

IFT

Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

146

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-D.007/00

OK

**Aplicações do Formalismo DDC ao Estudo da Interação da Radiação
com a Matéria a Baixas Energias**

Lúcio Campos Costa

Orientador

Prof. Dr. Jeferson de Lima Tomazelli



Junho de 2000

Agradecimentos

Reservo este espaço para expressar minha gratidão àqueles que, de alguma forma, contribuíram para a concretização deste trabalho, em especial:

- a minha família, pela confiança, apoio e amor que sempre me proporcionou;
- à Débora, pela razão que deu a minha vida e pela paciência extra ao longo destes dois últimos anos;
- ao Jeferson, pela orientação e pela compreensão e apoio nos assuntos pessoais;
- ao Prof. Pimentel, pelo apoio pessoal e profissional e por ter me apresentado ao Jeferson;
- à Prof^a Marilena M. Watanabe de Moraes, pela contribuição que deu à minha formação e por ter me apoiado na decisão de vir para o IFT;
- à Hebe, pela disposição e ajuda nas discussões dos assuntos finais deste trabalho;
- à Cristina, ao Victo e ao Mickel, pela amizade que sempre demonstraram e por me ajudarem em várias etapas da composição deste trabalho;
- aos amigos, Emerson, Marcos e Marcel, que começaram esta caminhada junto comigo e certamente tornaram-na mais agradável;
- aos atuais companheiros de sala, Esdras, Letícia, Sandro, André e Cassius (o calouro), pela amizade e alegria que lhes é típica;
- aos amigos Cláudio F. Alves e ao Alexandre Schmidt, pelo apoio e incentivo desde antes da minha chegada ao Instituto;
- ao Ivan (Taió), pela amizade e companheirismo de sempre;

Agradeço também a todos os funcionários do Instituto, em particular à Marina e à Brigida, pela atenção ímpar que sempre me deram.

Por fim, agradeço à Fapesp pelo apoio financeiro.

Resumo

Na presente dissertação calculamos o desvio Lamb-Retherford e o efeito AC Stark para sistemas atômicos de dois níveis, utilizando o formalismo de Dalibard, Dupont-Roc e Cohen-Tannoudji (DDC), que nos permite identificar as contribuições das flutuações do vácuo do campo de radiação e da reação deste último sobre um elétron ligado. No equilíbrio térmico, extendemos a construção DDC aos modos do campo livre numa cavidade. De forma alternativa, incorporamos a temperatura nos autoestados dos operadores do campo eletromagnético, utilizando o formalismo de Umezawa, conhecido como Thermo Field Dynamics (TFD), comparando as duas abordagens.

Palavras Chaves: equação master, funções de dois pontos, correções radiativas, temperatura finita, Thermo Field Dynamics

Áreas do conhecimento: 1.05.05.00-8 Física Atômica e Molecular, 1.05.03.00-5 Física das Partículas Elementares e Campos.

Abstract

In this work we calculate the Lamb-Retherford shift and the AC Stark effect for two level atomic systems, using the formalism proposed by Dalibard, Dupont-Roc and Cohen-Tannoudji (DDC), which allows us to identify the contributions from vacuum fluctuations of the radiation field and its reaction on a bound electron. In thermal equilibrium, we extend the DDC construct to the modes of the free field in a cavity. Alternatively, we incorporate temperature in the eigenstates of the electromagnetic field operators, using Umezawa's formalism, known as Thermo Field Dynamics, comparing both approaches.

1. Introdução	1
1.1. O Efeito Lamb-Retherford e o Efeito Stark	1
1.2. O Efeito Stark AC	1
1.3. O Efeito Stark DC	1
1.4. O Efeito Stark AC em um sistema de dois níveis	1
2. O Formalismo DDC	13
2.1. O Hamiltoniano	13
2.2. O Método de Perturbação de Segundo Ordem do DDC	13
2.3. O Efeito Stark AC no Formalismo DDC	18
3. Aplicações do Formalismo DDC	28
3.1. O Efeito Stark AC em um sistema de dois níveis	28
4. Incorporação da Temperatura no Formalismo DDC	32
4.1. O Efeito Stark AC em um sistema de dois níveis	32
4.2. O Efeito Stark DC em um sistema de dois níveis	32
5. Conclusões Finais	38
6. O Operador Densidade	34
7. A Aproximação Múltiplo	47

Índice

1	Introdução	1
2	O Desvio Lamb-Retherford	3
2.1	Aspectos Históricos	3
2.2	Cálculo em Primeira Ordem	4
2.3	Cálculo em Segunda Ordem	6
2.4	O Desvio Lamb-Retherford na Cavidade	9
2.4.1	Discussão Preliminar	9
2.4.2	As Equações Ópticas de Bloch	11
3	O Formalismo DDC	13
3.1	Introdução	13
3.2	Radiação Considerada como um Reservoir	14
3.3	Fuunções de Correlação e Susceptibilidades	18
4	Aplicações do Formalismo DDC	25
4.1	O Desvio Lamb-Retherford e o Efeito AC Stark	25
5	Implementação da Temperatura via Thermo Field Dynamics	32
5.1	Introdução	32
5.2	Fuunções de Correlação e Susceptibilidades em TFD	32
6	Considerações Finais	38
A	O Operador Densidade	42
B	A Equação Master	47

C Estados Puros e Mistos em TFD	51
C.1 A Representação de Número	51
C.2 Estados Coerentes	52
C.3 Estados Squeezed	55
C.4 Estados Mistos em TFD	57
D Relações Úteis entre Propagadores	59
Referências	62

Capítulo 1

Introdução

A compreensão dos mecanismos físicos responsáveis pelas correções radiativas para processos de interação de átomos com um campo de radiação, constituem um problema interessante, o qual tem recebido muita atenção [1]. Os resultados quantitativos referentes a tais correções são evidentemente bem estabelecidos, embora, existam controvérsias a respeito de suas interpretações físicas. Um dos objetivos deste trabalho é utilizar um formalismo alternativo que nos permita resolver tais ambigüidades. Diante disso, iniciaremos a presente dissertação fazendo, no Capítulo 2, um breve estudo do desvio Lamb-Retherford, segundo algumas das interpretações existentes.

No Capítulo 3, introduziremos de forma sistemática o formalismo de Dalibard, Dupont-Roc e Cohen-Tannoudji (DDC) [2]. Nesse formalismo um átomo que interage com o campo de radiação é visto como um sistema microscópico \mathcal{S} interagindo com um grande reservoir \mathcal{R} . Podemos então separar dois tipos de processos, aqueles em que \mathcal{R} flutua e polariza \mathcal{S} (efeitos das flutuações do reservoir) e aqueles onde é \mathcal{S} quem polariza \mathcal{R} (efeitos de autointeração). Isto permite identificarmos as contribuições das flutuações do reservoir e da reação da radiação em correções radiativas para um elétron atômico em interação com o campo de radiação. Com base nesse formalismo vamos estudar, no Capítulo 4, o desvio dos níveis de energia de um átomo quando o mesmo está acoplado a um campo de radiação, obtendo assim as contribuições para o desvio Lamb-Retherford e o efeito “AC Stark”.

Este formalismo permite também que tratemos tais fenômenos à temperatura finita e para isso substituímos diretamente, ao final dos cálculos, o número médio

de quanta $\langle n \rangle$ pela distribuição de Bose-Einstein, nas grandezas observáveis pertinentes.

Entretanto, visando incorporar temperatura num estágio anterior, faremos no Capítulo 5 um estudo do formalismo conhecido como Thermo Field Dynamics, proposto por Umezawa [3]. Neste formalismo, a média estatística quântica de um observável num certo ensemble é identificada, em teoria quântica de campos, com o valor esperado do mesmo num vácuo térmico. Neste novo contexto, investigamos alguns propagadores térmicos e ao final procedemos às respectivas identificações com as funções estatísticas obtidas no formalismo DDC.

No Capítulo 6, discutiremos os resultados obtidos, suas conseqüências e as perspectivas futuras. Por uma questão de autoconsistência, reservamos aos Apêndices material complementar o qual pode ser omitido numa primeira leitura.

Capítulo 2

O Desvio Lamb-Retherford

2.1 Aspectos Históricos

Em 1947 as medidas precisas de Lamb e Retherford [4] para a separação dos níveis $2s_{1/2}$ e $2p_{1/2}$ dos átomo de hidrogênio e deutério,

$$\Delta_H = 1057.77 \pm 0.10 \text{ MHz} ,$$

$$\Delta_D = 1059.00 \pm 0.10 \text{ MHz} ,$$

respectivamente, deram grande impulso ao desenvolvimento da eletrodinâmica quântica. Na teoria de Dirac esses níveis de energia coincidem quando correções de ordem superior em teoria de perturbação, devido à interação com o campo eletromagnético, são desprezadas. Tais correções desviam tanto o nível $2s_{1/2}$ quanto o $2p_{1/2}$. Esse efeito é conhecido como o desvio Lamb.

Até então, quando as correções radiativas eram calculadas, o valor obtido para o desvio era infinito. Bethe [5] mostrou que essa dificuldade podia ser contornada através da renormalização da massa do elétron. Um ano depois, Welton [6] deu uma interpretação semiclássica interessante ao fenômeno, atribuindo a origem do desvio Lamb às flutuações da energia de ponto zero do campo eletromagnético, levando a uma estimativa cujo sinal e ordem de grandeza estavam corretos.

Inicialmente, vamos apresentar os argumentos de Welton [7] e Bethe [8], e em seguida, finalizaremos este estudo tratando o desvio Lamb-Retherford numa cavidade.

2.2 Cálculo em Primeira Ordem

Na presença do núcleo atômico, a energia eletrostática efetiva de um elétron é dada pela média

$$\langle eV(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) \rangle = eV(\mathbf{r}) + \frac{e}{2} \frac{\partial^2 V(\mathbf{r})}{\partial r_i \partial r_j} \langle \delta r_i \delta r_j \rangle + \dots, \quad (2.1)$$

onde δr é a flutuação aleatória na sua posição devido ao campo eletromagnético.

Da simetria esférica do problema resulta

$$\langle \delta r_i \delta r_j \rangle = \frac{\delta_{ij}}{3} \langle \delta r^2 \rangle. \quad (2.2)$$

Portanto, a nova contribuição para a Hamiltoniana tem a forma

$$H_{\text{Lamb}} = \frac{1}{6} \langle (\delta\mathbf{r})^2 \rangle \nabla^2 V(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

onde $V(\mathbf{r}) = -(Z\alpha/r)^*$ e, conseqüentemente, de acordo com a lei de Poisson,

$$\nabla^2 V(\mathbf{r}) = 4\pi Z\alpha \delta^{(3)}(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

Nesta descrição simples, tratando a perturbação (2.3) em primeira ordem, somente ondas s são afetadas e o nível $n = a$ é deslocado pela quantidade

$$\begin{aligned} \Delta_a^{(1)} &= \frac{2\pi Z\alpha}{3} \langle (\delta\mathbf{r})^2 \rangle |\psi_a(0)|^2 \\ &= \frac{(2mZ\alpha)^3}{12} \frac{\alpha}{a^3} \langle (\delta\mathbf{r})^2 \rangle. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Na teoria clássica, o elétron oscila no campo flutuante do núcleo de acordo com a equação

$$m\delta\ddot{\mathbf{r}} = e\mathbf{E}, \quad (2.6)$$

de forma que a componente de Fourier \mathbf{E}_ω do campo elétrico contribui com

$$m\delta\mathbf{r}_\omega = -\frac{e}{\omega^2} \mathbf{E}_\omega. \quad (2.7)$$

Assumindo que não há correlação entre os diversos modos, temos

$$\begin{aligned} \langle (\delta\mathbf{r})^2 \rangle &= \int_0^\infty d\omega \langle (\delta\mathbf{r}_\omega)^2 \rangle \\ &= \frac{e^2}{m^2} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega^4} \langle \mathbf{E}_\omega^2 \rangle \end{aligned} \quad (2.8)$$

* Z é o número atômico, α é a constante de estrutura fina e r denota a posição do elétron.

e

$$\langle \mathbf{E}^2 \rangle = \int_0^\infty d\omega \langle \mathbf{E}_\omega^2 \rangle = \frac{1}{L^3} \int d^3x \mathbf{E}^2 . \quad (2.9)$$

Antecipando o tratamento quântico do campo eletromagnético, supomos que este é uma superposição incoerente de ondas planas e lembramos que a energia do vácuo desse campo é a soma das energias de ponto zero dos diferentes modos,

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{1}{2} \int d^3x (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) = \frac{1}{2} \sum_{r=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_r(\mathbf{k}) \\ &= 2L^3 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \omega_{\mathbf{k}}}{2} = L^3 \hbar \int \frac{d\omega}{2\pi^2} \frac{\omega^3}{c^3} . \end{aligned} \quad (2.10)$$

Assim, as equações (2.9) e (2.10) fornecem

$$\langle \mathbf{E}_\omega^2 \rangle = \frac{\hbar}{2\pi^2} \left(\frac{\omega}{c} \right)^3 \quad (2.11)$$

e, portanto,

$$\langle (\delta \mathbf{r})^2 \rangle = \frac{2\alpha \hbar}{\pi m^2 c^3} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} . \quad (2.12)$$

A integral acima é divergente tanto para pequenas quanto para grandes frequências. A divergência no ultravioleta, quando $\omega \rightarrow \infty$, deve-se ao nosso tratamento quântico pouco sofisticado; existe na verdade um corte para distâncias da ordem do comprimento de onda Compton do elétron \hbar/mc , ou seja, frequências $\omega \sim mc^2/\hbar$. Por outro lado, a divergência no infravermelho (para baixas frequências) deve ser sanada através do tratamento do campo eletromagnético na presença de cargas. Os modos de grande comprimento de onda são sensíveis aos estados eletrônicos mais baixos, sugerindo um corte da ordem $\omega \sim c/r_0 = mc^2\alpha/\hbar$, onde r_0 é o raio de Bohr. Utilizando essas aproximações esperamos um valor

$$\langle (\delta \mathbf{r})^2 \rangle \sim \frac{2\alpha \hbar}{\pi m^2 c^3} \log \left(\frac{1}{\alpha} \right) . \quad (2.13)$$

Neste caso, o desvio Lamb vale

$$\Delta_a^{(1)}(l) \sim \frac{4}{3} \frac{mZ^4 \alpha^5 \hbar}{c^3 a^3} \log \left(\frac{1}{\alpha} \right) \delta_{l0} . \quad (2.14)$$

Para o nível $a = 2$ do átomo de hidrogênio o desvio calculado é

$$\Delta_a^{(1)} \sim 660 \text{ MHz} . \quad (2.15)$$

2.3 Cálculo em Segunda Ordem

Vamos agora efetuar um cálculo não relativístico do desvio Lamb em segunda ordem seguindo a mesma linha que Bethe. Os termos responsáveis pelo desvio na energia do estado $|a\rangle$ do átomo de hidrogênio podem ser representados pelo diagrama de auto-energia do elétron (Figura (1)), onde os estados eletrônicos são evidentemente estados ligados. A correção para a energia na aproximação de dipolo é dada por

$$E_a^{(2)} = \frac{e^2}{m^2 c^2} \sum_b \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{2\pi \hbar c^2}{\Omega k c} \right) \frac{|\langle b | \vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_r(\mathbf{k}) | a \rangle|^2}{E_a - E_b - \hbar k c}, \quad (2.16)$$

onde $\vec{p} = (\hbar/i)\nabla$ é o momento do elétron que interage com o campo eletromagnético, cujo vetor de polarização é representado por $\vec{\epsilon}_r$ ($r = 1, 2$).

