \langle -|\,r\,|+\rangle & \langle -|\,r\,|-\rangle \end{array} \right) = -e \left(\begin{array}{c} 0 & \langle +|\,r\,|-\rangle \\ \langle -|\,r\,|+\rangle & 0 \end{array} \right)$$
(5.53)

Fazendo $\langle +|-er|-\rangle = -er_{+-} = D_{+-}, \langle -|-er|+\rangle = -er_{-+} = D_{+-} = D_{+-}^*$ e aplicando as matrizes de Pauli:

$$\mathbb{D} = -e \begin{pmatrix} 0 & D_{+-} \\ D_{+-}^* & 0 \end{pmatrix} = D_{+-} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + D_{+-}^* \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = D_{+-}\sigma_+ + D_{+-}^*\sigma_- \quad (5.54)$$

As matrizes σ_+ e σ_- correspondem aos operadores atômicos de levantamento e abaixamento, respectivamente. Através da equação [5.34], é possível expressar o campo elétrico termos dos operadores \hat{a} e \hat{a}^{\dagger} :

$$\vec{E} = \sum_{m} \left(\hat{a}_{m}^{\dagger} + \hat{a}_{m} \right) \left(\frac{\hbar \Omega_{m}}{\epsilon_{0} L} \right)^{\frac{1}{2}} \sin(k_{m} z) = \sum_{m} \left(\hat{a}_{m}^{\dagger} + \hat{a}_{m} \right) \xi_{m} \sin(k_{m} z)$$
(5.55)
$$\left(\hbar \Omega_{m} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{a}_{m} = \operatorname{compara}_{m} \operatorname{cliftring}_{m} \operatorname{pon}_{m} \operatorname{fitten}_{m} (26)$$

onde $\xi_m = \left(\frac{\hbar\Omega_m}{\epsilon_0 L}\right)^2$ é o campo elétrico por fóton (26).

Agora, combinando as equações [5.54]
e[5.55]tem-se como resultado o Hamiltoniano quantizado da interação:

$$\hat{H}_{int} = \sum_{m} \hat{D}.\hat{E} = \sum_{m} \left[(D_{+-}\sigma_{+} + D_{+-}^{*}\sigma_{-}) \left(\hat{a}_{m}^{\dagger} + \hat{a}_{m} \right) \xi_{m} sen(k_{m}z) \right] \\ \hat{H}_{int} = \sum_{m} \hbar \left[g_{m} \hat{a}_{m}^{\dagger} \hat{\sigma}_{+} + g_{m} \hat{a}_{m} \hat{\sigma}_{+} + g_{m}^{*} \hat{a}_{m}^{\dagger} \hat{\sigma}_{-} + g_{m}^{*} \hat{a}_{m} \hat{\sigma}_{-} \right]$$
(5.56)

onde g_m e g_m^* são a constante de acoplamento e seu complexo conjugado que descrevem a força de interação entre uma transição atômica e o modo de campo. No qual, a sua forma explícita é:

$$g_m = \frac{D_{+-}}{2\hbar} \xi_m \sin(k_m z) = -\frac{er_{+-}\cos(\theta)}{2\hbar} \left(\frac{\hbar\Omega_m}{\epsilon_0 L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin(kz)$$
(5.57)

o termo $\cos(\theta)$ representa a projeção do vetor de polarização do campo elétrico ao longo do momento de dipolo do átomo. Quando o campo elétrico fica ao longo do eixo do dipolo, o acoplamento é maximizado; por outro lado, um dipolo alinhado perpendicularmente ao campo não se unirá a esse campo. No capítulo anterior, na quantização do campo, a polarização do campo elétrico foi colocada com sendo na direção \hat{x} e por simplificação, a orientação do momento de dipolo também vai ser assumida como sendo na direção \hat{x} ; e assim, o termo $\cos(\theta)$ pode ser substituído por 1. Logo, os termos de acoplamento se tornam:

$$g_m = -\frac{er_{+-}}{2\hbar} \left(\frac{\hbar\Omega_m}{\epsilon_0 L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin(kz).$$
(5.58)

Na equação [5.56], existem quatro termos finais de interação. O primeiro termo descreve um processo no qual os estados do átomo e do modo de campo são simultaneamente levantados; da mesma forma, o quarto termo descreve o abaixamento dos estados do modo atômico e do campo. O segundo e terceiro termos são descrevem "processos cruzados" nos quais ocorre uma troca de energia, em que a excitação do átomo é acompanhada por um abaixamento do campo e vice-versa. Observando a equação [5.56] de uma outra maneira:

$$\hat{H}_{int} = \sum_{m} \hbar \left(\hat{a}_m + \hat{a}_m^{\dagger} \right) \left(g_m \hat{\sigma}_+ + g_m^* \hat{\sigma}_- \right)$$
(5.59)

Neste instante, combinando as equações [5.15], [5.42] e [5.59], o Hamiltoniano completo, H_{tot} , pode ser dado como:

$$\hat{H}_{tot} = \hat{H}_A + \hat{H}_C + \hat{H}_{int} \tag{5.60}$$

$$\hat{H}_{tot} = \frac{\hbar\omega}{2}\hat{\sigma}_z + \sum_m \hbar\Omega_m \hat{a}_m^{\dagger}\hat{a}_m + \sum_m \hbar\left(\hat{a}_m + \hat{a}_m^{\dagger}\right)\left(g_m\hat{\sigma}_+ + g_m^*\hat{\sigma}_-\right)$$
(5.61)

Supondo apenas um modo de campo de radiação $\Omega_m = \omega_c$, a equação anterior pode ser simplificada:

$$\hat{H}_{Rabi} = \frac{\hbar\omega_a}{2}\hat{\sigma}_z + \hbar\omega_c \hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \hbar\left(\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}\right)\left(g\hat{\sigma}_+ + g^*\hat{\sigma}_-\right)$$
(5.62)

A equação acima, [5.62], conhecida como Hamiltoniano de Rabi (27), descreve a interação entre um átomo de dois níveis e um único modo de um campo eletromagnético quantizado.

6 Modelo de Jaynes-Cummings

O modelo de Jaynes-Cummings consiste no uso das técnicas de representação de Interação e RWA sobre o Hamiltoniano de Rabi.

O *Rotating Wave Approximation*, RWA, é utilizado para um sistema atômico de dois níveis que interage com o campo elétrico oscilante cuja frequência está próxima da ressonância com a freqüência de transição atômica. Desta forma, a dessintonia é muito pequena e por isso se negligencia o termo que oscila rapidamente, já que em uma escala de tempo apreciável, essas oscilações terão rapidamente médias equivalentes a zero (28).

Escrevendo o hamiltoniano de Rabi na forma

$$H = \omega_c a^{\dagger} a + \omega_a \sigma_+ \sigma_- + g \left(a^{\dagger} \sigma_- + a \sigma_+ \right) + g \left(a \sigma_- + a^{\dagger} \sigma_+ \right)$$
(6.1)

onde $\hbar = 1$ e os termos $g(a^{\dagger}\sigma_{-} + a\sigma_{+})$ representam os chamados termos girantes e os termos $g(a\sigma_{-} + a^{\dagger}\sigma_{+})$ são os termos não-ressonantes ou contragirantes.

Os termos girantes representam a transição do átomo do estado excitado para o fundamental com emissão de um fóton, e a transição do estado fundamental para o estado excitado com a absorção de um fóton. Esses dois processos são as típicas transições ópticas em sistemas quânticos. Por outro lado, os termos contragirantes representam a transição para o estado fundamental do átomo junto com a absorção de um fóton e a transição para o estado excitado com a emissão de um fóton.



Figura 4 – Diagrama esquemático dos termos girantes (esquerda) e contra-girantes (direita). A seta amarela orientada para a direita indica a emissão de um fóton e orientada para a esquerda a absorção de um fóton.