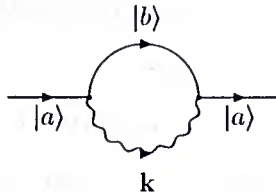


Figura (1)

Os vetores de polarização $\vec{\epsilon}_r(\mathbf{k})$ junto com o vetor unitário na direção \mathbf{k} formam um conjunto ortonormal completo. Sendo \mathbf{p} o autovalor do momento do elétron num autoestado de energia do átomo, temos

$$\begin{aligned} \sum_r |\mathbf{p} \cdot \vec{\epsilon}_r(\mathbf{k})|^2 &= \mathbf{p} \cdot \left(\sum_r \vec{\epsilon}_r(\mathbf{k}) \vec{\epsilon}_r(\mathbf{k}) \right) \cdot \mathbf{p} \\ &= \mathbf{p} \cdot \left(1 - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \right) \cdot \mathbf{p} = p^2 (1 - \cos^2 \theta). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Com isso podemos simplificar a equação (2.16), obtendo

$$E_a^{(2)} = \frac{2}{3\pi} \frac{e^2}{m^2 c^2} \sum_b \int_0^\infty k dk \frac{|\langle b | \mathbf{p} | a \rangle|^2}{E_a - E_b - \hbar k c}. \quad (2.18)$$

Esta expressão é divergente na região do ultravioleta. Entretanto, Bethe argumentou que para um elétron livre a matriz de transição de \vec{p} entre dois estados é diagonal e, neste caso, a expressão acima, para $\hbar k \ll p$, se reduz a

$$\begin{aligned} \Sigma &= \frac{2}{3\pi} \frac{e^2}{m^2 c^2} \int_0^\infty \frac{p^2}{p^2/2m - (\mathbf{p} - \hbar \mathbf{k})^2/2m - \hbar k c} k dk \\ &= -\frac{2}{3\pi} \frac{e^2}{m^2 c^2} \int_0^\infty \frac{p^2}{\hbar k c} k dk, \end{aligned} \quad (2.19)$$

o que pode ser interpretado como a variação da energia cinética do elétron devido à adição da massa eletromagnética a sua massa “nua”. Para um elétron ligado, o quadrado do momento em (2.19) deve ser substituído por seu valor esperado

$$\langle a|p^2|a\rangle = \sum_b |\langle b|\mathbf{p}|a\rangle|^2. \quad (2.20)$$

Assim, a correção resultante para a energia cinética devido à massa eletromagnética deve ser subtraída de (2.18) para se obter o desvio de nível de energia observável

$$E_a^{(2)} = \frac{2}{3\pi} \frac{e^2}{m^2 c^2} \sum_{n'} \int_0^\infty k dk |\langle b|\mathbf{p}|a\rangle|^2 \left[\frac{1}{E_a - E_b - \hbar k c} + \frac{1}{\hbar k c} \right]. \quad (2.21)$$

Esta integral ainda é divergente, mas agora apenas logaritmicamente. Bethe argumentou que numa teoria relativística a integral deveria ser convergente, pois se tentarmos construir um pacote de onda para representar um elétron com energia positiva usando funções de onda relativísticas, os estados de energia negativa não estarão disponíveis, uma vez que estes já se encontram ocupados. Como resultado, existe um limite para o pacote de onda, como se o elétron tivesse um tamanho finito da ordem do seu comprimento de onda Compton. Se tentarmos localizar o pacote de onda numa região do espaço tal que a sua dispersão seja $d \lesssim \hbar/mc$, os estados de energia negativa passam a desempenhar um papel importante e o pacote que representa o estado de uma partícula na teoria de Dirac torna-se oscilante. Este fenômeno é tradicionalmente chamado de “zitterbewegung”.

Na realidade esses argumentos não justificam de maneira completamente satisfatória a eliminação das divergências ultravioleta da teoria. Mesmo para o campo de Dirac quantizado essas divergências aparecem como resultado do produto de funções singulares no mesmo ponto, sendo necessário um processo de renormalização para absorver esses infinitos na redefinição das quantidades físicas. Entretanto, na teoria de espalhamento podemos controlar essas divergências através da construção causal da matriz S através de requisitos físicos, onde a causalidade desempenha papel fundamental [9].

A convergência da integral em (2.21) pode então ser simulada na teoria não relativística truncando-se a integral quando a energia do fóton $\hbar k c$ se torna comparável

a mc^2 , a massa de repouso do elétron. Substituindo o limite superior da integral por mc/\hbar e efetuando a integração obtemos

$$\Delta_a^{(2)} = \frac{2}{3\pi} \frac{e^2}{\hbar c^3 m^2} \sum_b |\langle b|\mathbf{p}|a\rangle|^2 (E_b - E_a) \log \left| \frac{mc^2}{E_b - E_a} \right|, \quad (2.22)$$

onde $E_b - E_a$ pode ser desprezada em comparação a mc^2 . Podemos, com boa aproximação, substituir $E_b - E_a$ no argumento do logaritmo em (2.22) por um valor médio apropriadamente escolhido, pois o logaritmo é uma função que varia lentamente quando o valor do argumento é grande. Assim, o log pode ser removido da soma. Além disso

$$\begin{aligned} \sum_b |\langle b|\mathbf{p}|a\rangle|^2 (E_b - E_a) &= \sum_b \langle a|\vec{p}|b\rangle \langle b|\vec{p}|a\rangle (E_b - E_a) \\ &= \sum_b \langle a|\vec{p}(H_0 - E_a)|b\rangle \langle b|\vec{p}|a\rangle \\ &= \langle a|(\vec{p}H_0 - H_0\vec{p})\cdot\vec{p}|a\rangle, \end{aligned} \quad (2.23)$$

onde H_0 é a Hamiltoniana do átomo de hidrogênio. Como

$$[H_0, \vec{p}] = -\frac{\hbar}{i} \nabla V(\mathbf{r}), \quad (2.24)$$

com $V(\mathbf{r}) = -Ze^2/r$, a equação (2.23) pode ser colocada na forma

$$\begin{aligned} \sum_b |\langle b|\mathbf{p}|a\rangle|^2 (E_b - E_a) &= \langle a|\frac{1}{2}[\vec{p}, [H_0, \vec{p}]]|a\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \langle a|\nabla^2 V(\mathbf{r})|a\rangle = 2\pi Ze^2 \hbar^2 |\psi_a(0)|^2. \end{aligned} \quad (2.25)$$

O resultado final para o desvio Lamb é então

$$\Delta_a^{(2)} = \frac{4}{3} Z \frac{e^4 \hbar}{m^2 c^3} |\psi_a(0)|^2 \log \left| \frac{mc^2}{(E_b - E_a)_{av}} \right|. \quad (2.26)$$

Para estados s

$$|\psi_a(0)|^2 = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{ar_0} \right)^2. \quad (2.27)$$

Bethe calculou numericamente $(E_b - E_a)_{av}$ encontrando o desvio 1040 MHz, em boa concordância com os valores experimentais citados, considerando-se as aproximações feitas. Cálculos mais precisos foram feitos em QED na representação de interação para estados ligados [10], incluindo efeitos de polarização do vácuo (uma revisão detalhada dos resultados teóricos e experimentais mais recentes pode ser encontrada em [11]).

2.4 O Desvio Lamb-Retherford na Cavidade

2.4.1 Discussão Preliminar

Consideremos um átomo de dois níveis interagindo com um campo de radiação eletromagnética segundo a Hamiltoniana

$$H = H_0 + H_I, \quad (2.28)$$

onde H_0 é a soma das Hamiltonianas de cada sistema, e H_I é a Hamiltoniana de acoplamento. Da mecânica quântica [12], sabemos que a função de onda em qualquer instante de tempo pode ser escrita como uma superposição linear da forma

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = C_1(t)\psi_1(\mathbf{r}, t) + C_2\psi_2(\mathbf{r}, t). \quad (2.29)$$

Apesar da mistura dos estados variar com o tempo, exigimos que a função de onda acima seja normalizada em qualquer instante, logo seus coeficientes devem satisfazer o vínculo

$$|C_1(t)|^2 + |C_2(t)|^2 = 1. \quad (2.30)$$

Utilizando a equação de Schrödinger

$$H\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.31)$$

e (2.29) obtemos as seguintes equações para os coeficientes

$$i \frac{d}{dt} C_1 = C_1 H_{11} + C_2 e^{-i\omega_0 t} H_{12}, \quad (2.32)$$

$$i \frac{d}{dt} C_2 = C_1 e^{i\omega_0 t} H_{21} + C_2 H_{22}, \quad (2.33)$$

onde

$$\hbar H_{ij} \doteq \int \psi_i^*(\mathbf{r}) H_I \psi_j(\mathbf{r}) dV \quad (2.34)$$

e $\{i, j\} = 1, 2$. A forma completa da interação entre a radiação eletromagnética e um átomo é algo complicado. Entretanto, se considerarmos um átomo hidrogenóide, que interage com uma onda eletromagnética polarizada, como ilustrado na Figura (2), veremos que a principal contribuição para H_I surge da interação dipolar atômica com o campo elétrico [12]

$$H_I = -\mathbf{P} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) = e\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}_0 \cos(\omega t), \quad (2.35)$$

onde

$$\mathbf{P} = -e\mathbf{D} = -e \sum_{j=1}^Z r_j, \quad (2.36)$$

é o momento de dipolo elétrico total do átomo.

De (2.35) é imediato notarmos que H_I é real e exibe paridade espacial ímpar, logo os integrandos dos elementos H_{ij} são funções espaciais ímpares e, portanto, as integrais quando $i = j$ são nulas, mostrando que os estados atômicos ψ_1 e ψ_2 têm paridade oposta. Contudo, os elementos com $i \neq j$ não são necessariamente nulos e, de acordo com (2.34), satisfazem à relação

$$H_{12} = H_{21}^*. \quad (2.37)$$

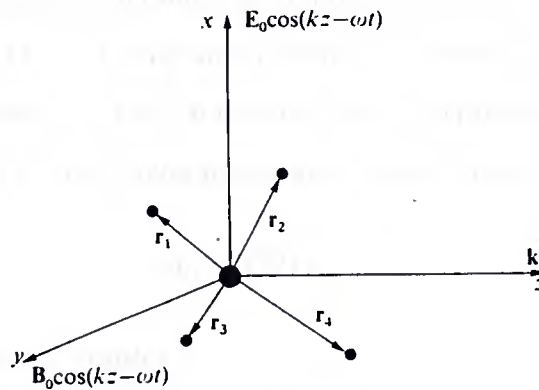


Figura (2): Sistema de coordenadas para o átomo e a onda eletromagnética

Escolhendo \mathbf{E}_0 na direção x positiva, escrevemos

$$H_{12} = \Omega_0 \cos(\omega t) \quad (2.38)$$

onde

$$\Omega_0 = \left(\frac{eE_0}{\hbar} \right) \int \psi_1^* D_x \psi_2 dV \quad (2.39)$$

e D_x é a projeção de \mathbf{D} na direção x .

Substituindo (2.38) em (2.32) e (2.33) chegamos às equações acopladas

$$i \frac{d}{dt} C_1 = C_2 e^{-i\omega_0 t} \Omega_0 \cos(\omega t), \quad (2.40)$$

$$i \frac{d}{dt} C_2 = C_1 e^{i\omega_0 t} \Omega_0^* \cos(\omega t), \quad (2.41)$$

as quais estão em exata concordância com as restrições de só termos um par de estados.

2.4.2 As Equações Ópticas de Bloch

Nos cálculos que se seguem, utilizaremos a aproximação de onda girante [14] e a hipótese de que a radiação incidente é monocromática, com o campo elétrico oscilando com frequência ω . Como nos cálculos de excitações óticas dos átomos a quantidade de interesse é $|C_2(t)|^2$, é conveniente trabalharmos com a matriz densidade (ver Apêndice A), cujos elementos são definidos como

$$\rho_{ij} \doteq C_i(t) C_j^*(t). \quad (2.42)$$

Derivando esta expressão, resulta

$$\frac{d}{dt} \rho_{ij}(t) = C_i(t) \frac{d}{dt} C_j^*(t) + C_j^*(t) \frac{d}{dt} C_i(t). \quad (2.43)$$

Assim, com a ajuda de (2.40) e (2.41) obtemos

$$\frac{d}{dt} \rho_{22} = -\frac{d}{dt} \rho_{11} = -\frac{i}{2} \Omega_0^* e^{i(\omega_0 - \omega)t} \rho_{12} + \frac{i}{2} \Omega_0 e^{-i(\omega_0 - \omega)t} \rho_{21}, \quad (2.44)$$

$$\frac{d}{dt} \rho_{12} = \frac{d}{dt} \rho_{21}^* = \frac{i}{2} \Omega_0 e^{i(\omega_0 - \omega)t} (\rho_{11} - \rho_{22}). \quad (2.45)$$

Estas duas equações são conhecidas como “equações óticas de Bloch”.

Através de métodos usuais, obtemos como solução geral

$$\rho_{ij} = \rho_{ij}^{(1)} + \rho_{ij}^{(2)} e^{i\Omega t} + \rho_{ij}^{(3)} e^{-i\Omega t}, \quad \text{se } i = j, \quad (2.46)$$

ou

$$\rho_{ij} = e^{-i(\omega_0 - \omega)t} [\rho_{ij}^{(1)} + \rho_{ij}^{(2)} e^{i\Omega t} + \rho_{ij}^{(3)} e^{-i\Omega t}], \quad \text{se } i \neq j, \quad (2.47)$$

onde $\rho_{ij}^{(k)}$ ($k = 1, 2, 3$) são constantes determinadas pelas condições iniciais e Ω é definido como

$$\Omega \doteq \left((\omega_0 - \omega)^2 + \frac{1}{2} |\Omega_0|^2 \right)^{1/2}. \quad (2.48)$$

A presença de $|\Omega_0|^2$ na expressão acima, produz desvios nas frequências de acoplamento do sistema. Como $|\Omega_0|$ é proporcional à amplitude do campo elétrico, tais desvios são conhecidos como “efeito Stark dinâmico” ou “AC Stark”, o qual será estudado em detalhe no Capítulo 4.

Retornando à questão de transições entre dois níveis, digamos a e b , podemos escolher as condições iniciais

$$\rho_{bb}(0) = 0, \quad (2.49)$$

$$\rho_{ab}(0) = 0. \quad (2.50)$$

Como resultado, segue que

$$\rho_{bb}(t) = \frac{|\Omega_0|^2}{\Omega^2} \text{sen}^2 \left(\frac{\Omega t}{2} \right), \quad (2.51)$$

$$\rho_{ab}(t) = e^{-i(\omega_0 - \omega)t} \left(\frac{\Omega_0}{\Omega^2} \right) \text{sen} \left(\frac{\Omega t}{2} \right) \left\{ -(\omega_0 - \omega) \text{sen} \left(\frac{\Omega t}{2} \right) + i\Omega \cos \left(\frac{\Omega t}{2} \right) \right\}. \quad (2.52)$$

No caso particular em que $\omega_0 = \omega$ obtemos

$$\rho_{bb}(t) = \text{sen}^2 \left(\frac{1}{2} |\Omega_0| t \right), \quad (2.53)$$

$$\rho_{ab}(t) = \frac{i}{2} \left(\frac{\Omega_0}{|\Omega_0|} \right) \text{sen}(|\Omega_0| t). \quad (2.54)$$

Das expressões (2.30), (2.42) e (2.53), podemos concluir que o átomo oscila simetricamente entre seu estado fundamental e seu estado excitado. Este fenômeno é conhecido como “oscilação de Rabi” e $|\Omega_0|$ é denominado “frequência de Rabi”.