A aproximação RWA consiste em eliminar esses termos da hamiltoniana de Rabi. Dessa forma, se obtém o hamiltoniano do modelo de Jaynes Cummings:

$$H = \omega_c a^{\dagger} a + \omega_a \sigma_+ \sigma_- + g \left(a^{\dagger} \sigma_- + a \sigma_+ \right)$$
(6.2)

Uma outra maneira de entender como os dois pares restantes, $\hat{a}\hat{\sigma}_{-}$ e $\hat{a}^{\dagger}\sigma_{+}$, são descartados nessa aproximação, é considerando a evolução livre (g = 0) desses operadores na representação de Heisenberg. Aplicando o fato que os operadores $\hat{\sigma}_{\pm}$ têm a dependência temporal de Heisenberg:

$$\hat{\sigma}_{\pm}(t) = \hat{\sigma}_{\pm}(0)e^{\pm i\omega_a t} \tag{6.3}$$

Combinando essas dependência com a dependência temporal dos operadores de criação e destruição, obtemos

$$\hat{a}(t)\hat{\sigma}_{-}(t) = \hat{a}(0)\hat{\sigma}_{-}(0)e^{-i(\omega_{c}+\omega_{a})t} \\ \hat{a}^{\dagger}(t)\hat{\sigma}_{+}(t) = \hat{a}^{\dagger}(0)\hat{\sigma}_{+}(0)e^{i(\omega_{c}+\omega_{a})t'}$$
(6.4)

assim, esses pares evoluem aproximadamente na frequência da cavidade óptica. Em contraste,

$$\hat{a}(t)\hat{\sigma}_{+}(t) = \hat{a}(0)\hat{\sigma}_{+}(0)e^{-i(\omega_{c}-\omega_{a})t} \\ \hat{a}^{\dagger}(t)\hat{\sigma}_{-}(t) = \hat{a}^{\dagger}(0)\hat{\sigma}_{-}(0)e^{i(\omega_{c}-\omega_{a})t},$$
(6.5)

estes últimos dois termos têm dependências que variam lentamente perto da ressonância. Durante alguns períodos ópticos, as combinações anti-ressonantes mostradas nas equações [6.4] tendem à uma média equivalente a zero, ou seja muito pequena, quando comparadas às combinações expressadas nas equações [6.5]. Isso equivale à mesma análise física usada para discutir a RWA. Consequentemente, renunciando às combinações das equações de [6.4], pode-se obter um novo Hamiltoniano total baseado na equação [5.62]

$$\hat{H}_{JC} = \frac{\hbar\omega_a}{2}\hat{\sigma}_z + \hbar\omega_c \hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \hbar g \Big(\hat{a}\hat{\sigma}_+ + \hat{a}^{\dagger}\hat{\sigma}_-\Big),\tag{6.6}$$

a equação acima também recebe o nome de Hamiltoniano de Jaynes-Cummings.

Diferentemente do hamiltoniano de Rabi, o hamiltoniano de Jaynes-Cummings pode ser diagonalizado analiticamente. Uma maneira esclarecedora de ver esta situação é representando a hamiltoniana na forma matricial considerando uma base finita, posteriormente mostraremos o resultado geral da diagonalização. Escrevendo a hamiltoniana JC na base $\{|n\rangle |q\rangle\}$, onde $|q\rangle$ representa o estado do átomo como excitado $|+\rangle$ ou $|-\rangle$ fundamental, e $|n\rangle$ representa o estado do campo. Foi escolhido, como um exemplo, o conjunto base ordenado: $\{|0-\rangle, |0+\rangle, |1-\rangle, |1+\rangle, |2-\rangle, |2+\rangle\}$ e obtida a representação matricial do hamiltoniano Jaynes-Cummings

$$H_{\text{RWA}} = \begin{cases} |0-\rangle & |0+\rangle & |1-\rangle & |1+\rangle & |2-\rangle & |2+\rangle \\ \langle 0-| & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle 0+| & 0 & \omega_a + 0\omega_c & \sqrt{1}g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_a + 0\omega_c & \sqrt{1}g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{1}g & 1\omega_c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega_a + 1\omega_c & \sqrt{2}g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}g & 2\omega_c & 0 \\ \langle 2+| & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_a + 2\omega_c \end{cases}$$
(6.7)

A matriz é bloco diagonal formada por blocos 2×2 , além do estado fundamental de energia zero. Os autovalores e autovetores podem ser obtidos facilmente diagonalizando cada bloco. Dois aspectos importantes devem ser acrescentados na discussão:

- 1. na maioria dos experimentos em óptica tanto em sistemas atômicos com em sistemas de estado sólido (nanoestruturas semicondutoras) o acoplamento g satisfaz a condição $g \ll \omega_c, \omega_a;$
- 2. fenômenos de interesse ocorrem na situação da ressonância, ou seja quando $\omega_c \sim \omega_a$, ou $\Delta = \omega_c - \omega_a \sim 0$.

Analisando qualquer bloco da hamiltoniana anterior é possível notar que na condição de ressonância $\Delta \sim 0$ e $g \ll \omega_c$, os termos girantes RWA acoplam estados $|n, +\rangle \leftrightarrow$ $|n+1, -\rangle$ os quais são quase degenerados, de forma que a pesar de g ser pequeno, o acoplamento pode produzir trocas dinâmicas de energia entre o átomo e o campo, conhecidas como oscilações de Rabi. Mais adiante será mostrado que a frequência dessas oscilações no limite proposto é da ordem de g.

Agora os efeitos dos termos contragirantes serão incluídos, a representação matricial da hamiltoniana de Rabi na mesma base restrita definida acima é dada por

$$H_{\text{Rabi}} = \begin{cases} |0-\rangle & |0+\rangle & |1-\rangle & |1+\rangle & |2-\rangle & |2+\rangle \\ \langle 0-| & 0 & 0 & \sqrt{1}g & 0 & 0 \\ 0 & \omega_a + 0\omega_c & \sqrt{1}g & 0 & 0 & \sqrt{2}g \\ 0 & \sqrt{1}g & 1\omega_c & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1}g & 0 & 0 & \omega_a + 1\omega_c & \sqrt{2}g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}g & 2\omega_c & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}g & 0 & 0 & \omega_a + 2\omega_c \end{cases}$$
(6.8)

neste caso, os termos contragirantes acoplam estados $|n, -\rangle \leftrightarrow |n+1, +\rangle$, os quais não são quase degenerados, de fato a diferença de energia entre esses estados é $2\omega_c$. Portanto, os acoplamentos contragirantes serão importantes unicamente se o elemento de matriz do acoplamento $g\sqrt{n+1}$ é da ordem de $2\omega_c$. Já que foi considerado $g \ll \omega_g, \omega_c$ então a contribuição dos termos contragirantes pode ser desprezada. Assim, a condição para o uso da aproximação de onda girante pode ser escrita como $g\sqrt{n} \ll 1$. Na figura 5 se mostra esquematicamente as transições induzidas pelos termos girantes em azul e pelos termos contragirantes em vermelho.

A aproximação de onda girante também pode ser discutida em outro contexto, escrevendo a hamiltoniana de Rabi na representação de interação,

$$H^{I}_{\mathbf{Rabi}} = \omega_{c}a^{\dagger}a + \omega_{a}\sigma_{-} + g(\sigma_{+}ae^{i(\omega_{c}-\omega_{a})t} + \sigma_{-}a^{\dagger}e^{-i(\omega_{c}-\omega_{a})}) + (6.9)$$
$$g(\sigma_{-}ae^{i(\omega_{c}+\omega_{a})t} + \sigma_{+}a^{\dagger}e^{-i(\omega_{c}+\omega_{a})})$$



Figura 5 – Diagrama esquemático das transições ópticas induzidas pelos termos ressonantes e não ressonantes para $\Delta=0$

Próximo à condição de ressonância, $\omega_c \sim \omega_a$ os termos contragirantes oscilam rapidamente em comparação com os termos girantes. A pesar de g ser fraco, os termos girantes oscilam aproximadamente na região de frequências típicas $\sim g$ para a troca de energia campo-átomo. Os termos contragirantes, pelo contrario, oscilam com frequências na ordem da frequência da cavidade $2\omega_c$ muito longe da frequência característica $\sim g$. Desta forma esses termos não devem contribuir significativamente para a troca de energia dinâmica entre o átomo e o campo, seu único efeito deve ser a adição de uma pequena componente de alta frequência nas oscilações de Rabi devida aos termos girantes.

Dessa forma, para o regime de acoplamento fraco definido por $g \ll \omega_c \omega_a e g \sqrt{n} \ll 1$ e na condição próxima a ressonância $\Delta \sim 0$, os termos contragirantes podem ser desprezados e ficar apenas com a parte da interação átomo-campo devida aos termos girantes ou ressonantes.

Agora estudaremos em detalhe os autovalores e autovetores de cada bloco 2×2 representativo do hamiltoniano de Jaynes-Cummings. Lembramos que para descrever completamente o estado do sistema, será especificado tanto o estado do átomo ($|g\rangle$ ou $|e\rangle$) quanto o estado do campo, que na representação de energia é dado pelo estado de número $|n\rangle$, com n = 0, 1, 2, ... Como mostrado, no hamiltoniano de Jaynes-Cummings [6.6] a interação acopla os estados $|+\rangle |n\rangle \equiv |+, n\rangle$ ao estado $|-\rangle |n+1\rangle \equiv |-, n+1\rangle$, a prova disso pode ser feita considerando a propriedade $\langle n| \hat{a}^{\dagger} = \langle n+1| \sqrt{n+1}$:

$$\langle e | \langle n | \hat{\sigma}_{-} \hat{a}^{\dagger} | g \rangle | n' \rangle = \langle n | \hat{a}^{\dagger} | n' \rangle = \langle n+1 | \sqrt{n+1} | n' \rangle = \sqrt{n+1} \langle n+1 | n' \rangle$$
(6.10)

Para montar o Hamiltoniano de forma matricial, devem ser consideradas as conhecidas propriedades dos operadores de criação e destruição $\hat{a}^{\dagger}\hat{a} |n\rangle = n |n\rangle e \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$, e assim avaliamos os elemento de matriz

$$\langle -, n+1 | \hat{H}_{JC} | +, n \rangle = \langle +, n | \hat{H}_{JC} | -, n+1 \rangle = \hbar g \sqrt{n+1}$$
 (6.12)

$$\langle -, n+1 | \hat{h}_{JC} | -, n+1 \rangle = \hbar \omega_c (n+1)$$
 (6.13)

$$\langle +, n | \hat{H}_{JC} | +, n \rangle = \hbar(\omega_a + n\omega_c)$$
 (6.14)

Com esses resultados e considerando $\hbar = 1$, a matriz \hat{H}_{JC} é construída como:

$$H_n = \begin{array}{cc} |+,n\rangle & |-,n+1\rangle \\ \langle+,n| \begin{pmatrix} \omega_a + n\omega_c & g\sqrt{n+1} \\ g\sqrt{n+1} & (n+1)\omega_c \end{pmatrix}$$

Diagonalizando a matriz acima é possível encontrar os autovalores:

$$E_{-} = \frac{\Delta}{2} + \omega_c(n+1) - \frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2 + \Omega_n^2}$$
(6.15)

$$E_{+} = \frac{\Delta}{2} + \omega_{c}(n+1) + \frac{1}{2}\sqrt{\Delta^{2} + \Omega_{n}^{2}}$$
(6.16)

onde $\Delta = \omega_a - \omega_c$ e $\Omega_n = 2g\sqrt{n+1}$, os quais são mostrados na figura 6 como função da dessintonia Δ . Note que na região correspondente a $\Delta = 0$ os autovalores apresentam um anti-cruzamento que indica o regime onde o acoplamento g é mais eficiente.

A diferença de energias é dada por:

$$E_{+} - E_{-} = \Delta_n = \sqrt{\Delta^2 + \Omega_n^2}, \qquad (6.17)$$

e são mostrados na figura 7 como função do parâmetro Δ . Note que para valores grandes de Δ as diferenças de energias de cada bloco 2×2 tendem a ser iguais, a menor diferença de energia ocorre em $\Delta = 0$.

e os autovetores obtidos são:

$$|\psi_{n,-}\rangle = \cos\theta |+,n\rangle - \sin\theta |-,n+1\rangle \tag{6.18}$$

$$|\psi_{n,+}\rangle = \sin\theta |+,n\rangle + \cos\theta |-,n+1\rangle \tag{6.19}$$

sendo $\tan(2\theta) = -\frac{2g\sqrt{n+1}}{\Delta} e \sin(2\theta) = \frac{2g\sqrt{n+1}}{\Delta_n}$, $\cos(2\theta) = -\frac{\Delta}{\Delta_n}$. É útil inverter a equação anterior para obter a dinâmica de forma analítica, assim

$$|n,+\rangle = \cos\theta |\psi_{n,-}\rangle + \sin\theta |\psi_{n,+}\rangle \tag{6.20}$$

$$|n+1,-\rangle = -\sin\theta |\psi_{n,-}\rangle + \cos\theta |\psi_{n,+}\rangle \tag{6.21}$$



Figura 6 – Autoenergias do modelo de Jaynes-Cummings em função da dessintonia Δ para $g=0.5,\,\omega_c=10,\,n=0$ en=1



Figura 7 – Diferença de energias correspondentes aos autovalores de Jaynes-Cummings como função da dessintonia, para n = 0 e n = 1

Como mostrado acima, os autovalores no modelo de Jaynes-Cummings podem ser obtidos analiticamente, no entanto o modelo de Rabi que considera o efeito dos termos



a) Autovalores do Hamiltoniano de Rabi em função do parametro de acoplamento g



b) Autovalores do Hamiltoniano de Jaynes-Cummings em função do parametro de acoplamento
 g

Figura 8 – Autovalores dos Hamiltonianos de Jaynes-Cummings e Rabi em função do acoplamento g

contra-girantes não pode ser diagonalizado exatamente. Assim, calculamos numericamente os autovalores, os quais são apresentados no gráfico [8a)], onde consideramos valores de g muito grandes com $\Delta = 0$. Já no gráfico da figura [8 b)], foi diagonalizado numericamente o hamiltoniano de Jaynes-Cummings nas mesmas condições. É possível observar que os dois resultados coincidem para g muito pequenos, onde a aproximação RWA ainda é válida; conforme o acoplamento aumenta, o modelo de Jaynes-Cummings perde validade e apresenta resultados muito diferentes.

Na figura [9a)], mostramos os autovalores para valores pequenos do acoplamento gainda com $\Delta = 0$, dentro da aproximação RWA, ou seja, diagonalizando o hamiltoniano de Jaynes-Cummings. O efeito da interação g é quebrar fracamente a degenerescência dos



b) $\Delta = 10$

Figura 9 – Autovalores no modelo de Jaynes-Cummings para pequenos valores do acoplamento ge para diversos regimes de dessintonia

níveis. A separação em energias entre os níveis quase degenerados é na ordem de g. A separação entre os níveis aumenta quando g aumenta. A figura [9 b)], apresenta o mesmo caso para uma dessintonia $\Delta \neq 0$, como esperado o aumento na dessintonia produz um maior afastamento entre os autovalores. Por completeza, calculamos numericamente os autovalores como função de Δ , para g = 1, mostrados na gráfico da figura [24]. Como mostrado anteriormente, o anti-cruzamento dos níveis de energia ocorre para $\Delta = 0$. Para Δ grandes, o sistema é desacoplado e se cai no chamado regime dispersivo, onde o acoplamento g produz apenas um deslocamento dos níveis de energia. Um detalhe desta situação pode ser vista na figura 11 onde mostramos em linhas tracejadas as autovalores do sistema acoplado e desacoplado praticamente coincidem, apenas um deslocamento nas energias é



Figura 10 – Autovalores como função de Δ

observado. Já que o sistema esta numa região de acoplamento fraco, nesse limite o sistema se comporta como dois sistemas: sistema de dois níveis (SDN) e fótons independentes.