Capítulo 3

O Formalismo DDC

3.1 Introdução

Ao tratarmos um sistema em que um átomo interage com um campo eletromagnético podemos associar às suas interações radiativas dois mecanismos físicos distintos: as flutuações do campo eletromagnético livre e a reação da radiação emitida pelo átomo. O campo livre, denotado por \mathbf{A}_{rf} , que existe mesmo na ausência do átomo, polariza o átomo que, por sua vez, se acopla ao mesmo. Por outro lado, o dipolo atômico gera um campo de radiação, denotado por \mathbf{A}_{sr} , que reage sobre o átomo. De fato, o campo eletromagnético total “pode” ser visto como a soma do campo livre com o campo irradiado pela fonte atômica,

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_{\text{rf}}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}_{\text{sr}}(\mathbf{r}, t) \quad (3.1)$$

os quais são, respectivamente, as soluções homogênea e não homogênea da equação de onda

$$\square \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{j}_A(\mathbf{r}, t) , \quad (3.2)$$

onde $\mathbf{j}_A(\mathbf{r}, t)$ é a corrente eletrônica do átomo.

Os produtos dos operadores atômicos e do campo eletromagnético desempenharão um papel importante na descrição das interações radiativas , pois apesar do operador do campo total \mathbf{A} comutar com os operadores atômicos em qualquer instante, isto não ocorrerá para os operadores parciais \mathbf{A}_{rf} e \mathbf{A}_{sr} . Para um dado processo, poderemos selecionar as contribuições das flutuações do reservóir e da reação da radiação escolhendo a ordem apropriada desses operadores. Por exemplo,

o ordenamento normal dos operadores de campo identifica a contribuição da reação da radiação como a origem dos fenômenos radiativos [15].

No formalismo de Dalibard, Dupont-Roc e Cohen-Tannoudji (DDC) [2] as contribuições individuais da interação de um átomo com \mathbf{A}_{rf} e \mathbf{A}_{sr} possuem valores esperados reais. Isto determina a ordem dos operadores atômicos e de campo dentro do operador de interação, permitindo a separação das componentes que correspondem à flutuação do reservoir e à reação da radiação. O método utiliza a representação de Heisenberg para descrever a evolução dos observáveis físicos, ao invés dos estados quânticos. Nas próximas seções desenvolveremos tal formalismo.

3.2 Radiação Considerada como um Reservoir

Consideremos a Hamiltoniana do sistema formado por um elétron em interação com o campo eletromagnético, escrita na aproximação de dipolo como

$$H = H_s + H_R + V , \quad (3.3)$$

onde

$$H_s = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) \quad (3.4)$$

é a Hamiltoniana do elétron no potencial estático $V_0(\mathbf{r})$,

$$H_R = \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \hbar\omega \left(a_{\mathbf{k}\epsilon}^\dagger a_{\mathbf{k}\epsilon} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.5)$$

a Hamiltoniana do campo de radiação transversal e

$$V = -\frac{e}{m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}) + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2(\mathbf{0}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{k_M}{\pi} \quad (3.6)$$

a Hamiltoniana do acoplamento entre o elétron e o campo, incluindo a energia do campo longitudinal do elétron. k_M é o vetor de onda correspondente à frequência de corte, que deve ser grande em comparação com a frequência de ressonância característica do elétron ligado.

Na representação de Heisenberg, a taxa de variação de um observável atômico G é dada por

$$\frac{d}{dt} G = \frac{i}{\hbar} [H_s, G] + \frac{i}{\hbar} [V, G] . \quad (3.7)$$

Somente o primeiro termo em (3.6) contribui para a evolução dinâmica de G .

O termo correspondente em (3.7) pode ser escrito como

$$\left(\frac{dG}{dt}\right)_{\text{coupling}} = -\frac{ie}{\hbar m}[\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}), G] = e\mathbf{N} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}), \quad (3.8)$$

onde \mathbf{N} é o operador atômico

$$\mathbf{N} = -\frac{i}{\hbar m}[\mathbf{p}, G]. \quad (3.9)$$

Combinando (3.7) e (3.8) obtemos

$$\frac{d}{dt}G(t) = \frac{i}{\hbar}[H_s(t), G(t)] + e\mathbf{N} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}, t). \quad (3.10)$$

Nessa expressão, como dito anteriormente, podemos separar o campo eletromagnético total como a soma do campo livre com o campo irradiado pelo elétron. Diante disso, é fácil notar que se o operador $\mathbf{N}(t)$ não se reduz a zero ou a uma constante, como no caso em que G coincide, respectivamente, com \mathbf{r} e \mathbf{p} , imediatamente nos deparamos com um problema de ordenamento. Como $\mathbf{N}(t)$ e $\mathbf{A}(\mathbf{0}, t)$ comutam, podemos escrever o seu produto em qualquer ordem. Genericamente podemos escrever o último termo em (3.10) como

$$e\lambda\mathbf{N}(t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}, t) + e(1 - \lambda)\mathbf{A}(\mathbf{0}, t) \cdot \mathbf{N}(t), \quad (3.11)$$

com λ arbitrário. Escrevendo \mathbf{A} de acordo com (3.1) resulta

$$\left(\frac{dG}{dt}\right)_{\text{coupling}} = \left(\frac{dG}{dt}\right)_{\text{rf}} + \left(\frac{dG}{dt}\right)_{\text{sr}}, \quad (3.12)$$

onde as duas taxas

$$\left(\frac{dG}{dt}\right)_{\text{rf}} = e\lambda\mathbf{N}(t) \cdot \mathbf{A}_{\text{rf}}(\mathbf{0}, t) + e(1 - \lambda)\mathbf{A}_{\text{rf}}(\mathbf{0}, t) \cdot \mathbf{N}(t), \quad (3.13)$$

$$\left(\frac{dG}{dt}\right)_{\text{sr}} = e\lambda\mathbf{N}(t) \cdot \mathbf{A}_{\text{sr}}(\mathbf{0}, t) + e(1 - \lambda)\mathbf{A}_{\text{sr}}(\mathbf{0}, t) \cdot \mathbf{N}(t) \quad (3.14)$$

dependem de λ , pois \mathbf{A}_{rf} e \mathbf{A}_{sr} não comutam separadamente com $\mathbf{N}(t)$. Portanto, a separação (3.13) não é univocamente definida, como discutimos anteriormente.

Esta indeterminação pode ser removida lembrando que G , sendo um observável físico, deve ser representado por um operador Hermitiano, assim como a sua taxa

de variação. A filosofia é separar essa taxa em duas taxas envolvendo \mathbf{A}_{rf} e \mathbf{A}_{sr} , respectivamente, que possuem separadamente uma interpretação física bem definida em termos das flutuações do reservóir e reação da radiação. Isto requer que (3.13) e (3.14) tenham separadamente significado físico e, conseqüentemente, sejam Hermitianos. Esta condição determina λ , que deve ser igual a $1/2$. Assim, a separação de dG/dt é única e dada por

$$\left(\frac{dG}{dt}\right)_{\text{rf}} = e\frac{1}{2}[\mathbf{N}(t)\cdot\mathbf{A}_{\text{rf}}(\mathbf{0}, t) + \mathbf{A}_{\text{rf}}(\mathbf{0}, t)\cdot\mathbf{N}(t)] , \quad (3.15)$$

$$\left(\frac{dG}{dt}\right)_{\text{sr}} = e\frac{1}{2}[\mathbf{N}(t)\cdot\mathbf{A}_{\text{sr}}(\mathbf{0}, t) + \mathbf{A}_{\text{sr}}(\mathbf{0}, t)\cdot\mathbf{N}(t)] . \quad (3.16)$$

Podemos tomar a média das taxas (3.15) e (3.16) num estado do campo. Entretanto, ao efetuarmos, por exemplo, a média do produto $e\mathbf{A}_{\text{rf}}(\mathbf{0}, t)\cdot\mathbf{N}(t)$, devemos lembrar que estes dois operadores estão correlacionados, pois o operador $\mathbf{N}(t)$ depende do campo livre que perturbou sua evolução do instante inicial t_0 até t . Conseqüentemente, antes de tomarmos a média nos campos devemos calcular, até uma dada ordem em e , $\mathbf{N}(t)$ em função dos operadores atômicos e de campo não perturbados. Em segunda ordem, quando inserimos a expressão perturbativa de $\mathbf{N}(t)$, contendo no máximo um operador de campo tomado num certo instante t' tal que $t_0 < t' < t$, no produto $e\mathbf{A}_{\text{rf}}(\mathbf{0}, t)\cdot\mathbf{N}(t)$, e tomamos a média nos campos, obtemos médias num determinado instante $\langle\mathbf{A}_{\text{rf}}(\mathbf{0}, t)\rangle$ que são iguais a zero e médias em dois instantes diferentes tais como

$$\langle A_{i\text{rf}}(\mathbf{0}, t)A_{j\text{rf}}(\mathbf{0}, t') \rangle .$$

No caso mais geral a taxa de variação de um observável físico G devido ao acoplamento com o campo pode sempre ser escrito como

$$\left(\frac{dG}{dt}\right)_{\text{coupling}} = \sum_i e(A_i N_i + A_i^\dagger N_i^\dagger) , \quad (3.17)$$

onde A_i são operadores de campo e N_i operadores atômicos que comutam, mas não necessariamente Hermitianos. Neste caso, antes de substituirmos A_i por $A_{i\text{rf}} + A_{i\text{sr}}$ a taxa total deve ser expressa em termos de quantidades físicas de campo e de partícula.

Podemos estender o tratamento acima para um sistema \mathcal{S} interagindo com um grande reservoir \mathcal{R} , no sentido em que \mathcal{R} possui muitos graus de liberdade de forma que o tempo de correlação τ_c entre os observáveis de \mathcal{R} é muito curto, permitindo um tratamento perturbativo do efeito do acoplamento \mathcal{S} - \mathcal{R} . Partindo da Hamiltoniana do sistema \mathcal{S} - \mathcal{R} ,

$$H = H_s + H_R + V, \quad (3.18)$$

onde

$$V = - \sum_i R_i S_i \quad (3.19)$$

é a Hamiltoniana de interação, e R_i e S_i são observáveis Hermitianos de \mathcal{R} e \mathcal{S} , escrevemos as equações de Heisenberg para os observáveis R_i do reservoir que aparecem em (3.19). A solução dessa equação pode ser escrita como a soma da parte livre R_{if} e da parte de fonte R_{is} devido à presença de \mathcal{S} ,

$$R_i = R_{if} + R_{is}. \quad (3.20)$$

Inserimos (3.20) no último termo da equação de Heisenberg para um observável arbitrário G do sistema

$$\frac{dG}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[G, H_s] + \frac{1}{i\hbar}[G, - \sum_i R_i S_i] \quad (3.21)$$

para identificarmos as contribuições das flutuações do reservoir e da autoreação. O problema da ordem entre os observáveis R_i e

$$N_i = - \frac{1}{i\hbar}[G, S_i] \quad (3.22)$$

no último termo de (3.21) pode ser resolvido através das mesmas considerações físicas que impõem a ordem completamente simétrica. Assim,

$$\left(\frac{dG}{dt}\right)_{\text{rf}} = \frac{1}{2} \sum_i (N_i R_{if} + R_{if} N_i), \quad (3.23)$$

$$\left(\frac{dG}{dt}\right)_{\text{sr}} = \frac{1}{2} \sum_i (N_i R_{is} + R_{is} N_i). \quad (3.24)$$

Como no caso discutido anteriormente, para obtermos a média de $\left(\frac{dG}{dt}\right)_{\text{rf}}$ e $\left(\frac{dG}{dt}\right)_{\text{sr}}$ devemos efetuar um cálculo perturbativo, levando a médias de operadores

em dois instantes diferentes, as quais podem ser expressas em termos de funções de correlação e susceptibilidades. A seguir vamos discutir o significado físico dessas funções estatísticas, que estão associadas aos coeficientes da equação de evolução do operador densidade do sistema global.

3.3 Funções de Correlação e Susceptibilidades

Consideremos a Hamiltoniana do sistema global $\mathcal{S}+\mathcal{R}$, escrita na forma (3.3), onde H_s é a Hamiltoniana de \mathcal{S} , H_R a Hamiltoniana do reservoir \mathcal{R} e V a interação entre \mathcal{S} e \mathcal{R} . O operador densidade do sistema global obedece à equação de evolução

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho(t)] , \quad (3.25)$$

ou, na representação de interação com respeito a H_s+H_R ,

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(t)] , \quad (3.26)$$

$$\tilde{\rho}(t) = e^{i(H_A+H_R)t/\hbar} \rho(t) e^{-i(H_A+H_R)t/\hbar} , \quad (3.27)$$

$$\tilde{V}(t) = e^{i(H_A+H_R)t/\hbar} V e^{-i(H_A+H_R)t/\hbar} . \quad (3.28)$$

Nas duas últimas equações escrevemos H_A no lugar de H_s , antecipando o caso em que $\mathcal{S} \equiv \mathcal{A}$ é um átomo em interação com o campo eletromagnético que, por sua vez, pode ser considerado como um reservoir, pois se trata de um sistema com infinitos graus de liberdade.

Seja

$$\tilde{\sigma}_R(t) = \text{Tr}_A \tilde{\rho}(t) \quad (3.29)$$

o operador densidade de \mathcal{R} obtido a partir de $\tilde{\rho}(t)$ tomando-se o traço parcial sobre \mathcal{A} . Como \mathcal{R} é um reservoir, $\tilde{\sigma}_R(t)$ pode, em primeira aproximação, ser considerado constante na representação de interação:

$$\tilde{\sigma}_R(t) = \tilde{\sigma}_R(0) = \sigma_R . \quad (3.30)$$

Além disso, assumimos que o reservoir esteja num estado estacionário, ou seja, que σ_R comuta com H_R ,

$$[\sigma_R, H_R] = 0 . \quad (3.31)$$

Em outras palavras, σ_R não possui elementos não diagonais entre autoestados de H_R com diferentes autovalores e, portanto, pode ser considerado como uma mistura estatística de autoestados $|\mu\rangle$ de H_R ,

$$H_R|\mu\rangle = E_\mu|\mu\rangle, \quad (3.32)$$

com peso p_μ :

$$\sigma_R = \sum_\mu p_\mu |\mu\rangle \langle \mu|. \quad (3.33)$$

Para o caso particular em que \mathcal{R} está em equilíbrio termodinâmico, à temperatura T , p_μ é dado por

$$p_\mu = \frac{\exp[E_\mu/k_B T]}{\sum_\mu \exp[E_\mu/k_B T]} \quad (3.34)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann.

Como vimos, podemos sem perda de generalidade tomar a interação V entre \mathcal{A} e \mathcal{R} como um produto de um observável A de \mathcal{A} com um observável R de \mathcal{R} ,

$$V = -AR, \quad (3.35)$$

que, na representação de interação, fornece

$$\tilde{V}(t) = -\tilde{A}(t)\tilde{R}(t), \quad (3.36)$$

com

$$\tilde{A}(t) = e^{iH_A t/\hbar} A e^{-iH_A t/\hbar}, \quad (3.37)$$

$$\tilde{R}(t) = e^{iH_R t/\hbar} R e^{-iH_R t/\hbar}, \quad (3.38)$$

pois os observáveis de \mathcal{A} comutam com os de \mathcal{R} . Assumiremos que o valor médio de R no estado σ_R é zero, ou seja,

$$Tr[\sigma_R R] = Tr[\sigma_R \tilde{R}(t)] = 0. \quad (3.39)$$

O valor médio de $\tilde{R}(t)$ em σ_R é uma média num dado instante. Consideremos a média em dois instantes

$$g(t', t'') = Tr[\sigma_R \tilde{R}(t') \tilde{R}(t'')] \quad (3.40)$$

que representa o valor médio num estado σ_R de um produto de dois observáveis $\tilde{R}(t')$ e $\tilde{R}(t'')$ tomados em dois instantes diferentes t' e t'' . A função $g(t', t'')$ depende somente do intervalo $\tau = t' - t''$:

$$\begin{aligned} Tr_R [\sigma_R \tilde{R}(t') \tilde{R}(t'')] &= Tr_R [\sigma_R e^{iH_R t'/\hbar} R e^{-iH_R(t'-t'')/\hbar} R e^{-iH_R t''/\hbar}] \\ &= Tr_R [\sigma_R \tilde{R}(\tau) \tilde{R}(0)] = g(\tau) . \end{aligned} \quad (3.41)$$

Substituindo a expressão (3.33) para σ_R na equação acima obtemos

$$\begin{aligned} g(\tau) &= Tr \sum_{\mu} \{p_{\mu} |\mu\rangle \langle \mu| \tilde{R}(\tau) \tilde{R}(0)\} \\ &= \sum_{\mu} p_{\mu} \langle \mu| \tilde{R}(\tau) \tilde{R}(0) | \mu \rangle \\ &= \sum_{\mu} \sum_{\nu} p_{\mu} |R_{\mu\nu}|^2 e^{i\omega_{\mu\nu}\tau} , \end{aligned} \quad (3.42)$$

onde

$$\begin{aligned} R_{\mu\nu} &= \langle \mu| R | \nu \rangle , \\ \omega_{\mu\nu} &= \omega_{\mu} - \omega_{\nu} , \\ \omega_{\mu} &= E_{\mu}/\hbar . \end{aligned} \quad (3.43)$$

A expressão (3.42) é uma superposição de exponenciais oscilando em diferentes frequências de Bohr $\omega_{\mu\nu}$ de \mathcal{R} . Como \mathcal{R} é um reservóir, este possui um ensemble de níveis de energia muito denso e, conseqüentemente, um espectro quasi-contínuo de frequências de Bohr, de forma que as exponenciais em (3.42) interferem destrutivamente quando τ se torna suficientemente grande. Mais precisamente, assumimos que a função $g(\tau)$ tende rapidamente a zero quando τ cresce, chamando de τ_c a ordem de magnitude da largura em τ de $g(\tau)$.

As hipóteses feitas sobre \mathcal{R} equivalem a assumir que \mathcal{R} está num um estado estacionário e exerce sobre \mathcal{A} uma “força” flutuando em torno de um valor médio nulo com um tempo de correlação curto.

A função $g(\tau)$ definida em (3.41) não é real, embora R seja Hermitiano, pois, em geral, $\tilde{R}(\tau)$ e $\tilde{R}(0)$ não comutam. Para separar a parte real e a parte imaginária de $g(\tau)$ escrevemos

$$g(\tau) = \frac{1}{2} \langle \tilde{R}(\tau) \tilde{R}(0) + \tilde{R}(0) \tilde{R}(\tau) \rangle_R + \frac{i}{2} \langle [\tilde{R}(\tau), \tilde{R}(0)/i] \rangle_R , \quad (3.44)$$

onde \langle , \rangle_R indica a média sobre o reservóir no estado definido por σ_R . O primeiro termo em (3.44) é uma função de correlação simétrica e o segundo está relacionado com a susceptibilidade linear do reservóir.

A função de correlação simétrica do observável R ,

$$C_R(\tau) = \frac{1}{2} \langle \tilde{R}(\tau) \tilde{R}(0) + \tilde{R}(0) \tilde{R}(\tau) \rangle_R , \quad (3.45)$$

é real e tende à função de correlação ordinária no limite clássico. Essa função fornece uma descrição física da dinâmica das flutuações do observável R no estado σ_R . Se R fosse uma função clássica aleatória de frequência ω_0 ,

$$R(t) = R_0 e^{-i(\omega_0 t + \varphi)} + c.c. , \quad (3.46)$$

e a amplitude R_0 e a fase φ fossem variáveis aleatórias independentes, φ sendo uniformemente distribuída entre 0 e 2π , então a função de correlação de R seria

$$C_R(\tau) = \langle R_0 \rangle^2 e^{-i\omega\tau} + c.c. . \quad (3.47)$$

A expressão explícita para a função de correlação definida por (3.45) é dada pela parte real da expressão (3.42) para $g(\tau)$,

$$C_R(\tau) = \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} |R_{\mu\nu}|^2 \cos(\omega_{\mu\nu}\tau) . \quad (3.48)$$

Esta função aparece na forma de uma soma de expressões do mesmo tipo que (3.47) correspondendo a diferentes frequências de Bohr envolvidas na evolução de R .

A transformada de Fourier $\hat{C}_R(\omega)$ de $C_R(\tau)$ é definida por

$$C_R(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega \hat{C}_R(\omega) e^{-i\omega\tau} , \quad (3.49)$$

sendo igual a

$$\hat{C}_R(\omega) = \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} \pi |R_{\mu\nu}|^2 [\delta(\omega + \omega_{\mu\nu}) + \delta(\omega - \omega_{\mu\nu})] . \quad (3.50)$$

Uma outra função estatística, a susceptibilidade linear, fornece a resposta do reservóir a uma perturbação externa. Se o reservóir está sujeito a uma perturbação

$$V(t) = -R\lambda(t) , \quad (3.51)$$

onde $\lambda(t)$ é uma função clássica, seu estado se tornará ligeiramente diferente do estado inicial estacionário σ_R . Em teoria de perturbação, podemos determinar a influência dessa perturbação sobre o valor médio de um observável, por exemplo, R , cujo valor médio no estado estacionário inicial é considerado nulo. Em primeira ordem em λ , o valor médio de R no instante t é

$$\langle R \rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_R(\tau) \lambda(t - \tau) d\tau \quad (3.52)$$

onde a susceptibilidade linear $\chi_R(\tau)$ do reservóir é dada por

$$\chi_R(\tau) = \frac{i}{\hbar} \theta(\tau) \langle [\tilde{R}(0), \tilde{R}(-\tau)] \rangle_R . \quad (3.53)$$

O valor médio é tomado, como anteriormente, no estado σ_R de \mathcal{R} e $\theta(\tau)$ é a função degrau. Comparando (3.53) com (3.44) resulta

$$\chi_R(\tau) = \frac{2}{\hbar} \theta(\tau) \text{Im } g(-\tau) , \quad (3.54)$$

on, ntilizando (3.42),

$$\chi_R(\tau) = -\frac{2}{\hbar} \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} |R_{\mu\nu}|^2 \theta(\tau) \sin \omega_{\mu\nu} \tau . \quad (3.55)$$

A transformada de Fourier de $\chi_R(\tau)$, definida como em (3.49), é dada por

$$\hat{\chi}_R(\omega) = \hat{\chi}'_R(\omega) + i\hat{\chi}''_R(\omega) , \quad (3.56)$$

onde

$$\hat{\chi}'_R(\omega) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} |R_{\mu\nu}|^2 \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mu\nu} + \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mu\nu} - \omega} \right] , \quad (3.57)$$

$$\hat{\chi}''_R(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} |R_{\mu\nu}|^2 [\delta(\omega_{\mu\nu} + \omega) - \delta(\omega_{\mu\nu} - \omega)] . \quad (3.58)$$

Na expressão (3.57) \mathcal{P} denota o valor principal. Essa expressão caracteriza a resposta em fase, enquanto que (3.58) a resposta em quadratura na frequência ω .

Na representação de Schrödinger, a equação master que descreve a evolução do operador densidade expandido na base de autoestados de H_A possui a estrutura do sistema de equações diferenciais lineares (ver Apêndice B)

$$\frac{d}{dt} \sigma_{ab}(t) = -i\omega_{ab} \sigma_{ab}(t) + \sum_{c,d}^{(\text{sec})} \mathcal{R}_{abcd} \sigma_{cd}(t) , \quad (3.59)$$

cujos coeficientes são independentes do tempo. Nesta equação, $\sum_{c,d}^{(\text{sec})}$ indica que a soma é restrita aos estados c, d , em decorrência da chamada aproximação secular $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \ll 1/\Delta t$, com

$$\tau_c \ll \Delta t \ll T_R, \quad (3.60)$$

sendo T_R o tempo de evolução de $\tilde{\sigma}$.

No caso em que a frequência de Bohr associada à coerência σ_{ab} entre dois autoestados distintos de \mathcal{A} é não degenerada, o único termo secular é aquele que acopla σ_{ab} a si própria, de forma que a equação (3.59) se reduz a

$$\frac{d}{dt}\sigma_{ab} = -i\omega_{ab}\sigma_{ab} + \mathcal{R}_{abab}\sigma_{ab}. \quad (3.61)$$

O coeficiente \mathcal{R}_{abab} é dado por

$$\mathcal{R}_{abab} = -\Gamma_{ab} - i\Delta_{ab}, \quad (3.62)$$

onde Δ_{ab} e Γ_{ab} são quantidades reais, com

$$\Delta_{ab} = \Delta_a - \Delta_b, \quad (3.63)$$

$$\Delta_a = \frac{1}{\hbar}\mathcal{P} \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} \sum_n \frac{|\langle \nu, n | V | \mu, a \rangle|^2}{E_{\mu} + E_a - E_{\nu} - E_n} \quad (3.64)$$

e uma expressão análoga para Δ_b .

A quantidade $\hbar\Delta_{ab}$ representa um desvio, em segunda ordem em V , da frequência ω_{ab} devido à interação entre \mathcal{A} e \mathcal{R} . Na realidade, $\hbar\Delta_a$ em (3.64) é um desvio do estado $|\mu, a\rangle$ do sistema global $\mathcal{A}+\mathcal{R}$, ponderado pela probabilidade de ocupação p_{μ} do nível μ do reservóir e somado sobre μ e, portanto, pode ser considerado o desvio de energia médio do estado $|a\rangle$ de \mathcal{A} . Por sua vez, a quantidade Γ_{ab} representa a taxa de amortecimento da coerência σ_{ab} devido à interação entre \mathcal{A} e \mathcal{R} .

Em (3.64) o elemento de matriz $\langle \mu, a | V | \nu, n \rangle$ pode ser fatorado numa parte relativa a \mathcal{A} e outra relativa a \mathcal{R} :

$$\Delta_a = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} |\langle \mu | R | \nu \rangle|^2 \left[\sum_n |\langle a | A | n \rangle|^2 \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mu\nu} + \omega_{an}} \right]. \quad (3.65)$$

A fração $1/(\omega_{\mu\nu} + \omega_{an})$ também pode ser reescrita como um produto de funções relativas a cada um dos dois sistemas,

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mu\nu} + \omega_{an}} &= \frac{1}{2} \int d\omega \times \\ &\times \left\{ \left(\mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mu\nu} + \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mu\nu} - \omega} \right) [\lambda \delta(\omega + \omega_{an}) + (1 - \lambda) \delta(\omega - \omega_{an})] + \right. \\ &\left. + \left(\mathcal{P} \frac{1}{\omega_{an} + \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{an} - \omega} \right) [\lambda \delta(\omega + \omega_{\mu\nu}) + (1 - \lambda) \delta(\omega - \omega_{\mu\nu})] \right\}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Substituindo (3.66) em (3.65) obtemos, para $\lambda = 1/2$,

$$\Delta_a = \Delta_a^{\text{fr}} + \Delta_a^{\text{rr}}, \quad (3.67)$$

onde

$$\hbar \Delta_a^{\text{fr}} = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{\chi}'_{Aa}(\omega) \tilde{C}_R(\omega), \quad (3.68)$$

$$\hbar \Delta_a^{\text{rr}} = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{\chi}'_R(\omega) \tilde{C}_{Aa}(\omega). \quad (3.69)$$

As equações (3.68) e (3.69) correspondem ao ordenamento simétrico dos operadores dos sistemas \mathcal{A} e \mathcal{R} , como discutido anteriormente. Nas duas últimas expressões $\tilde{C}_{Aa}(\omega)$ e $\tilde{\chi}_{Aa}(\omega)$ são, respectivamente, a função de correlação simétrica e a susceptibilidade linear do observável A do sistema \mathcal{A} no estado $|a\rangle$, dadas por expressões análogas a (3.50) e (3.56) e onde somente $p_a = 1$ é não nula.

Nessas expressões $\tilde{C}_R(\omega)d\omega/2\pi$ representa a densidade espectral para as flutuações do observável R do reservóir no intervalo de frequências $d\omega$. A quantidade $\tilde{\chi}'_{Aa}(\omega)\tilde{C}_R(\omega)d\omega/2\pi$ é a energia de polarização do sistema \mathcal{A} no estado $|a\rangle$ perturbado por essas flutuações. Portanto, $\hbar\Delta_a^{\text{fr}}$ representa a energia de polarização de \mathcal{A} no estado $|a\rangle$ induzida pelas flutuações da variável R do reservóir.

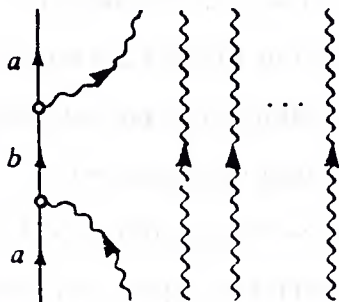
Em (3.69) os papéis de \mathcal{A} e \mathcal{R} estão invertidos. Δ_a^{rr} representa a energia de polarização do reservóir pelo sistema \mathcal{A} . O movimento do observável A no estado $|a\rangle$, caracterizado por \tilde{C}_{Aa} , perturba o equilíbrio do reservóir, e a interação de A com a polarização criada em \mathcal{R} , proporcional a $\tilde{\chi}'_R$, dá origem ao desvio de energia $\hbar\Delta_a^{\text{rr}}$. Esse desvio portanto representa o efeito de reação do reservóir sobre \mathcal{A} .

Capítulo 4

Aplicações do Formalismo DDC

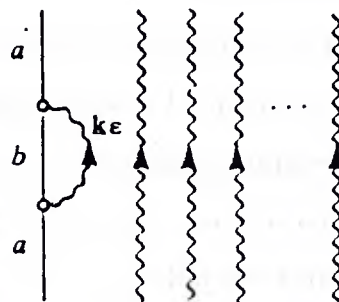
4.1 O Desvio Lamb-Retherford e o Efeito AC Stark

Neste capítulo será discutido o desvio Lamb induzido pela presença de fótons. Suponhamos que vários fótons incidentes estejam inicialmente presentes e consideremos os processos nos quais um átomo absorve um desses fótons e em seguida o reemite (Figura 3 α) ou emite de maneira estimulada um fóton idêntico a um dos fótons incidentes e então o reabsorve (Figura 3 β), retornando nesses dois casos a um estado atômico final $|a\rangle$ idêntico ao estado inicial. O estado intermediário $|b\rangle$ é arbitrário. As contribuições para esses processos são provenientes do primeiro e segundo termos na Hamiltoniana de interação (3.6).