Figura 11 – Autoenergias para o modelo de Jaynes-Cummings em linhas sólidas. Em linhas tracejadas, as energias para o caso desacoplado

Conhecidas as soluções analíticas para os autoestados, pode-se encontrar a dinâmica do sistema, para isso é necessário definir um estado inicial. Sendo $\psi(0) = a |n, e\rangle + b |n + 1, g\rangle$ o estado inicial com a e b escalares, o estado $\psi(t) = U(t)\psi(0)$ é obtido a partir do operador evolução temporal $U(t) = e^{\frac{-iHt}{\hbar}}$. Usando as equações 6.19 e 6.21,

$$\psi(t) = e^{\frac{-iHt}{\hbar}} \left(|\psi_{n-}\rangle \left(a\cos\theta - b\sin\theta \right) + |\psi_{n+}\rangle \left(a\sin\theta + b\cos\theta \right) \right)$$
(6.22)

Desta forma, o operador \hat{H} pode atuar sobre seus próprios autoestados. Simplificando o problema através do uso de um estado inicial em que a = 1 e b = 0,

$$\psi(t) = e^{\frac{-iHt}{\hbar}} \left(|\psi_{n-}\rangle \cos\theta + |\psi_{n+}\rangle \sin\theta \right) = e^{\frac{-E_{-}t}{\hbar}} |\psi_{n-}\rangle \cos\theta + e^{\frac{-E_{+}t}{\hbar}} |\psi_{n+}\rangle \sin\theta \quad (6.23)$$

Ao projetar o resultado anterior sobre $\langle n, +|$ e usando as equações que definem os autovetores de \hat{H} 6.19, e 6.21, obtemos

$$\langle n, +|\psi(t)\rangle = e^{\frac{-E_{-t}}{\hbar}} \langle n, +|\psi_{n,-}\rangle \cos\theta + e^{\frac{-E_{+t}}{\hbar}} \langle n, +|\psi_{n,+}\rangle \sin\theta \qquad (6.24)$$

$$=e^{\frac{-}{\hbar}}\cos^2\theta + e^{\frac{-}{\hbar}}\sin^2\theta \tag{6.25}$$

Calculando $|\langle n, +|\psi(t)\rangle|^2 = \langle n, +|\psi(t)\rangle^* \langle n, +|\psi(t)\rangle$, e após alguma manipulações

$$|\langle n, +|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^4\theta + 2\sin^2\theta\cos^2\theta\cos\left[\frac{(E_+ - E_-)t}{\hbar}\right] + \sin^4\theta \qquad (6.26)$$

Ao aplicar algumas propriedades trigonométricas¹ e relações de sin θ e cos θ com os parâmetros do hamiltoniano definidas acima, se obtêm: $4\sin^2\theta\cos^2\theta = \Omega_n^2/\Delta_n^2$ e $\cos^4\theta + \sin^4\theta = \frac{\Delta^2}{\Delta_n^2} + \frac{\Omega_n^2}{2\Delta_n^2}$. Assim,

$$|\langle n, +|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{\Delta^2}{\Delta_n^2} + \frac{\Omega_n^2}{\Delta_n^2} \cos^2\left[\frac{(E_+ - E_-)t}{\hbar}\right]$$
(6.27)

No caso ressonante, $\Delta = 0$, tem-se que $\Delta_n^2 = \Omega_n^2$ e o resultado anterior pode ser escrito como

$$P_{n+} = \cos^2\left[\frac{(E_+ - E_-)t}{\hbar}\right] = \cos^2\left(\frac{\Delta_n t}{2}\right),\tag{6.28}$$

que representa a probabilidade do SDN ocupar o estado excitado $|+\rangle$, este termo é equivalente a calcular $\langle \sigma_{-}\sigma_{+}\rangle$ no estado $|\psi(t)\rangle$.

É possível obter o mesmo resultado anterior usando a representação de interação. Para isto, é necessário separar o hamiltoniano em uma parte livre e outra com a interação, $H = H_0 + H_1$, onde $H_0 = \omega_c a^{\dagger} a + \omega_a \sigma_+ \sigma_-$ é a parte livre e a interação é dada por $H_1 = g(a^{\dagger} \sigma_- + a \sigma_+)$. Na representação de interação foi usada a seguinte transformação

$$H_i = e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} H_1 e^{\frac{-iH_0t}{\hbar}} = \hbar g \left[e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} a^{\dagger} \sigma_- e^{\frac{-iH_0t}{\hbar}} + e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} a \sigma_+ e^{\frac{-iH_0t}{\hbar}} \right]$$
(6.29)

O primeiro termo é formado por $e^{i\Omega ta^{\dagger}a}a^{\dagger}e^{-i\Omega ta^{\dagger}a}$, $e^{i\omega t\sigma_{+}\sigma_{-}}\sigma_{-}e^{-i\omega t\sigma_{+}\sigma_{-}}$. Para o tratamento desses termos foi utilizada a formula de Baker–Campbell–Hausdorff (13)

$$e^{\alpha A}Be^{-\alpha A} = B + \alpha [A, B] + \frac{\alpha^2}{2!} [A, [A, B]] + \cdots$$
 (6.30)

sendo os comutadores $[a, a^{\dagger}] = 1, [\sigma_+, \sigma_-] = \sigma_z$, se obteve:

$$e^{i\omega_c ta^{\dagger}a}a^{\dagger}e^{-i\omega_c ta^{\dagger}a} = a^{\dagger}e^{i\omega_c t} \tag{6.31}$$

е

$$e^{i\omega_a t\sigma_+\sigma_-}\sigma_-e^{-i\omega_a t\sigma_+\sigma_-} = \sigma_-e^{-i\omega_a t} \tag{6.32}$$

 $\overline{1 \quad \sin 2x = 2 \sin x \cos x, \ \cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x, \ e \ (1 + \cos x)/2 = \cos^2(x/2)}$

Procedendo de igual forma com o segundo termo,

$$H_i = \hbar g \left[a^{\dagger} e^{i\omega_c t} \sigma_- e^{-i\omega_a t} + a e^{-i\omega_c t} \sigma_+ e^{i\omega_a t} \right]$$
(6.33)

$$= \hbar g \left[a^{\dagger} \sigma_{-} e^{-i\Delta t} + a \sigma_{+} e^{i\Delta t} \right].$$
(6.34)

A equação de Schrodinger para H_i é dada por $i\hbar\partial\psi_i = H_i\psi_i$, onde na representação de interação $\psi(t) = e^{-iH_0t/\hbar}\psi_i(t)$. Já que as duas funções de onda diferem em apenas uma fase global, as duas representam adequadamente o estado do sistema. Em geral para um sistema de dois níveis, podemos escrever uma solução como

$$\psi_i(t) = \sum_n c_{+,n}(t) |+, n\rangle + c_{-,n}(t) |-, n\rangle$$
(6.35)

para o modelo de Jaynes-Cummings, temos apenas dois níveis,

$$\psi_i(t) = c_{+,n}(t) |+, n\rangle + c_{-,n+1}(t) |-, n+1\rangle$$
(6.36)

Usando as propriedades conhecidas dos operadores do problema $a^{\dagger}\sigma_{-} |n, +\rangle = \sqrt{n+1} |n+1, -\rangle$, $a\sigma_{-} |n, +\rangle = 0$, $a^{\dagger}\sigma_{-} |n+1, -\rangle = 0$ e $a\sigma_{+} |n+1, -\rangle = \sqrt{n+1} |n, +\rangle$, substituindo ψ_{i} na equação de Schrodinger e projetando sobre $|n, +\rangle$ e $|n+1, -\rangle$, se obtêm duas equações diferenciais acopladas

$$\dot{c}_{n,+} = -ig\sqrt{n+1}e^{i\Delta t}c_{n+1,-} \tag{6.37}$$

$$\dot{c}_{n+1,-} = -ig\sqrt{n+1}e^{-i\Delta t}c_{n,+} \tag{6.38}$$

Uma solução mais simples destas equações pode ser obtida para o caso ressonante $\Delta = 0$ considerando que em t = 0 o SDN se encontra no estado excitado $|n, +\rangle$, desta forma, $c_+(t = 0) = 1$, ou seja $c_{n,+}(0) = c_n(0)$ e $c_{n+1,-} = 0$, onde $c_n(0)$ é a amplitude de probabilidade para o campo unicamente. Assim, obtemos

$$c_{n,+}(t) = c_n(0)\cos(g\sqrt{n+1}t) = c_n(0)\cos\left(\frac{\Delta_n t}{2}\right)$$
 (6.39)

$$c_{n+1,-}(t) = -c_n(0)\frac{2ig\sqrt{n+1}}{\Delta_n}\sin(g\sqrt{n+1}t) = c_n(0)\frac{2ig\sqrt{n+1}}{\Delta_n}\sin\left(\frac{\Delta_n t}{2}\right)$$
(6.40)