N photons $k\epsilon$

Figura 3 α



N photons $k\epsilon$

Figura 3 β

Em muitos casos a amplitude de probabilidade do sistema permanecer no mesmo estado $|a; Nk\epsilon, \text{outros f\u00f3tons incidentes}\rangle$ ap\u00f3s um intervalo de tempo T \u00e9, em boa aproxima\u00e7\u00e3o, uma exponencial oscilat\u00f3ria e uma exponencial amortecida:

$$\langle \varphi_i | \tilde{U}(T) | \varphi_i \rangle = e^{-i[\Delta - i(\Gamma/2)]T}, \quad (4.1)$$

onde $\tilde{U}(T)$ \u00e9 o operador evolu\u00e7\u00e3o na representa\u00e7\u00e3o de intera\u00e7\u00e3o, entre o instante inicial $t_i = -T/2$ e o instante final $t_f = T/2$. Tal situa\u00e7\u00e3o pode ocorrer nos casos em que a radia\u00e7\u00e3o incidente \u00e9 monocrom\u00e1tica por\u00e9m de baixa intensidade, ou est\u00e1 suficientemente longe da resson\u00e2ncia, ou ainda, possui grande largura espectral.

A taxa de amortecimento Γ do estado $|\varphi_i\rangle$ representa a probabilidade por unidade de tempo do sistema deixar o estado global $|\varphi_i\rangle$, absorvendo um f\u00f3ton incidente ou emitindo de maneira estimulada um f\u00f3ton id\u00eantico a um dos f\u00f3tons incidentes. Do ponto de vista do \u00e1tomo, $\hbar\Delta$ pode ser considerado o desvio do estado $|a\rangle$ causado pelos f\u00f3tons incidentes. Tal efeito \u00e9 \u00e0s vezes chamado de “efeito Stark din\u00e2mico”, ou AC Stark, em analogia ao efeito Stark ordin\u00e1rio, que est\u00e1 associado \u00e0 energia de polariza\u00e7\u00e3o do \u00e1tomo num campo el\u00e9trico est\u00e1tico. No presente caso, a energia $\hbar\Delta$ pode ser considerada a energia de polariza\u00e7\u00e3o do \u00e1tomo num campo el\u00e9trico com freq\u00fc\u00eancia diferente de zero, um campo ao qual o \u00e1tomo “responde” com sua polarizabilidade “din\u00e2mica”.

Do ponto de vista do campo de radia\u00e7\u00e3o, o campo espalhado pelo \u00e1tomo sofre um desvio de fase em rela\u00e7\u00e3o ao campo incidente, de forma que o campo total sofre uma varia\u00e7\u00e3o tanto na sua amplitude (efeito devido a Γ) quanto na sua fase (efeito devido a Δ). Tal varia\u00e7\u00e3o de fase, somada sobre todos os \u00e1tomos de um meio, \u00e9 a origem do \u00edndice de refra\u00e7\u00e3o desse meio. A compara\u00e7\u00e3o entre as corre\u00e7\u00f5es radiativas induzidas por um campo incidente e as corre\u00e7\u00f5es radiativas espont\u00e2neas permite identificarmos nestas \u00faltimas as contribui\u00e7\u00f5es da parte que pode ser atribu\u00edda \u00e0s flutua\u00e7\u00f5es do v\u00e1cuo, que t\u00eam a mesma forma das corre\u00e7\u00f5es radiativas que seriam induzidas por um campo flutuante com densidade espectral $\hbar\omega/2$ por modo, e da parte que pode ser atribu\u00edda \u00e0 intera\u00e7\u00e3o do el\u00e9tron com seu pr\u00f3prio campo (a rea\u00e7\u00e3o da radia\u00e7\u00e3o).

Suponhamos então que \mathcal{A} seja um átomo fixo na origem $\mathbf{0}$ de um sistema de coordenadas e \mathcal{R} um campo de radiação homogêneo e isotrópico de amplo espectro. O operador densidade da radiação é, de acordo com (3.33), uma mistura estatística de autoestados $|n_1 \dots n_k \dots\rangle$ de H_R , representando n_1 fótons no modo 1, ..., n_k fótons no modo k ..., com um peso $p(n_1 \dots n_k \dots)$,

$$\sigma_R = \sum_{\{n_k\}} p(n_1 \dots n_k \dots) |n_1 \dots n_k \dots\rangle \langle n_1 \dots n_k \dots| . \quad (4.2)$$

O número médio de fótons no modo k ,

$$\langle n_k \rangle = \sum_{\{n_k\}} n_k p(n_1 \dots n_k \dots) , \quad (4.3)$$

depende somente de ω_k , podendo ser representado por $\langle n(\omega_k) \rangle$, e está relacionado com a densidade de energia do campo de radiação

$$u(\omega) = \frac{\hbar \omega^3 \langle n(\omega) \rangle}{\pi^2 c^3} . \quad (4.4)$$

Para simplificar o problema, vamos considerar um modelo para o átomo que consiste de um único elétron movendo-se num potencial esfericamente simétrico em torno da origem, dentro de um volume de pequenas dimensões em comparação com os comprimentos de onda da radiação incidente. Assim, podemos fazer a aproximação de grandes comprimentos de onda para todos os modos considerados, cujas frequências são inferiores à frequência de corte ω_M . Nesse caso, a Hamiltoniana do sistema global é dada por (3.3) e a Hamiltoniana de interação (3.6) entre o átomo e o campo reduz-se à expressão*

$$V = - \sum_i \left(\frac{e}{m} p_i \right) A_i(\mathbf{0}) , \quad (4.5)$$

de acordo com (3.20). O acoplamento acima não possui a forma simples $V = -AR$ e sim de uma soma de acoplamentos desse gênero. Entretanto, como o sistema é isotrópico, a taxa de variação da matriz densidade σ_A é uma soma das taxas que correspondem a cada uma das componentes.

*Na aproximação de grandes comprimentos de onda o termo proporcional a \mathbf{A}^2 dá origem à energia cinética vibracional do elétron na onda incidente.

As expressões (3.50) para $\hat{C}_R(\omega)$ e (3.56) para $\hat{\chi}_R(\omega)$ possuem a mesma forma

$$S_{\pm}(\omega) = \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} |R_{\mu\nu}|^2 f^{\pm}(\omega_{\mu\nu}, \omega), \quad (4.6)$$

onde $f^{\pm}(\omega_{\mu\nu}, \omega)$ é uma função de uma dada paridade \pm com respeito a $\omega_{\mu\nu}$: + para \hat{C} e - para $\hat{\chi}$. Utilizando uma notação mais precisa para (4.6), obtemos

$$\begin{aligned} S_i^{\pm}(\omega) &= \sum_{\{n'\}} p(n_1, \dots, n', \dots) \times \\ &\times \sum_j [|\langle \dots, n_j, \dots | A_{ij}(\mathbf{0}) | \dots, n_j + 1, \dots \rangle|^2 f^{\pm}(-\omega_j, \omega) + \\ &+ |\langle \dots, n_j, \dots | A_{ij}(\mathbf{0}) | \dots, n_j - 1, \dots \rangle|^2 f^{\pm}(\omega_j, \omega)]. \end{aligned} \quad (4.7)$$

onde j representa um dado modo (\mathbf{k}, r) e

$$A_{ij}(\mathbf{0}) = \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3 \omega_j} \right) \mathbf{e}_{ij} [a_j + a_j^{\dagger}]. \quad (4.8)$$

O elemento de matrix em (4.7) é igual a

$$|\langle \dots, n_j, \dots | A_{ij} | \dots, n_j \pm 1, \dots \rangle|^2 = \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_j L^3} \mathbf{e}_{ij}^2 \left(n_j + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right), \quad (4.9)$$

de modo que

$$S_i^{\pm}(\omega) = \sum_j \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_j L^3} \mathbf{e}_{ij}^2 [\pm \langle n_j + 1 \rangle + \langle n_j \rangle] f^{\pm}(\omega_j, \omega). \quad (4.10)$$

A soma sobre os modos pode ser substituída por uma soma sobre as polarizações e uma integral em \mathbf{k}^{\dagger} , cuja parte angular pode ser calculada explicitamente uma vez que $\langle n_j \rangle$ depende somente de ω_j , assim

$$\begin{aligned} S_i^{\pm}(\omega) &= \int d^3\mathbf{k} \left(\frac{\hbar}{(2\pi)2\varepsilon_0 L^3 \omega'} \right) \sum_{\mathbf{e} \perp \mathbf{k}} \mathbf{e}_i^2 [\pm \langle n(\omega') + 1 \rangle + \langle n(\omega') \rangle] f^{\pm}(\omega', \omega) \\ &= \int_0^{\omega_M} d\omega' \left(\frac{\hbar \omega'}{(2\pi)^3 2\varepsilon_0 c^3} \right) [\pm \langle n(\omega') + 1 \rangle + \langle n(\omega') \rangle] f^{\pm}(\omega', \omega) \times \\ &\times \int d\Omega \sum_{\mathbf{e} \perp \mathbf{k}} \mathbf{e}_i^2. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Usando

$$\sum_{\mathbf{e} \perp \mathbf{k}} \mathbf{e}_i^2 = \delta_{ii} - \frac{k_i k_i}{k^2} = 1 - \cos^2(\theta), \quad (4.12)$$

[†]Note que $|\mathbf{k}| = k = \omega/c$

obtemos

$$S_i^\pm(\omega) = \int_0^{\omega_M} d\omega' \left(\frac{\hbar\omega'}{6\pi^2\varepsilon_0c^3} \right) [\pm\langle n(\omega') + 1 \rangle + \langle n(\omega') \rangle] f^\pm(\omega', \omega) \quad (4.13)$$

Vale notar que considerando o produto de duas componentes diferentes do campo em (4.7), digamos x e y , a identidade (4.12) torna-se

$$\sum_{\mathbf{e} \perp \mathbf{k}} \mathbf{e}_x \mathbf{e}_y = -\frac{k_x k_y}{k^2}, \quad (4.14)$$

portanto, devido à paridade do integrando, concluímos que tais contribuições são, de fato, nulas.

Escolhendo $i = x$ em (4.13), obtemos as expressões resultantes para a função de correlação e as susceptibilidades da componente x do campo:

$$\begin{aligned} \hat{C}_R^{xx}(\omega) &= \frac{1}{3\pi\varepsilon_0c^3} \int_0^{\omega_M} d\omega' \hbar\omega' (\langle n(\omega') \rangle + 1/2) [\delta(\omega' - \omega) + \delta(\omega' + \omega)] \\ &= \frac{1}{3\pi\varepsilon_0c^3} \hbar|\omega| \langle n(|\omega|) + 1/2 \rangle \end{aligned} \quad (4.15)$$

$$\hat{\chi}'_{R^{xx}}(\omega) = \frac{1}{6\pi^2\varepsilon_0c^3} \int_0^{\omega_M} d\omega' \omega' \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega' + \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega' - \omega} \right] \quad (4.16)$$

$$\begin{aligned} \hat{\chi}''_{R^{xx}}(\omega) &= \frac{-1}{6\pi\varepsilon_0c^3} \int_0^{\omega_M} d\omega' \omega' [\delta(\omega' + \omega) - \delta(\omega' - \omega)] \\ &= \frac{1}{6\pi\varepsilon_0c^3} \omega. \end{aligned} \quad (4.17)$$

As expressões para a função de correlação da variável atômica (ep_x/m) e a susceptibilidade correspondente, quando o átomo se encontra no estado $|a\rangle$, são obtidas de forma análoga

$$\hat{C}_{Aa}^{xx}(\omega) = \sum_b \frac{e^2}{m^2} |\langle a|p_x|b\rangle|^2 \pi [\delta(\omega_{ab} + \omega) + \delta(\omega_{ab} - \omega)] \quad (4.18)$$

$$\hat{\chi}'_{Aa^{xx}}(\omega) = \sum_b \frac{-e^2}{\hbar m^2} |\langle a|p_x|b\rangle|^2 \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega_{ab} + \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{ab} - \omega} \right] \quad (4.19)$$

$$\hat{\chi}''_{Aa^{xx}}(\omega) = \sum_b \frac{e^2}{\hbar m^2} |\langle a|p_x|b\rangle|^2 \pi [\delta(\omega_{ab} + \omega) - \delta(\omega_{ab} - \omega)]. \quad (4.20)$$

Para calcularmos o efeito das flutuações do campo de radiação sobre os níveis de energia a devemos calcular explicitamente a expressão (3.68) para o acoplamento do átomo com as componentes $A_x(\mathbf{0})$ do potencial vetor. Utilizando as expressões (4.15) e (4.19), obtemos

$$\begin{aligned} \hbar\Delta_a^{\text{fr}} &= \frac{e^2}{6\pi^2\varepsilon_0 m^2 c^3} \sum_b |\langle a|\mathbf{p}|b\rangle|^2 \times \\ &\times \int_0^{\omega_M} d\omega' \omega' \langle n(\omega') + \frac{1}{2} \rangle \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega_{ab} + \omega'} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{ab} - \omega'} \right]. \end{aligned} \quad (4.21)$$

O desvio do nível de energia devido às flutuações do campo aparece como uma soma do efeito Δ_a^{fr} dos fótons incidentes, proporcional a $\langle n(\omega) \rangle$, e do efeito das flutuações do vácuo Δ_a^{fv} , proporcional a “ $\hbar\omega/2$ por modo”. Esta última pode ser manipulada utilizando as relações

$$\int_0^{\omega_M} \omega' d\omega' \mathcal{P} \frac{1}{\omega' \pm \omega_0} = \omega_M \mp \omega_0 \ln \frac{\omega_M}{\omega_0} + O\left(\frac{\omega_0}{\omega_M}\right) \quad (4.22)$$

$$\int_0^{\omega_M} \omega' d\omega' \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega' + \omega_0} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_0 - \omega'} \right] = -2\omega_0 \ln \frac{\omega_M}{\omega_0} \quad (4.23)$$

assim, obtemos

$$\hbar\Delta_a^{\text{fv}} = \frac{e^2}{6\pi^2\varepsilon_0 m^2 c^3} \sum_b |\langle a|\mathbf{p}|b\rangle|^2 (-\omega_{ab}) \ln \frac{\omega_M}{|\omega_{ab}|}, \quad (4.24)$$

ou ainda

$$\hbar\Delta_a^{\text{fv}} = \frac{\alpha}{3\pi} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \left(\ln \frac{\omega_M}{cK_a} \right) \langle a | \frac{e^2}{\varepsilon_0} \delta(\mathbf{r}) | a \rangle \quad (4.25)$$

onde α é constante de estrutura fina e $\hbar cK$ é a energia de excitação média atômica. Este é o desvio Lamb-Retherford discutido no Capítulo 2 (seção 2.3) a menos de fatores multiplicativos referentes ao sistema de unidades. A presente abordagem mostra claramente sua origem física: as flutuações do vácuo do campo. A presença de \hbar em (4.25) mostra o caráter quântico deste fenômeno, o mesmo para as flutuações que o causam.