As probabilidades de ocupação são

$$P_{n,+} = |c_{n,+}|^2 = |c_n(0)|^2 \cos^2\left(\frac{\Delta_n t}{2}\right)$$
(6.41)

$$P_{n+1,-} = |c_{n-}|^2 = |c_n(0)|^2 \frac{4g^2(n+1)}{\Delta_n^2} \sin^2\left(\frac{\Delta_n t}{2}\right)$$
(6.42)

onde $|c_n(0)|^2$ representa a probabilidade da presença de *n* fótons no campo no tempo t = 0. Ilustramos esses resultados analíticos na figura 12, onde mostramos a evolução das



b) $g = 0.5, \Delta = 0, n = 1$

Figura 12 – Probabilidades de ocupação do estado excitado e fundamental do SDN para o caso ressonante $\Delta=0.$

probabilidades de ocupação do SDN para o vácuo e para a cavidade ocupada com um fóton, respectivamente. Note que as probabilidades desenvolvem oscilações conhecidas como oscilações de Rabi, as quais evidenciam a troca de energia coerente entre o campo e o SDN.

Na seção seguinte, mostraremos resultados obtidos numericamente para diversas

situações de interesse que normalmente não podem ser tratadas analiticamente. Nos resultados a seguir consideramos parâmetros típicos de um SDN baseado em pontos quânticos semicondutores do tipo III-V, onde $\hbar\omega_a \sim 1$ eV e os dois níveis uma excitação elétron-buraco, onde $|+\rangle$ representa o exciton e $|-\rangle$ é a ausência de exciton ou o chamado vácuo excitonico.

7 Resultados e Discussões

Através da simulação (29, 30) das oscilações de Rabi no modelo de Jaynes-Cummings (JC) é possível, por exemplo, determinar em boa aproximação o comportamento da interação luz-matéria da mecânica quântica, descrevendo um único sistema de dois níveis interagindo com um único modo de cavidade eletromagética.

O Hamiltoniano para esse sistema é a equação [5.62] ou com a aproximação de onda girante, RWA, descrita pela equação [6.6]. Os parâmetros escolhidos para o tratamento desse problema em questão são unidades tal que $\hbar = 1$; a frequência da cavidade, $\omega_c = 1000$ meV, é compatível com sistemas de pontos quânticos imersos em microcavidades ou cristais fotônicos. Como mencionado anteriormente, o SDN é associado à formação de um éxciton neutro; os valores para Δ foram escolhidos como múltiplos do termo de acoplamento, a frequência do SDN pode ser escrita em termos da dessintonia $\omega_a = \omega_c + \Delta$, e N é o número de estados de Fock da cavidade. A dimensão do espaço de Hilbert é dada por $|q\rangle \otimes |n\rangle$.

Adotando que inicialmente o sistema sempre comece com o átomo excitado $\psi(t = 0) = |n+\rangle$, as probabilidades de ocupação do átomo foram plotadas para ser possível a visualização e comparação dos resultados. É claro como em todos os gráficos a seguir a energia é coerentemente transferida entre a cavidade e o átomo. A princípio, todos os gráficos foram obtidos com o uso do RWA com N = 10, caso contrário, será informado.



Figura 13 – Probabilidade de ocupação do estado excitado. Caso ressonante $\Delta=0$ e sem acoplamento g=0.

Inicialmente foi estudado o caso mais simples, quando a frequência da cavidade e a frequência característica do sistema de dois níveis (SDN) são iguais, ou seja, o caso ressonante, $\Delta = 0$. Apesar de não ser completamente realístico, foi considerado g = 0 e



Figura 14 – Caso ressonante com acoplamento e variando o numero de fótons.

cavidade vazia, n = 0. Na figura [13], esse caso está ilustrado, onde se mostra que devido ao acoplamento ser nulo, não existe transferência de energia entre o SDN e o campo, assim a probabilidade de ocupação do estado excitado é constante e igual a 1. Note que para esse conjunto de parâmetros, o estado $|n+\rangle$ é um autoestado do sistema, por tanto não existe evolução.

Na figura [14], apesar do estado campo continuar sendo igual a 0, n = 0, existe acoplamento de forma que torna possível a transferência de energia entre o sistema de dois níveis e a cavidade. Deve-se notar a aparição de oscilações na probabilidade de ocupação. Essas oscilações são conhecidas como oscilação de Rabi e como foi considerado n = 0, se tem oscilações de Rabi no vácuo. Como mostrado anteriormente no capítulo 6, a frequência das oscilações de Rabi são dadas por $\omega_{\text{Rabi}} = \frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2 + 4g^2(n+1)}$. Assim, o tempo que



Figura 15 – Caso fora da ressonância com acoplamento e variando o numero de fótons

leva o SDN para recuperar a população no estado excitado é dado por $t_e \omega_{\text{Rabi}} = n\pi$. Para os parâmetros escolhidos, este tempo corresponde a $t_e = n\pi$ como pode ser facilmente comprovado.

À medida que o número de fótons na cavidade aumenta, a frequência de Rabi também aumenta e por tanto o tempo t_e diminui como mostrado na figura [14(b)]. Dessa forma, se apresenta a flexibilidade no controle da transferência de população a partir de uma ação na cavidade.

Na figura [15], está apresentada a probabilidade ocupação do estado excitado na situação fora da ressonância, $\Delta \neq 0$. Foi considerado o vácuo, n = 0, na figura [15(a)] e o caso com a cavidade ocupada, n = 5, na figura [15(b)]. Quando o número de fótons presentes na cavidade aumenta, é notável o esperado aumento na frequência das oscilações de Rabi.



Figura 16 – Efeito do aumento da dessintonia sobre a probabilidade de ocupação do estado excitado, com acoplamento e variando o numero de fótons.

A diferença dos casos anteriormente apresentados onde a amplitude das oscilações de Rabi variam de 0 até 1, no caso fora da ressonância, as oscilações de Rabi são incompletas, a amplitude da probabilidade de ocupação claramente depende de $n, g \in \Delta$ como mostra as equações deduzidas no Capítulo 6. A amplitude máxima das oscilações de Rabi é dada por $\frac{\Delta^2}{\Delta^2 + 4g^2(n+1)}$, para os parâmetros da figura [15(a)], isto corresponde a ~ 0.86, como mostra a figura.

À medida que se aumenta a dessintonia, a probabilidade do SDN permanece no estado excitado tende a 1. É simples mostrar que se a razão $g/\Delta < 1$, a as oscilações de Rabi são da forma $P_e \sim 1 + 4(n+1)(g/\Delta)^2(\cos(\Delta t/2)^2 - 1)$, assim para valores suficientemente pequenos de g/Δ se espera que $P_e \sim 1$. Este comportamento pode ser



Figura 17 – Efeito do aumento do acoplamento sobre a probabilidade de ocupação, caso ressonante e variando o numero de fótons.

verificado na figura [16] para o vácuo e para um estado de campo com n = 5 fótons.

Para o caso ressonante $\Delta = 0$, na figura [17], foi analisado o efeito do acoplamento, g, sobre as oscilações de Rabi. Como esperado, quando o acoplamento aumenta, a frequência das oscilações também deve aumentar; além disso, o efeito de g sobre a frequência é dominante em comparação ao efeito de n. No limite $g \gg \Delta$ é possível mostrar que a frequência de Rabi é $\omega_{\text{Rabi}} \sim \sqrt{ng}$, o que evidencia o caráter dominante sobre n.