A parte Δ_a^{fr} proporcional a $\langle n(\omega') \rangle$ corresponde a correções radiativas estimuladas, como mencionado na seção 2.4.2 do Capítulo 2. Para efeito de simplicidade, vamos supor que $\langle n(\omega') \rangle$ é apreciável somente em torno da frequência ω_L suficientemente próxima a ω_{ab} , de forma que apenas um nível particular contribui para a soma sobre todos os níveis b de (4.21). O desvio correspondente do nível a vale

$$\hbar\Delta_a^{\text{fr}} \sim \frac{e^2}{6\pi^2\varepsilon_0 m^2 c^3} |\langle a|\mathbf{p}|b\rangle|^2 \frac{2\omega_{ab}\omega_L}{\omega_{ab}^2 - \omega_L^2} \int d\omega' \langle n(\omega') \rangle. \quad (4.26)$$

Esta quantidade pode ser expressa em função do valor quadrático médio do campo de radiação elétrico. De fato, $\langle n(\omega) \rangle d\omega$ está relacionado com a densidade de energia

no mesmo intervalo de frequências $u(\omega)d\omega$ através da equação (4.4) e a integral em ω' de $u(\omega')$ é simplesmente a densidade de energia da radiação

$$\int d\omega' u(\omega') = \frac{\varepsilon_0}{2} \langle E_{\perp}^2 + c^2 B^2 \rangle = \varepsilon_0 \langle E_{\perp}^2 \rangle, \quad (4.27)$$

para um campo de radiação estacionário livre. Utilizando a relação

$$\langle a | \mathbf{p} | b \rangle = m\omega_{ab} \langle a | \mathbf{r} | b \rangle \quad (4.28)$$

e a aproximação $|\omega_{ab}| \sim \omega_L$, temos

$$\hbar \Delta'_a \text{ fr} = \frac{\omega_{ab}}{\hbar(\omega_{ab}^2 - \omega_L^2)} e^2 \frac{|\langle a | \mathbf{r} | b \rangle|^2}{3} \langle E_{\perp}^2 \rangle. \quad (4.29)$$

Esta expressão, onde aparece a energia de polarização do átomo pelo campo elétrico, justifica o nome de efeito Stark dinâmico dado a $\Delta'_a \text{ fr}$.

Capítulo 5

Implementação da Temperatura via Thermo Field Dynamics

5.1 Introdução

Nos dois capítulos precedentes, vimos que o formalismo DDC nos permite tratar de forma mais simples e clara problemas associados processos radiativos, em particular aqueles envolvendo a interação entre o campo eletromagnético e um átomo.

No equilíbrio térmico, podemos implementar temperatura diretamente ao formalismo DDC usando o princípio de equipartição de energia. Isto é feito inserindo a distribuição de Bose-Einstein nas expressões envolvendo o número médio de quanta, $\langle n \rangle$.

Ao invés disso, podemos estudar a teoria à temperatura finita utilizando o formalismo conhecido como Thermo Field Dynamics (TFD). A idéia central é obter, em princípio, as mesmas funções de correlação e susceptibilidades do formalismo DDC, porém incorporando a temperatura num estágio anterior. Para isto, desenvolveremos um estudo dos propagadores térmicos do campo eletromagnético.

5.2 Funções de Correlação e Susceptibilidades em TFD

No formalismo DDC trabalhamos com as componentes espaciais do potencial eletromagnético e utilizamos a expansão

$$A_i(t) = A_i^{(+)}(t) + A_i^{(-)}(t), \quad (5.1)$$

onde $A_i^{(+)}(t)$ e $A_i^{(-)}(t)$ são as componentes de frequência positiva e negativa, definidas respectivamente como

$$A_i^{(+)}(t) = \sum_{\mathbf{k}, r} \alpha_{\mathbf{k}} \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^r e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t}, \quad (5.2)$$

$$A_i^{(-)}(t) = \sum_{\mathbf{k}, r} \alpha_{\mathbf{k}} \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^{r\dagger} e^{i\omega_{\mathbf{k}} t} \quad (5.3)$$

com

$$\alpha_{\mathbf{k}} = \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3 \omega_{\mathbf{k}}} \right)^{1/2}. \quad (5.4)$$

Em TFD dobramos o número de graus de liberdade dinâmicos inserindo o campo “tilde” conjugado de $A_i(t)$ [3] [16]. Chamando $A_i(t)$ de $\phi_i(t)$ e aplicando a notação de “dubleto térmico” [16] [17], obtemos

$$\Phi_i(t) = \begin{pmatrix} \phi_i(t) \\ \tilde{\phi}_i(t) \end{pmatrix} \quad \bar{\Phi}_i(t) = (\phi_i(t), -\tilde{\phi}_i(t)) \quad (5.5)$$

onde $(-)$ denota transposto e

$$\begin{aligned} \phi_i(t) &= \sum_{\mathbf{k}, r} \alpha_{\mathbf{k}} \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}}^r e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} + a_{\mathbf{k}}^{r\dagger} e^{i\omega_{\mathbf{k}} t}) \\ &= \phi_i^{(+)}(t) + \phi_i^{(-)}(t), \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_i(t) &= \sum_{\mathbf{k}, r} \alpha_{\mathbf{k}} \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) (\tilde{a}_{\mathbf{k}}^r e^{i\omega_{\mathbf{k}} t} + \tilde{a}_{\mathbf{k}}^{r\dagger} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t}) \\ &= \tilde{\phi}_i^{(+)}(t) + \tilde{\phi}_i^{(-)}(t). \end{aligned} \quad (5.7)$$

Por construção [16] os dois campos, ϕ_i e $\tilde{\phi}_i$, são independentes e seus operadores satisfazem à álgebra

$$[a_{\mathbf{k}}^r, a_{\mathbf{k}'}^{s\dagger}] = [\tilde{a}_{\mathbf{k}}^r, \tilde{a}_{\mathbf{k}'}^{s\dagger}] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{r, s}. \quad (5.8)$$

À “temperatura zero” o estado de vácuo é dado pelo produto direto $|0\rangle_{\phi} \otimes |0\rangle_{\tilde{\phi}} \doteq |0\rangle$, de modo que, usando (5.8), obtemos as condições

$$\begin{aligned} \phi_i^{(+)} |0\rangle &= 0, \\ \tilde{\phi}_i^{(+)} |0\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Com o intuito de encontrarmos os “propagadores térmicos” associados às funções estatísticas do formalismo DDC, caculemos o comutador

$$[\Phi_i(t'), \bar{\Phi}_j(t'')]^{\mu\nu} = \Delta_{ij}^{\mu\nu} \quad (5.10)$$

onde $\mu, \nu = \{1, 2\}$ e $i, j = \{x, y, z\}$. As componentes anti-diagonais desse comutador são identicamente nulas quando calculamos o valor esperado do mesmo no estado $|0\rangle$. A componente $\mu = \nu = 1$ pode ser escrita como sendo

$$\Delta_{ij}^{11} = \Delta_{ij}^{11(+)} + \Delta_{ij}^{11(-)} \quad (5.11)$$

onde

$$\Delta_{ij}^{11(+)}(t' - t'') \doteq [\phi_i^{(+)}(t'), \phi_j^{(-)}(t'')], \quad (5.12)$$

$$\Delta_{ij}^{11(-)}(t' - t'') \doteq [\phi_i^{(-)}(t'), \phi_j^{(+)}(t'')]. \quad (5.13)$$

Calculando esses comutadores explicitamente obtemos

$$\Delta_{ij}^{11(+)}(\tau) = \sum_{\mathbf{k}, r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) e^{-i\omega_{\mathbf{k}}\tau}, \quad (5.14)$$

$$\Delta_{ij}^{11(-)}(\tau) = - \sum_{\mathbf{k}, r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) e^{i\omega_{\mathbf{k}}\tau}, \quad (5.15)$$

onde $\tau = t' - t''$ e (5.8) foi usado. De posse desses resultados, definimos dois funcionais:

$$\begin{aligned} \Delta_{ij(ret)}^{11}(\tau) &\doteq \theta(\tau)\Delta_{ij}^{11(+)}(\tau) + \theta(\tau)\Delta_{ij}^{11(-)}(\tau) \\ &= \Delta_{ij(ret)}^{11(+)}(\tau) + \Delta_{ij(ret)}^{11(-)}(\tau), \end{aligned} \quad (5.16)$$

e

$$\Delta_{ij(1)}^{11}(\tau) \doteq \Delta_{ij}^{11(+)}(\tau) - \Delta_{ij}^{11(-)}(\tau). \quad (5.17)$$

A transformada de Fourier de (5.16) é obtida utilizando a identidade

$$\theta(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \int \frac{d\lambda}{\lambda - i\epsilon} e^{i\lambda\tau}, \quad \epsilon \rightarrow 0. \quad (5.18)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \Delta_{ij(ret)}^{11(+)}(\tau) &= \frac{1}{2\pi i} \int \frac{d\lambda}{\lambda - i\epsilon} \sum_{\mathbf{k}, r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) e^{i(\omega_{\mathbf{k}} - \lambda)\tau} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int d\omega \sum_{\mathbf{k}, r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) e^{-i\omega\tau} \left(\frac{i}{\omega - \omega_{\mathbf{k}} + i\epsilon} \right). \end{aligned} \quad (5.19)$$

e, portanto,

$$\Delta_{ij}^{11}{}_{(ret)}^{(+)}(\omega) = \sum_{\mathbf{k},r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) \frac{i}{\omega - \omega_{\mathbf{k}} + i\epsilon}. \quad (5.20)$$

Procedendo de forma análoga, obtemos

$$\Delta_{ij}^{11}{}_{(ret)}^{(-)}(\omega) = \sum_{\mathbf{k},r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) \frac{-i}{\omega + \omega_{\mathbf{k}} + i\epsilon}. \quad (5.21)$$

Juntando (5.20) e (5.21) resulta

$$\Delta_{ij}^{11}{}_{(ret)}(\omega) = \sum_{\mathbf{k},r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) \left[\left(\frac{i}{\omega - \omega_{\mathbf{k}} + i\epsilon} \right) - \left(\frac{i}{\omega + \omega_{\mathbf{k}} + i\epsilon} \right) \right]. \quad (5.22)$$

A transformada de Fourier para (5.17) é definida como

$$\Delta_{ij(1)}^{11}(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega \Delta_{ij(1)}^{11}(\omega) e^{-i\omega\tau}, \quad (5.23)$$

de onde segue que

$$\begin{aligned} \Delta_{ij(1)}^{11}(\omega) &= \int d\tau \Delta_{ij(1)}^{11}(\tau) e^{i\omega\tau} \\ &= \sum_{\mathbf{k},r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) \pi [\delta(\omega + \omega_{\mathbf{k}}) + \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}})]. \end{aligned} \quad (5.24)$$

O procedimento adotado pode ser estendido à componente $\mu = \nu = 2$. O resultado é

$$\Delta_{ij}^{22}{}_{(ret)}(\omega) = \sum_{\mathbf{k},r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) \left[\left(\frac{i}{\omega - \omega_{\mathbf{k}} - i\epsilon} \right) - \left(\frac{i}{\omega + \omega_{\mathbf{k}} - i\epsilon} \right) \right], \quad (5.25)$$

$$\Delta_{ij(1)}^{22}(\omega) = - \sum_{\mathbf{k},r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) \pi [\delta(\omega + \omega_{\mathbf{k}}) + \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}})]. \quad (5.26)$$

Escrevendo (5.22) e (5.25) numa notação mais compacta obtemos

$$\Delta_{ij}{}_{(ret)}(\omega) = \sum_{\mathbf{k},r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) \left\{ \frac{i}{k_0 - \omega_{\mathbf{k}} + i\tau_3\epsilon} - \frac{i}{k_0 + \omega_{\mathbf{k}} + i\tau_3\epsilon} \right\}, \quad (5.27)$$

e, da mesma forma, escrevemos (5.24) e (5.26) como

$$\Delta_{ij(1)}(\omega) = - \sum_{\mathbf{k},r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) \pi \tau_3 [\delta(\omega + \omega_{\mathbf{k}}) + \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}})], \quad (5.28)$$

onde

$$\tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.29)$$

Em TFD, o propagador à “temperatura zero” está relacionado àquele calculado no vácuo térmico através de uma transformação de Bogoliubov [18],

$$\Delta_{ij}^{\mu\nu\beta}(\omega) = \{B_{\mathbf{k}}^{-1}(\beta) \Delta_{ij}(\text{ret})(\omega) B_{\mathbf{k}}\}^{\mu\nu}, \quad (5.30)$$

$$\Delta_{ij}^{\mu\nu\beta}(\omega) = \{B_{\mathbf{k}}^{-1}(\beta) \Delta_{ij}(\text{1})(\omega) B_{\mathbf{k}}\}^{\mu\nu}, \quad (5.31)$$

onde $B_{\mathbf{k}}(\beta)$ é dada por

$$B_{\mathbf{k}}(\beta) = (1 - n_{\mathbf{k}})^{1/2} \begin{pmatrix} 1 & -f_{\mathbf{k}}^{\alpha} \\ -f_{\mathbf{k}}^{1-\alpha} & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.32)$$

Para o caso em que estamos interessados, $\alpha = 1/2$, $f_{\mathbf{k}} = \exp[-\hbar\omega_{\mathbf{k}}\beta]$ e

$$n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{f_{\mathbf{k}}^{-1} - 1} = \frac{1}{e^{\hbar\omega_{\mathbf{k}}\beta} - 1} \quad (5.33)$$

(ver Apêndice C).

Calculando explicitamente a componente $\mu = \nu = 1$ de (5.30) encontramos

$$\begin{aligned} \Delta_{ij}^{11\beta}(\omega) = & -i \sum_{\mathbf{k},r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) \left\{ \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}} - \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}} + \omega} + \right. \\ & \left. + i \pi [\delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega) - \delta(\omega_{\mathbf{k}} + \omega)] (1 + 2n(\omega_{\mathbf{k}})) \right\}, \end{aligned} \quad (5.34)$$

e para (5.31)

$$\Delta_{ij}^{11\beta}(\omega) = \sum_{\mathbf{k},r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) \pi [\delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}}) + \delta(\omega + \omega_{\mathbf{k}})] (1 + 2n(\omega_{\mathbf{k}})). \quad (5.35)$$

Neste momento, definimos as funções de correlação e susceptibilidade térmicas como sendo

$$C_{ij}^{\beta}(\omega) \doteq \Delta_{ij}^{11\beta}(\omega), \quad (5.36)$$

$$\chi_{ij}^{\beta}(\omega) \doteq \frac{i}{\hbar} \Delta_{ij}^{11\beta}(\omega). \quad (5.37)$$

A susceptibilidade (5.37), pode ainda ser escrita como

$$\chi_{ij}^{\beta}(\omega) = \chi'_{ij}{}^{\beta}(\omega) + i \chi''_{ij}{}^{\beta}(\omega) \quad (5.38)$$

onde

$$\chi'_{ij}{}^\beta(\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) \left(\mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}} - \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}} + \omega} \right), \quad (5.39)$$

$$\chi''_{ij}{}^\beta(\omega) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, r} \alpha_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{e}_i^r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^r(\mathbf{k}) \pi (1 + 2n(\omega_{\mathbf{k}})) [\delta(\omega_{\mathbf{k}} + \omega) - \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega)]. \quad (5.40)$$

Escolhendo $i = j = x$ e procedendo como no formalismo DDC, onde substituímos as somatorias sobre os modos por uma soma sobre as polarizações e uma integral em \mathbf{k} , obtemos

$$\begin{aligned} C_{xx}^\beta(\omega) &= \frac{1}{3\pi\epsilon_0 c^3} \int_0^{\omega_M} d\omega' \hbar\omega' (n(\omega') + 1/2) [\delta(\omega' - \omega) + \delta(\omega' + \omega)] \\ &= \frac{1}{3\pi\epsilon_0 c^3} \hbar|\omega| (n(|\omega|) + 1/2) \end{aligned} \quad (5.41)$$

$$\chi'_{xx}{}^\beta(\omega) = \frac{1}{6\pi\epsilon_0 c^3} \int_0^{\omega_M} d\omega' \omega' \left(\mathcal{P} \frac{1}{\omega' - \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega' + \omega} \right) \quad (5.42)$$

$$\begin{aligned} \chi''_{xx}{}^\beta(\omega) &= \frac{-1}{6\pi\epsilon_0 c^3} \int_0^{\omega_M} d\omega' \omega' (2n(\omega') + 1) [\delta(\omega' + \omega) - \delta(\omega' - \omega)] \\ &= \frac{1}{3\pi\epsilon_0 c^3} \omega (n(|\omega|) + 1/2). \end{aligned} \quad (5.43)$$

Essas novas expressões para as funções de correlação e susceptibilidades podem agora ser diretamente implementados ao formalismo DDC*. Elas irão substituir as expressões (4.15), (4.16) e (4.17), respectivamente.