Por completeza, na figura [18], são mostrados os mesmos resultados da figura [17] na situação fora da ressonância, o aumento na frequência de Rabi é visível, assim como a esperada diminuição da amplitude das oscilações.

Como mencionado anteriormente, quando o acoplamento se torna comparável às



Figura 18 – Efeitos do aumento da dessintonia, com acoplamento forte e variando o numero de fótons

frequências da cavidade ou à frequência característica do SDN, o modelo de JC perde validade. Se faz necessário o uso do modelo de Rabi, definido pela hamiltoniana [5.62]. Para exemplificar o comportamento neste regime, se considerou $g = \omega_c$, este limite é normalmente conhecido como ultra-forte e tem se verificado em alguns sistemas experimentais baseados em qubits supercondutores (31).

Na figura [19], se considerou o limite de acoplamento forte com $g = \omega_c$ e na situação de ressonância e com a cavidade vazia n = 0. No cálculo da probabilidade de ocupação, na figura [19(a)] foi usada a hamiltoniana de JC, como esperado ela produz as oscilações características na ocupação. Deve-se lembrar que a hamiltoniana JC não leva em conta os termos que acoplam estados com energias na ordem de ω os quais agora são relevantes.



Figura 19 – a) Probabilidade de ocupação calculada usando a RWA (hamiltoniano de Jaynes-Cummings), b) calculado usando a contribuição dos termos não-ressonantes (hamiltoniano de Rabi).

O resultado é muito diferente quando se usa a hamiltoniana de Rabi, ou seja, quando os efeitos dos termos contragirantes são considerados, como pode ser visto na figura [19(b)]. Deve-se notar que a periodicidade foi aparentemente destruída e apesar do sistema estar na ressonância, o SDN não consegue transferir completamente sua população para o estado fundamental e vice-versa.

Uma situação semelhante eh observada na figura [20], onde os mesmos parâmetros foram usados na figura [19], porém com a cavidade contendo n = 5 fótons. Pode-se notar na figura [20(b)] que as quase-oscilações na probabilidade de ocupação também aumentam de frequência quando o número de fótons aumenta. Um cálculo em teoria de perturbações (fora do escopo do presente trabalho) permite mostrar, por exemplo que a dinâmica do



Figura 20 – Probabilidade de ocupação mostrando o efeito do aumento do numero de fótons.

estado $|n, +\rangle$ dada por $U(t)|n+\rangle$, é descrita através de superposições dos estados $|n+\rangle$, $|n \pm 1, -\rangle |n \pm 2, -\rangle$ ponderados com termos oscilantes com frequências $\omega_{n,n\pm 2}$, onde $\omega_n = g\sqrt{n+1}$. Esses termos interferem entre si e eventualmente destruindo a relação de fase entre os diversos termos da superposição. Isto explica a falta de periodicidade da probabilidade de ocupação e o aumento da frequência das quase-oscilações com o número de fótons.

Na figura [21], o sistema foi retirado da ressonância e se observou um comportamento parecido ao observado no caso RWA, o SDN permanece essencialmente no estado excitado como visto na [21(a)]. Igual no caso RWA, pode-se aumentar a população do estado excitado aumentando o número de fótons na cavidade, como eh mostrado na [21(b)].



Figura 21 – Probabilidade de ocupação calculada usando hamiltoniana de Rabi. Caso fora da ressonância e fora do limite de validade da RWA



Figura 22 – Representação esquemática da esfera de Bloch. Os estados quânticos puros de um sistema de dois níveis são representados por pontos sobre a superfície esfera.



Figura 23 – Probabilidade de ocupação para um estado inicial com iguais contribuições de $|+\rangle$ e $|-\rangle$. Caso ressonante variando o numero de fótons

Em todos os casos anteriores o SDN foi preparado no estado inicial excitado $|n, +\rangle$, agora será usado um estado que é uma superposição dada por $\frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle$. Pode-se pensar nesses estados iniciais como vetores dentro de uma esfera, tal como mostrado na figura [22]. Os estados são representados por pontos sobre a esfera; por exemplo, o estado inicial excitado é o ponto sobre o polo norte da esfera. A superposição escolhida como estado inicial se encontra sobre o equador da esfera.

Esta representação é útil para entender a dinâmica do sistema representada na figura [23]. Quando o SDN se encontra numa superposição pode-se pensar na dinâmica como uma rotação do estado inicial ao redor do eixo z da esfera, ao mesmo tempo que roda no plano x - y o SDN, dependendo do estado campo, deverá migrar para os estados

nos polos da esfera. Neste processo existem duas frequências: a frequência associada as rotações e a frequência para transitar do estado inicial para os estados nos polos $|+\rangle$ ou $|-\rangle$. Quando a cavidade está vazia, n = 0, essas frequências coincidem e se tem a situação mostrada na figura [23(a)] que são típicas oscilações de Rabi, entre o estado inicial e o estado fundamental. Quando a cavidade contem um número de fótons diferente de zero, como mostrado na figura [23(b)], o campo permite uma troca de energia mais eficiente e as oscilações produzem transições entre o estado e o estado fundamental. O detalhe mais importante na figura [23(b)] é a aparição clara das duas frequências envolvidas na dinâmica, as quais não são iguais e dependem do número de fótons. Este fenômeno lembra os chamados batimentos na física clássica das oscilações e são chamados no contexto do hamiltoniano de JC de batimentos quânticos.

A figura [24] mostra uma situação parecida a anterior, apenas considerando a dessintonia diferente de zero. Os resultados são os esperados e revelam a forte contribuição da dessintonia sobre a dinâmica interna do sistema especialmente nas rotações do estado inicial no plano x - y.

Nos resultados anteriores o SDN foi colocado em uma superposição, pode-ses fazer algo parecido com os estados do campo. Para isso foi escolhido como estado inicial do SDN o estado excitado $|+\rangle$ e para o estado do campo escolheu-se um estado coerente $|\alpha\rangle$ que como discutido anteriormente há apenas uma superposição de estados de Fock com amplitudes fixas.

O estado coerente consiste de uma superposição de estados com amplitudes fixas. Cada componente tende a dirigir o sistema com sua própria frequência de Rabi. Como resultado, as oscilações colapsam, renascendo posteriormente por causa da natureza quântica do campo e das relações particulares existentes entre os vários coeficientes de $|n\rangle$.

O fenômeno de colapsos e renascimentos é um dos quais pode ser analisado em mecânica quântica segundo o modelo de Jaynes-Cummings e que revela uma nova natureza na evolução temporal de sistemas quânticos. Seria possível esperar que a superposição de soluções periódicas produzissem interferência destrutiva, e, portanto, um colapso. Isso é, de fato, o que acontece. Neste caso as populações do estado fundamental e excitado seriam as mesmas, ou seja, a inversão de população $w(t) = P_e(t) - P_g(t) = 0$ para tempos longos. Além disso, é possível mostrar, que se refere a uma cavidade onde há um estado coerente um outro fenômeno ocorre, os renascimentos, isto significa que o sistema apresenta um aparente colapso e depois de algum tempo passa a oscilar novamente.

Isso significa que o átomo retorna periodicamente ao estado excitado com frequência de Rabi $g\sqrt{n+1}$ que é não nula, mesmo se n = 0, e, portanto, diferente da frequência de Rabi $g\sqrt{n}$ correspondente ao caso em que o átomo está inicialmente no estado fundamental. Assim, um átomo excitado colocado numa cavidade vazia, n = 0, sofre periodicamente, decaimentos espontâneos reversíveis. Esse resultado não é obtido com um campo clássico



b) $\Delta = 5g, g = 1, n = 5$

Figura 24 – Efeito da dessintonia sobre a probabilidade de ocupação quando o estado inicial é uma superposição.

de amplitude nula, indicando a natureza quântica do processo.