A aplicação nos cálculos relativos ao desvio Lamb-Retherford e ao efeito AC Stark, continuam sendo idênticas àquelas desenvolvidas no Capítulo 4, pois as expressões lá utilizadas são iguais às obtidas no presente contexto. Entretanto, as expressões (4.17) e (5.43), diferem entre si por um fator aditivo proporcional ao número médio de quanta, $\langle n(|\omega|) \rangle$. Essa questão será discutida com maior detalhe no próximo Capítulo.

*Note que $n(|\omega|) \equiv \langle n(|\omega|) \rangle \equiv$ distribuição de Bose-Einstein.

Capítulo 6

Considerações Finais

Ao longo do presente estudo pudemos constatar que o formalismo DDC, quando aplicado a problemas envolvendo a interação de um sistema microscópico \mathcal{A} com um grande reservóir \mathcal{R} , possibilita remover a aparente indeterminação na separação das contribuições relativas à flutuação do vácuo e à reação da radiação.

No Capítulo 4, aplicamos tal formalismo ao caso de um elétron atômico num campo de radiação e calculamos o desvio Lamb-Retherford e o efeito AC Stark. Vimos que, além dos resultados quantitativos, os quais puderam ser comparados com os resultados do Capítulo 2, obtivemos uma interpretação física clara quanto à origem de tais fenômenos: o desvio Lamb-Retherford está associado às flutuações do vácuo do campo de radiação, enquanto que o efeito AC Stark advém da presença dos fótons incidentes.

Para tratarmos tais fenômenos quando o sistema se encontra em equilíbrio termodinâmico, no formalismo DDC substituímos o número médio de quanta $\langle n \rangle$ que aparece na função estatística (4.15) pela distribuição de Bose Einstein. Entretanto, esse procedimento não leva em conta, considerações físicas essenciais como, por exemplo, o fato de que o estado de vácuo do sistema em equilíbrio térmico deve ser modificado, como discutido na seção C.2 do Apêndice C.

Nesse sentido, desenvolvemos um tratamento mais rigoroso no Capítulo 5 onde tais considerações foram levadas em conta, no contexto da TFD. Assim, recorrendo à técnicas da teoria quântica de campos, investigamos os propagadores térmicos associados ao campo eletromagnético e identificamos as funções estatísticas do formalismo DDC. Em TFD a temperatura já está presente nos autoestados do operador

número do campo. De fato, este último não obedece a mesma dinâmica do campo original e, nesse caso, o espaço de Fock dos *estados assintóticos* do campo eletromagnético deve ser construído levando-se em conta as correlações entre o reservoir \mathcal{R} e o reservoir *imagem* $\tilde{\mathcal{R}}$ [19].

Em eletrodinâmica quântica nos deparamos com situação semelhante. A construção consistente dos autoestados de partícula deve levar em conta o potencial Coulombiano de longo alcance, que modifica a dinâmica desses estados na região assintótica [20].

No equilíbrio termodinâmico, se confrontarmos os resultados do Capítulo 5 com aqueles obtidos no Capítulo 4, vemos que apenas a parte dissipativa das susceptibilidades, i.e. as expressões (4.17) e (5.43), diferem entre si. Isso não invalida os resultados referentes ao desvio Lamb-Retherford e ao efeito AC Stark já calculados. No entanto, devemos lembrar que a função $g(\tau)$, a partir da qual construímos as funções estatísticas, foi definida em termos dos autoestados do campo *livre*, dando origem à expressão (4.17), a qual não depende do número médio de fótons.

Essa diferença passa a desempenhar um papel físico importante se, por exemplo, estivermos interessados nas trocas de energia entre \mathcal{A} e \mathcal{R} . Para analisarmos essa questão, consideremos a taxa de variação média da energia atômica quando o sistema se encontra inicialmente no estado a ,

$$\frac{d}{dt}\langle H_A \rangle_a = \sum_b (E_b - E_a)\Gamma_{a \rightarrow b}, \quad (6.1)$$

onde $\Gamma_{a \rightarrow b}$ representa a taxa de transição entre os níveis a e b produzida pela interação com o reservoir. Esta expressão pode ser escrita usando as funções estatísticas obtidas no Capítulo 4,

$$\frac{d}{dt}\langle H_A \rangle_a = \dot{Q}^{\text{fr}} + \dot{Q}^{\text{rr}} \quad (6.2)$$

onde

$$\dot{Q}^{\text{fr}} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega \hat{C}_R(\omega) \hat{\chi}_{Aa}''(\omega), \quad (6.3)$$

$$\dot{Q}^{\text{rr}} = - \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega \hat{\chi}_R''(\omega) \hat{C}_{Aa}(\omega). \quad (6.4)$$

A expressão (6.3) está associada à absorção de energia pelo sistema microscópico quando este é perturbado pela flutuações do reservoir. Já (6.4) descreve o amortecimento do movimento atômico causado pelo reservoir.

Utilizando as epressões (4.15), (4.20) e (6.3) e levando em conta a soma relativa às componentes x, y, z , colocamos \dot{Q}^{fr} na forma

$$\dot{Q}^{\text{fr}} = \dot{Q}^{\text{fr}'} + \dot{Q}^{\text{fv}} \quad (6.5)$$

com

$$\dot{Q}^{\text{fr}'} = \sum_b (E_b - E_a) \Gamma_{ab}^{sp} \langle n(|\omega_{ab}|) \rangle, \quad (6.6)$$

$$\dot{Q}^{\text{fv}} = \sum_b (E_b - E_a) \frac{\Gamma_{ab}^{sp}}{2}, \quad (6.7)$$

e onde

$$\Gamma_{ab}^{sp} = \frac{e^2 |\langle a|\mathbf{p}|b \rangle|^2 |\omega_{ab}|}{3\pi\epsilon_0 \hbar m^2 c^3} \quad (6.8)$$

é a taxa de emissão espontânea relativa à transição entre os níveis a e b .

Assim como uma perturbação aleatória clássica, as flutuações do campo de radiação transferem as populações do estado a para os níveis de maior ou menor energia b . De (6.6), vemos que o campo de radiação incidente contribui para o processo com um fator proporcional à $\langle n(|\omega_{ab}|) \rangle$ por modo, e de (6.7), vemos que as flutuações do vácuo contribuem com um fator proporcional a $1/2$.

A quantidade \dot{Q}^{rr} , pode ser calculada da mesma forma a partir de (4.17), (4.18) e (6.4). Como resultado,

$$\dot{Q}^{\text{rr}} = \frac{-1}{6\pi\epsilon_0 c^3} \sum_b \frac{e^2}{m^2} |\langle a|\mathbf{p}|b \rangle|^2 \omega_{ab}^2 \quad (6.9)$$

$$= \sum_b -|E_b - E_a| \frac{\Gamma_{ab}^{sp}}{2}. \quad (6.10)$$

Considerando $E_a < E_b$ segue que $|E_b - E_a| = (E_a - E_b)$ e

$$\dot{Q}^{\text{rr}} + \dot{Q}^{\text{fv}} = 0. \quad (6.11)$$

No caso em que o sistema se encontra em equilíbrio termodinâmico à temperatura T , obteremos, a partir da substituição de (6.5) e (6.10) em (6.2), que

$$\frac{d}{dt} \langle H_A \rangle_a \neq 0. \quad (6.12)$$

Em contrapartida, se utilizarmos as expressões (5.41) e (5.43) ao invés de (4.15) e (4.17) obteremos, após algumas manipulações,

$$\dot{Q}_\beta^{\text{fr}} = \sum_b (E_b - E_a) \Gamma_{ab}^{\text{sp}} [\langle n(|\omega_{ab}|) \rangle + 1/2] \quad (6.13)$$

e

$$\dot{Q}_\beta^{\text{rr}} = - \sum_b (E_b - E_a) \Gamma_{ab}^{\text{sp}} [\langle n(|\omega_{ab}|) \rangle + 1/2], \quad (6.14)$$

de modo que

$$\frac{d}{dt} \langle H_A \rangle_a = 0. \quad (6.15)$$

Este resultado mostra que, no equilíbrio termodinâmico à temperatura T , a estabilidade do sistema atômico é mantida, como deveríamos esperar. Note que se $T = 0$, esta estabilidade continua sendo mantida pois os efeitos da reação da radiação, $\dot{Q}_\beta^{\text{rr}}$ (segundo termo de (6.14)), são cancelados pela flutuação do vácuo, $\dot{Q}_\beta^{\text{fv}}$ (segundo termo de (6.13)).

Diante desses resultados, concluímos que um tratamento mais cuidadoso, levando em conta as discussões anteriores é, de fato, necessário à temperatura finita. Neste sentido, dentre as perspectivas futuras, estão a construção geral da equação master na base dos autoestados mistos da TFD e o estudo de outros fenômenos em óptica quântica. Um outro problema de interesse é o desvio dos níveis de Landau para um gás de elétrons em interação com um campo de radiação térmica, na presença de um campo magnético.

Apêndice A

O Operador Densidade

Quando efetuamos a quantização do campo eletromagnético no gauge de Coulomb e obtemos uma representação apropriada para seus respectivos operadores, vemos que seus autoestados podem tanto serem descritos através dos estados de número do oscilador harmônico quântico como através de estados coerentes, onde este último é construído a partir de uma dada combinação linear dos estados de número [12]. De fato, a necessidade de se introduzir os estados coerentes na descrição dos estados do campo eletromagnético advém da eficiência dos mesmos em gerarem resultados apropriados, por exemplo, para o valor esperado do operador campo elétrico, o que não ocorre com a descrição em termos dos estados de número.

Existem, porém, modos de excitação do campo eletromagnético que não são expressíveis em termos de uma dada superposição linear dos estados de número e seu tratamento requer uma generalização mais ampla da teoria. Alguns paralelos podem ser traçados entre as descrições clássica e quântica de um feixe de luz. Assim, enquanto o campo elétrico de uma onda clássica estável é especificado por uma amplitude e fase bem definidas, o campo elétrico de um feixe de luz oriundo de uma fonte caótica pode somente ser especificado em termos da probabilidade de se associar ao campo valores particulares da amplitude e fase. Uma situação similar ocorre em mecânica quântica, onde a natureza caótica da fonte exclui a possibilidade de qualquer predição determinista dos estados do campo e, assim, somente uma descrição probabilística torna-se possível. Quando tudo o que podemos especificar é um conjunto de probabilidades de que o campo seja encontrado num intervalo de estados, cada um correspondendo a uma dada superposição dos estados de número,

o estado do campo é chamado de “mistura estatística”.

O conceito de mistura estatística é introduzido em mecânica quântica através do operador densidade. No Capítulo 2 vimos que, para o caso de um átomo de dois níveis, os elementos de matriz do operador densidade eram usados na derivação da equação óptica de Bloch. Portanto, é interessante revermos algumas propriedades gerais do operador densidade.

Para que isto seja feito de forma clara e objetiva, consideremos primeiramente um campo numa cavidade eletromagnética, na qual a probabilidade de que o mesmo esteja num estado $|R\rangle$ seja dada por P_R , onde o índice R varre um conjunto de estados puros suficientes para descrevê-lo. Para um único modo do campo, o estado $|R\rangle$ pode ser tomado ou como o estado de número $|n\rangle$, ou como o estado coerente $|\alpha\rangle$ ou, ainda, qualquer outro tipo de estado puro. Para o campo total da cavidade, o estado $|R\rangle$ deverá ser dado por todos os produtos possíveis de estados de modo único. Os estados descritos pela probabilidade P_R são uma mistura estatística e a magnitude de P_R para um dado conjunto de estados puros contém toda informação disponível sobre o estado.

Os resultados experimentais que podem ser obtidos ao trabalharmos com um feixe de luz dependem, em geral, das médias no ensemble de alguma quantidade observável. Por exemplo, no tratamento das flutuações no número de fótons é necessário conhecermos a média de n^2 tomada no ensemble. Seguindo essa linha, consideremos um dado observável O , o qual é representado quanticamente por um operador \hat{O} . Uma vez que o valor médio de um observável num estado puro $|R\rangle$ é dado por $\langle R|\hat{O}|R\rangle$, introduz-se a média no ensemble para o caso de uma mistura estatística como sendo

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_R P_R \langle R|\hat{O}|R\rangle. \quad (\text{A.1})$$

onde P_R é uma dada distribuição estatística suposta normalizada, i.e.,

$$\sum_R P_R = 1. \quad (\text{A.2})$$

A equação (A.1) é a expressão básica que nos permite fazer predições úteis para misturas estatísticas do campo. Entretanto, é conveniente expressarmos (A.1) de

forma a facilitar sua utilização ao tomarmos médias em ensembles. De (A.1) e utilizando a condição de completeza obtemos

$$\langle \hat{O} \rangle \doteq \sum_S \langle S | \hat{\rho} \hat{O} | S \rangle, \quad (\text{A.3})$$

onde $|S\rangle$ representa um conjunto completo de estados para o campo considerado e o operador densidade $\hat{\rho}$ é definido como

$$\hat{\rho} \doteq \sum_R P_R |R\rangle \langle R|. \quad (\text{A.4})$$

O operador densidade contém exatamente as mesmas informações que P_R , sendo que $\hat{\rho}$ é determinado quando P_R é especificada para um dado conjunto de estados puros $|R\rangle$. A vantagem de se trabalhar com o operador densidade reside na simplicidade em se obter valores médios de vários observáveis. Vale também ressaltar que a expressão (A.4) é invariante por mudança de base, o que nos permite reescrever (A.3) como

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{O}). \quad (\text{A.5})$$

Nesse contexto, um estado puro pode ser visto como um caso particular de uma mistura estatística na qual uma das probabilidades P_R é igual a unidade e todas as demais são zero. Assim, de (A.4), o operador densidade se torna

$$\hat{\rho} = |R\rangle \langle R|. \quad (\text{A.6})$$

Neste caso, o campo de radiação está exatamente em um estado puro particular $|R\rangle$ e uma descrição estatística se torna redundante. Entretanto, o conceito de operador densidade permanece válido para estados puros e algumas de suas propriedades podem ser convenientemente ilustradas nesse limite. Uma dessas propriedades, válida somente para o operador densidade de estados puros, é

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}, \quad (\text{A.7})$$

a qual é facilmente obtida a partir de (A.6). Dentre os possíveis estados de base $|R\rangle$ que constituem o operador densidade puro (A.6) estão os estados de número e os estados coerentes. Este último, porém, apresenta uma peculiaridade: a existência

de elementos não diagonais. Isto ocorre devido à propriedade de *supercompleteza* dos estados coerentes [21].