No caso em que o átomo se encontra numa cavidade que foi preparada com um estado coerente do campo. Considerando o sistema atomo e campo inicialmente com o átomo no estado fundamental e o campo num estado coerente, ou seja, o vetor de estado inicial é $|e\rangle |\alpha\rangle \equiv |e, \alpha\rangle$, expandindo o estado coerente na base, como explicado anteriormente neste trabalho, o sistema pode ser evoluído até mesmo pelo estado de vácuo

 $\alpha = 0.$

Este fenômeno ocorre porque o estado coerente $|\alpha\rangle$ consiste de uma superposição de estados $|n\rangle$ com amplitudes fixas $\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}$. Fica claro que cada componente $|n\rangle$ de $|\alpha\rangle$ tende a dirigir o sistema com sua própria frequência de Rabi. Como resultado, as oscilações colapsam, renascendo posteriormente por causa da natureza quântica do campo e das relaçõees particulares existentes entre os vários coeficientes de $|n\rangle$. Diz-se que inversao sofre colapsos e renascimentos, e estes occorem numa escala de tempo que depende de $g\sqrt{\bar{n}} = g|\alpha|$, onde $\bar{n} = |\alpha|^2$ é número de fótons do modo. É possível observar que o comportamento de um átomo de dois níveis interagindo com um modo eletromagnético simples, coerente, é bem rico. As oscilações de Rabi, também presentes na descrição através deste modelo, que colapsam e permanecem em repouso, revivem e depois colapsam novamente.

Na figura [25], está apresentada a inversão de população $\langle \psi(t) | \sigma_z | \psi(t) \rangle$, ¹ para o caso ressonante $\Delta = 0$ considerando um estado coerente com numero variável do número médio de fótons. O efeito mais relevante da aparição na dinâmica das diversas frequências oriundas da superposição dos estados do campo. Outro efeito mais significativo é a aparição dos chamados colapsos e ressurgimentos, particularmente visíveis nas figuras [25(b)] e [25(c)]. Esse efeito consiste no colapso da inversão de população, o que significa que probabilidade de ocupação do estado excitado é igual a probabilidade de ocupação do estado fundamental, de forma que o SDN não efetua mais oscilações de Rabi entre esses estados. Após um certo tempo da ordem $t_r \sim \sqrt{ng^{-1}}$ se observa o ressurgimento das oscilações de Rabi. Os colapsos e ressurgimentos estão relacionados com a distribuição inicial dos fótons do campo P(n). Se a distribuição abrange muitos valores diferentes de estados de Fock n, os diversos termos evoluem de acordo com as várias frequências de Rabi presentes, as quais interferem entre si, como resultado a inversão decai rapidamente para zero (colapso). No entanto, se a distribuição não é muito larga o colapso não é permanente, alguns termos da superposição entram em fase e ocorre o ressurgimento na inversão de população. Como mencionado anteriormente, os estados coerentes apresentam uma distribuição P(n) do tipo Poissoniana $P(n) = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}$, com $n = |\alpha|^2$. Apesar do modelo de JC ter uma solução analítica não é possível obter uma expressão para a inversão de população quando o campo se encontra em um estado coerente, apenas soluções aproximadas podem ser obtidas e são as que permitem estimar o tempo de aparição dos ressurgimentos(32).

Finalmente se apresenta o caso fora da ressonância na figura [26], percebe-se que os colapsos e ressurgimentos persistem, já que eles têm origem nas amplitudes das diversas contribuições dos estados de campo e não na dessintonia. Como esperado o SDN não pode completar a transferência entre os estados excitado e fundamental. Este fato fica evidente

¹ Se trata de uma grandeza equivalente à probabilidade de ocupação do estado excitado $\langle \psi(t) | \sigma_{-} \sigma_{+} | \psi(t) \rangle$ mostrada nos resultados anteriores. A probabilidade de ocupação varia entre 0 e 1 e a inversão de população de população varia entre -1 e 1.

ao notar que quando $\Delta = 0$ a inversão de população oscila ao redor de zero, já no caso fora da ressonância, a inversão de população oscila ao redor de 0.4.

No contexto experimental, tem sido observado o acoplamento forte² entre um SDN baseado em pontos quânticos e modos de cavidade (33). No entanto, existe muita dificuldade em observar diretamente as oscilações de Rabi no domínio temporal, a evidência experimental do acoplamento é deduzida através do *splitting* do espectro dos estados de polariton, que praticamente mapeia o comportamento dos autovalores do sistema; dessa forma, a magnitude do *splitting* é proporcional ao acoplamento g.

É importante mencionar que as oscilações de Rabi apresentadas aqui também podem ser obtidas através de uma descrição clássica da luz; elas são igualmente de difícil observação experimental, porém foram medidas de forma direta em pontos quânticos (34).

² Para caracterizar os regimes fraco e forte no contexto de Jaynes-Cummings é necessário definir as constantes de decaimento dos estados do SDN e da cavidade, os que serão chamados de γ e κ , respectivamente. O regime fraco é definido como $g \ll \gamma, \kappa, \omega_a, \omega_c$; neste regime, o hamiltoniano JC é válido, no entanto, torna muiti difícil a observação das oscilações de Rabi, já que elas são amortecidas rapidamente pelos efeitos de dissipação. O regime forte é quando $\gamma, \kappa \ll g \ll \omega_a, \omega_c$; neste regime, o hamiltoniano de JC ainda é válido e permite que o SDN absorva e emita coerentemente muitas vezes antes que os efeitos de dissipação amorteçam as oscilações de Rabi. Ainda neste regime, a RWA é válida já que g é fraco em relação às frequência características do sistema mais forte em relação aos processos que destroem as próprias oscilações de Rabi



Figura 25 – Colapsos e ressurgimentos considerando a aproximação RWA, considerando o efeito do aumento do numero médio de fótons.


Figura 26 – Inversão de população de um SDN com estado do campo inicial coerente. O regime é fora da ressonância na aproximação RWA

8 Conclusões

A intenção de reunir diversos estudos na área de Óptica Quântica e desenvolver uma discussão elaborada envolvendo a interação entre radiação eletromagnética monocromática e a matéria se fez oportuna quando foi feita uma revisão literária de conceitos matemáticos que formam a base de premissas físicas através de seus respectivos postulados constituindo a Mecânica Quântica.

Foi apresentado neste trabalho, o problema de dois níveis, onde um átomo ou um éxciton é acoplado fortemente a uma cavidade eletrodinâmica quântica, e onde é utilizada aproximação dipolar e a aproximação de onda girante (RWA: rotating wave approximation) dentro das quais é possível atestar a validade do Modelo de Jaynes-Cummings. Esta construção teórica levou ao conceito de estados vestidos de interação e à interação característica de um átomo de dois níveis preparado de modo coerente numa cavidade.

Em busca de ir além do que tinha sido discutido, gráficos comparativos mostrando o auxílio que a RWA tem na análise física foram apresentados junto com outros gráficos exibindo a intromissão que um aumento no acoplamento pode causar no modelo de sistema estudado.

Numerosos fenômenos relevantes na Física foram previstos teoricamente pelo Modelo de Jaynes-Cummings, consistindo em análises totalmente quânticas de elementos envolvidos na interação. A ocorrência de emissões espontâneas, o aparecimento de colapsos e ressurgências a partir de radiação coerente incidida na matéria e são fenômenos explicados através da consideração da quantização de energia do campo eletromagnético. Esta construção não tem análogos na Física Clássica, o que mostra sua deficiência e remonta à Mecânica Quântica com fundamentação apropriada para o estudo de partículas atômicas.

Referências

1 JAYNES, E. T.; CUMMINGS, F. W. Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser. *Proceedings of the IEEE*, IEEE, v. 51, n. 1, p. 89–109, 1963. Citado na página 12.

2 CUMMINGS, F. W. Reminiscing about thesis work with et jaynes at stanford in the 1950s. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, IOP Publishing, v. 46, n. 22, p. 220202, 2013. Citado na página 12.

3 REMPE, G.; WALTHER, H.; KLEIN, N. Observation of quantum collapse and revival in a one-atom maser. *Physical Review Letters*, APS, v. 58, n. 4, p. 353, 1987. Citado na página 12.

4 MONROE, C. et al. Demonstration of a Fundamental Quantum Logic Gate. *Phys. Rev. Lett.*, v. 75, p. 4714, 1995. Citado na página 12.

5 BOSE, S. et al. Subsystem Purity as an Enforcer of Entanglement. *Phys. Rev. Lett.*, v. 87, p. 050401, 2001. Citado na página 12.

6 SCHEEL J. EISERT, P. L. K. S.; PLENIO, M. B. Hot entanglement in a simple dynamical model. *J. Mod. Opt*, v. 50, p. 881–889, 2003. Citado na página 12.

7 REITHMAIER, J. P. e. a. Strong coupling in a single quantum dot-semiconductor microcavity system. *Nature*, v. 432, p. 197–200, 2004. Citado na página 12.

8 YOSHIE, T. e. a. Rabi splitting with a single quantum dot in a photonic crystal nanocavity. *Nature*, v. 432, p. 200–203, 2004. Citado na página 12.

9 YOU, J. Q.; NORI, F. Quantum information processing with superconducting qubits in a microwave field. *Phys. Rev. B.*, v. 68, p. 064509, 2003. Citado na página 12.

10 STEINBRUCH, A.; WINTERLE, P. *Geometria analítica*. [S.l.]: McGraw-Hill, 1987. Citado na página 14.

11 NIELSEN, M.; CHUANG, I. L. *Computação quântica e informação quântica*. [S.l.]: Bookman, 2003. Citado na página 16.

12 COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B. *Quantum mechanics*. [S.l.: s.n.], 1986. v. 1. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 38.

13 SAKURAI, J. J.; COMMINS, E. D. *Modern quantum mechanics*. [S.l.]: AAPT, 1995. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 53.

14 PRESKILL, J. Lecture Notes for Physics - Quantum Information and Computation. [S.l.]: a, 2014. Citado na página 23.

15 EISBERG, R.; RESNICK, R. Física Quântica. *Campus, Rio de Janeiro*, 1979. Citado na página 24.

16 DOROBANTU, V. The postulates of quantum mechanics. *arXiv preprint physics/0602145*, 2006. Citado na página 26.

17 GRIFFITHS, D. J. Introduction to electrodynamics. [S.l.]: AAPT, 2005. Citado na página 28.

18 MARION, J. B.; THORNTON, S. T. *Classical mechanics of particles and systems*. [S.l.: s.n.], 1995. Citado na página 30.

19 GRIFFITHS, D. J.; SCHROETER, D. F. Introduction to quantum mechanics. [S.l.]: Cambridge University Press, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 77.

20 KITTEL, C. Introdução a Física do Estado Sólido. 5. ed. [S.l.: s.n.], 1978. Citado na página 31.

21 ZIEGLER, D. P. Spontaneous emission in microcavity lasers. Tese (Doutorado) — Air Force Inst Of Tech Wright-Patterson, 1997. Citado na página 34.

22 JACKSON, J. D. Classical electrodynamics. [S.l.]: AAPT, 1999. Citado na página 35.

23 MACHADO, K. D. *Teoria do eletromagnetismo*. [S.l.]: UEPG, 2007. Citado na página 37.

24 GLAUBER, R. J. Coherent and incoherent states of the radiation field. *Physical Review*, APS, v. 131, n. 6, p. 2766, 1963. Citado na página 39.

25 HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; KRANE, K. S. *Fisica* 4. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos LTDA, Rio de Janeiro, 1990. Citado na página 41.

26 MEYSTRE, P.; SARGENT, M. *Elements of quantum optics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2007. Citado na página 42.

27 SCULLY, M.; ZUBAIRY, M. S. *Quantum Optics*. [S.l.]: Cambridge, 1997. Citado na página 43.

28 WU, Y.; YANG, X. Strong-coupling theory of periodically driven two-level systems. *Physical review letters*, APS, v. 98, n. 1, p. 013601, 2007. Citado na página 44.

29 JOHANSSON, J. R.; NATION, P. D.; NORI, F. Qutip 2: A python framework for the dynamics of open quantum systems. *Computer Physics Communications*, Elsevier, v. 184, n. 4, p. 1234–1240, 2013. Citado na página 57.

30 JOHANSSON, J. R.; NATION, P.; NORI, F. Qutip: An open-source python framework for the dynamics of open quantum systems. *Computer Physics Communications*, Elsevier, v. 183, n. 8, p. 1760–1772, 2012. Citado na página 57.

31 FORN-DIAZ, P. et al. Ultrastrong coupling regimes of light-matter interaction. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 91, n. 2, p. 025005, 2019. Citado na página 62.

32 JONATHAN, D. Estados pré-correlacionados e análise de colapsos e ressurgimentos no modelo de Jaynes-Cummings. Dissertação (Mestrado) — IFGW, Unicamp, 1997. Citado na página 69.

33 HENNESSY, K. et al. Quantum nature of a strongly coupled single quantum dot–cavity system. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 445, n. 7130, p. 896, 2007. Citado na página 70.

34 SCHAIBLEY, J. et al. Direct detection of time-resolved rabi oscillations in a single quantum dot via resonance fluorescence. *Physical Review B*, APS, v. 87, n. 11, p. 115311, 2013. Citado na página 70.

APÊNDICE A – Matrizes de Pauli

As matrizes de Pauli são uma importante classe de matrizes que serão extensivamente usadas neste trabalho. Em matemática e em física matemática, as matrizes de Pauli formam um conjunto de três matrizes complexas $2x^2$ hermitianas e unitárias. Geralmente representadas pela letra grega sigma, σ , são elas:

$$\sigma_0 \equiv I \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{A.1}$$

$$\sigma_1 \equiv \sigma_x \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{A.2}$$

$$\sigma_2 \equiv \sigma_y \equiv \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$
(A.3)

$$\sigma_3 \equiv \sigma_z \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{A.4}$$

Estas matrizes devem seu nome ao físico Wolfgang Pauli. possuem aplicação em vários ramos da física como, por exemplo, momento angular do spin (19), teoria de grupos, computação quântica, etc.. Elas ainda satisfazem algumas propriedades que facilitam o cálculo de grandezas físicas associadas a tais matrizes:

- 1. $\operatorname{Tr}(\sigma_x)\operatorname{Tr}(\sigma_y)=\operatorname{Tr}(\sigma_x)=0$, onde o símbolo Tr é utilizado para denotar a soma dos elementos da diagonal principal de uma matriz;
- 2. $\sigma_x = \sigma_x^{\dagger}, \, \sigma_y = \sigma_y^{\dagger}, \, \sigma_z = \sigma_z^{\dagger}$, ou seja, cada matriz de Pauli é hermitiana;

3.
$$\sigma_x \sigma_x = \sigma_y \sigma_y = \sigma_z \sigma_z = \hat{1}$$

4. $\sigma_i \sigma_j = i \sum_{k=1}^N \epsilon_{i,j,k} \sigma_k$, onde $\epsilon_{i,j,k}$ é conhecido como o símbolo de Levi-Civita.

Operadores hermitianos representam observáveis na mecânica quântica, de forma que as matrizes de Pauli geram o espaço de observáveis do espaço de Hilbert de dimensão dois.

Outra relação utilizada neste trabalho é a equivalência entre operadores eletrônicos e operadores de Pauli. Em informação quântica e computação quântica é comum associar bases ortonormais $|0\rangle$ e $|1\rangle$ a vetores da base de um autoestado qualquer escolhido, tal

que esses vetores possam ser representados segundo a notação matricial $|0\rangle = \begin{bmatrix} 0\\1 \end{bmatrix}$ e

 $|1\rangle = \begin{bmatrix} 1\\ 0 \end{bmatrix}$, onde os estados $|0\rangle \in |1\rangle$ reproduzem os níveis fundamental, $|g\rangle$, e excitado, $|e\rangle$ do elétron, respectivamente.

Combinações do produto interno dos estados desta base podem ser alternativamente utilizadas em cálculos no qual a aplicação das matrizes de Pauli se mostre mais favorável. Abaixo está descrito o exemplo para σ_z , significativamente usado nesse trabalho para descrever o Hamiltoniano do átomo:

$$\sigma_{z} = |e\rangle \langle e| - |g\rangle \langle g| = \begin{bmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \sigma_{z}$$
(A.5)