A grande utilidade do operador densidade é evidenciado no tratamento de misturas estatísticas. Um exemplo disto surge ao considerarmos as excitações térmicas de fótons em um único modo de uma cavidade eletromagnética mantida à temperatura T . A probabilidade P_n de que n fótons sejam excitados é, para este caso,

$$P_n = (1 - U)U^n, \quad (\text{A.8})$$

onde

$$U = \exp(-\hbar\omega/k_B T). \quad (\text{A.9})$$

Assim, de acordo com (A.4), o operador densidade baseado nos estados de número será

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \sum_n P_n |n\rangle\langle n| \\ &= \{1 - \exp(-\hbar\omega/k_B T)\} \sum_n \exp(-n\hbar\omega/k_B T) |n\rangle\langle n|. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Esta expressão pode ainda ser reescrita de forma alternativa, se o número médio de fótons termicamente excitados, \bar{n} , for introduzido. De acordo com (A.5),

$$\bar{n} = \langle n \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{a}^\dagger \hat{a}). \quad (\text{A.11})$$

Logo, de (A.10) e (A.11), obtemos

$$\hat{\rho} = \sum_n \frac{(\bar{n})^n}{(1 + \bar{n})^{1+n}} |n\rangle\langle n|. \quad (\text{A.12})$$

Se considerarmos as excitações térmicas de todos os modos da cavidade, vemos que os estados de número, $|\{n_{\mathbf{k}}\}\rangle$, para a totalidade dos modos, serão formados através de produtos (diretos) dos estados de número dos modos individuais da cavidade. Como os diferentes modos do campo são independentes, o operador densidade associado ao campo total será dado pelo produto das contribuições dos diferentes modos. Portanto, o operador densidade, expresso em geral como

$$\hat{\rho} = \sum_{\{n_{\mathbf{k}}\}} P_{\{n_{\mathbf{k}}\}} |\{n_{\mathbf{k}}\}\rangle\langle\{n_{\mathbf{k}}\}|, \quad (\text{A.13})$$

é obtido através do produto de fatores $(\bar{n}_{\mathbf{k}})^{n_{\mathbf{k}}}/(1 + \bar{n}_{\mathbf{k}})^{1+n_{\mathbf{k}}}$ para todos os modos, ou seja

$$P_{\{\bar{n}_{\mathbf{k}}\}} = \prod_{\mathbf{k}} \frac{(\bar{n}_{\mathbf{k}})^{n_{\mathbf{k}}}}{(1 + \bar{n}_{\mathbf{k}})^{1+n_{\mathbf{k}}}}, \quad (\text{A.14})$$

onde $P_{\{\bar{n}_{\mathbf{k}}\}}$ é chamada de gran-probabilidade. Nesta expressão, $\bar{n}_{\mathbf{k}}$ é o número médio de fótons excitados no modo \mathbf{k} e o símbolo $\{n_{\mathbf{k}}\}$ denota um conjunto de números $(n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}, \dots, \text{etc})$ de fótons excitados em cada modo da cavidade. A soma em (1.13) leva em conta todos os possíveis conjuntos de números $\bar{n}_{\mathbf{k}}$. A partir desse exemplo, concluímos que o operador densidade para o campo de radiação em uma cavidade térmica é obtido através de (A.13) e (A.14), sendo dado por

$$\hat{\rho} = \sum_{\{n_{\mathbf{k}}\}} |\{n_{\mathbf{k}}\}\rangle \langle \{n_{\mathbf{k}}\}| \prod_{\mathbf{k}} \frac{(\bar{n}_{\mathbf{k}})^{n_{\mathbf{k}}}}{(1 + \bar{n}_{\mathbf{k}})^{1+n_{\mathbf{k}}}}, \quad (\text{A.15})$$

o qual satisfaz a condição de normalização

$$Tr(\hat{\rho}) = 1. \quad (\text{A.16})$$

Apêndice B

A Equação Master

Integrando a equação (3.26) entre t e $t + \Delta t$ obtemos

$$\tilde{\rho}(t + \Delta) = \tilde{\rho}(t) + \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dt' [\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}(t')], \quad (\text{B.1})$$

iterando mais uma vez

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{\rho}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dt' [\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}(t')] + \\ &+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' [\tilde{V}(t'), [\tilde{V}(t''), \tilde{\rho}(t'')]], \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

onde

$$\Delta\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}(t + \Delta t) - \tilde{\rho}(t). \quad (\text{B.3})$$

O operador densidade reduzido do sistema \mathcal{A} , obtido a partir do operador densidade ρ do sistema global $\mathcal{A} + \mathcal{R}$ é, na representação de interação,

$$\tilde{\sigma}(t) \doteq Tr_{\mathcal{R}} \tilde{\rho}(t). \quad (\text{B.4})$$

Assim, tomando o traço com respeito a \mathcal{R} em (B.2), obtemos

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{\sigma}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dt' Tr_{\mathcal{R}} [\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}(t')] + \\ &+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' Tr_{\mathcal{R}} [\tilde{V}(t'), [\tilde{V}(t''), \tilde{\rho}(t'')]], \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Sendo V suficientemente pequeno, e Δt suficientemente curto em comparação com o tempo de evolução $T_{\mathcal{R}}$ de $\tilde{\sigma}$, torna-se legítimo negligenciar a evolução de $\tilde{\rho}$ entre t e t'' no último termo de (B.5), logo podemos substituir $\tilde{\rho}(t'')$ por $\tilde{\rho}(t')$. Com isso, o lado direito de (B.5) passa a conter somente $\tilde{\rho}(t)$, o qual pode ser expresso na forma

$$\tilde{\rho}(t) = Tr_{\mathcal{R}} \tilde{\rho}(t) \otimes Tr_{\mathcal{A}} \tilde{\rho}(t), \quad (\text{B.6})$$

onde já desprezamos a parte que descreve as correlações existentes entre \mathcal{A} e \mathcal{R} no tempo t . A condição de validade para esta aproximação esta relacionada à condição $\Delta t \gg \tau_c$, a qual, de fato, é assumida.

A idéia principal está no fato de que a correlação inicial entre \mathcal{A} e \mathcal{R} no tempo t desaparece após um tempo τ_c , o que implica numa pequena contribuição para a evolução de $\tilde{\sigma}$ durante o intervalo $[t, t + \Delta t]$, o qual é muito maior que τ_c . De fato, novas correlações aparecem entre t e $t + \Delta t$, e estas sim serão responsáveis pela evolução de $\tilde{\sigma}(t)$. Portanto, essa última aproximação é equivalente a escrevermos

$$\tilde{\rho}(t) \simeq \tilde{\sigma}(t) \otimes \sigma_R. \quad (\text{B.7})$$

onde usamos (B.4), (3.29) e (3.30). Em síntese, introduzimos duas aproximações, uma baseada na condição $\Delta t \ll T_R$, e a outra baseada na condição $\Delta t \gg \tau_c$, o que implica na existência de duas escalas de tempo diferentes

$$\tau_c \ll \Delta t \ll T_R. \quad (\text{B.8})$$

Ao trocarmos $\tilde{\rho}(t'')$ e $\tilde{\rho}(t')$ em (B.5) por (B.7) e dividirmos ambos os lados por Δt , obtemos

$$\frac{\Delta \tilde{\sigma}(t)}{\Delta t} = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' T_{\mathcal{R}} [\tilde{V}(t'), [\tilde{V}(t''), \tilde{\sigma}(t) \otimes \sigma_R]]. \quad (\text{B.9})$$

A taxa de variação $\Delta \tilde{\sigma}(t)/\Delta t$ é chamada de taxa “coarse-grained”, pois pode ser considerada como sendo a média temporal de uma taxa instantânea, $d\tilde{\sigma}/dt$, sobre um intervalo Δt , i.e.,

$$\frac{\Delta \tilde{\sigma}(t)}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \frac{d\tilde{\sigma}(t)}{dt'} \quad (\text{B.10})$$

O fato de que $\Delta \tilde{\sigma}(t)/\Delta t$ depende somente do estado $\tilde{\sigma}(t)$ do sistema \mathcal{A} no tempo t significa que a evolução de \mathcal{A} depende somente do instante presente e não do passado e, por isso, dizemos que este é um “processo markoviano”.

Devido às relações (3.36), (3.37) e (3.38), $\tilde{V}(t')$ e $\tilde{V}(t'')$ são, como $\tilde{\sigma} \otimes \tilde{\sigma}_R$, produtos dos observáveis de \mathcal{A} e \mathcal{R} os quais comutam entre si. Então, o traço sobre \mathcal{R} de (B.9) leva em conta somente produtos da forma $\tilde{\sigma}_R \tilde{R}(t') \tilde{R}(t'')$ ou $\tilde{\sigma}_R \tilde{R}(t'') \tilde{R}(t')$. Logo, fica claro que a integral em (B.9) depende do reservoir somente através de médias em dois tempos, $g(\tau)$ ou $g(-\tau)$, onde $\tau = t' - t''$.

Para tirarmos proveito do fato de que $g(\tau)$ decresce rapidamente com τ , é conveniente que façamos uma mudança das variáveis de integração em (B.9). De fato, trocamos

$$\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \Rightarrow \int_0^{\Delta t} d\tau \int_{t+\tau}^{t+\Delta t} dt', \quad (\text{B.11})$$

onde uma faixa em que o integrando contribui pouco é desprezada. Como $\Delta t \gg \tau_c$ um erro desprezível é cometido ao trocarmos o limite superior da integral em τ por ∞ e o limite inferior da integral em dt' é estendido para t . Por fim, expandimos o comutador em (B.9), e usando (3.36) e (3.41), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\Delta \tilde{\sigma}(t)}{\Delta t} &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \times \\ &\times \left\{ g(\tau) \left[\tilde{A}(t') \tilde{A}(t' - \tau) \tilde{\sigma}(t) - \tilde{A}(t' - \tau) \tilde{\sigma}(t) \tilde{A}(t') \right] + \right. \\ &\left. + g(-\tau) \left[\tilde{\sigma}(t) \tilde{A}(t' - \tau) \tilde{A}(t') - \tilde{A}(t') \tilde{\sigma}(t) \tilde{A}(t' - \tau) \right] \right\}. \quad (\text{B.12}) \end{aligned}$$

Em seguida, efetuaremos a integração sobre t' , porém antes devemos projetar a equação operatorial acima na base dos estados de energia de H_A . Sejam $|a\rangle$ e $|b\rangle$ autoestados de H_A e $\{|c\rangle\}$, $\{|d\rangle\}$ e $\{|n\rangle\}$ conjuntos completos de autoestados de H_A . Assim,

$$\langle a | \frac{\Delta \tilde{\sigma}(t)}{\Delta t} | b \rangle \equiv \frac{\Delta \tilde{\sigma}_{ab}(t)}{\Delta t} = \sum_{cd} \gamma_{abcd}(t) \tilde{\sigma}(t), \quad (\text{B.13})$$

com

$$\begin{aligned} \gamma_{abcd}(t) &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \times \\ &\times \left\{ g(\tau) \left[\delta_{bd} \sum_n \tilde{A}_{an}(t') \tilde{A}_{nc}(t' - \tau) - \tilde{A}_{ac}(t' - \tau) \tilde{A}_{db}(t') \right] + \right. \\ &\left. + g(-\tau) \left[\delta_{ac} \sum_n \tilde{A}_{dn}(t' - \tau) \tilde{A}_n b(t') - \tilde{A}_{ac}(t') \tilde{A}_{db}(t' - \tau) \right] \right\}. \quad (\text{B.14}) \end{aligned}$$

A dependência temporal no integrando de (B.14) está somente nos elementos de matriz \tilde{A}_{an} , $\tilde{A}_{nc}(t - \tau)$, etc, na forma de exponenciais do tipo $\exp(i\omega_{an}t')$ Portanto, cada um dos quatro termos de (B.14) variam como $\exp[i(\omega_{ab} - \omega_{cd})t']$. Por exemplo, a dependência em t' do primeiro termo em (B.14) é (levando em conta δ_{bd} , então $\omega_b = \omega_d$)

$$e^{i(\omega_{an} - \omega_{nc})t'} = e^{i(\omega_a - \omega_c)t'} = e^{i(\omega_{ab} - \omega_{cd})t'}. \quad (\text{B.15})$$

Com isso calculamos a integral em (B.14)

$$\frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' e^{i(\omega_{ab}-\omega_{cd})t'} = e^{i(\omega_{ab}-\omega_{cd})t} f[(\omega_{ab}-\omega_{cd})\Delta t], \quad (\text{B.16})$$

onde

$$f(X) = e^{iX/2} \frac{\text{sen}(X/2)}{X/2}. \quad (\text{B.17})$$

Deste contexto, emergem três situações: Se $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \ll 1/\Delta t$ então $f \simeq 1$, se $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \gg 1/\Delta t$ então $f \simeq 0$. Desta última, vemos que é legítimo ignorar o acoplamento entre $\Delta\tilde{\sigma}_{ab}/\Delta t$ e $\tilde{\sigma}_{cd}$. Finalmente, se $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \sim 1/\Delta t$ e $T_R \gg \Delta t$ segue que o acoplamento entre $\Delta\tilde{\sigma}_{ab}/\Delta t$ e $\tilde{\sigma}_{cd}$ tem um efeito fraco. Desconsideraremos este efeito e reteremos somente os termos que acoplam $\Delta\tilde{\sigma}_{ab}/\Delta t$ a $\tilde{\sigma}_{cd}$ para $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \ll 1/\Delta t$, ou seja, consideramos apenas os “termos seculares” e para os quais $f \simeq 1$. Diante dessa aproximação, e extendendo a prescrição acima para os demais termos, a equação master (B.13) torna-se

$$\frac{\Delta\tilde{\sigma}(t)}{\Delta t} = \sum_{cd}^{(sec)} e^{i(\omega_{ab}-\omega_{cd})t} \mathcal{R}_{abcd} \tilde{\sigma}_{cd}(t), \quad (\text{B.18})$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{abcd} = & -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \times \\ & \times \left\{ g(\tau) \left[\delta_{bd} \sum_n \tilde{A}_{an} \tilde{A}_{nc} e^{i\omega_{cd}\tau} - \tilde{A}_{ac} \tilde{A}_{db} e^{i\omega_{ca}\tau} \right] + \right. \\ & \left. + g(-\tau) \left[\delta_{ac} \sum_n \tilde{A}_{dn} \tilde{A}_{nb} e^{i\omega_{nd}\tau} - \tilde{A}_{ac} \tilde{A}_{db} e^{i\omega_{bd}\tau} \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Voltando à representação de Schrödinger, escrevemos

$$\sigma_{ab}(t) = e^{i\omega_{ab}t} \tilde{\sigma}_{ab}(t). \quad (\text{B.20})$$

Derivando esta última e considerando $d\tilde{\sigma}_{ab}(t)/dt = \Delta\tilde{\sigma}_{ab}/\Delta t$, obtemos

$$\frac{d}{dt} \sigma_{ab}(t) = -i\omega_{ab} \sigma_{ab}(t) + \sum_{cd}^{(sec)} \mathcal{R}_{abcd} \sigma_{cd}(t). \quad (\text{B.21})$$

Na representação de Schrödinger, a equação master expandida na base dos autovalores de H_A , tem a estrutura de um sistema de equações diferenciais lineares com coeficientes independentes do tempo. O primeiro termo de (B.21) descreve a evolução livre de σ_{ab} , enquanto o segundo termo descreve o efeito da interação com \mathcal{R} .

Apêndice C

Estados Puros e Mistos em TFD

C.1 A Representação de Número

Quando trabalhamos com problemas envolvendo osciladores harmônicos quânticos introduzimos os operadores a e a^\dagger os quais devem satisfazer

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (\text{C.1})$$

A partir de a e a^\dagger , contruímos os operadores associados aos observáveis físicos, por exemplo, posição e momento

$$q = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger), \quad (\text{C.2})$$

$$p = \frac{1}{\sqrt{2}i}(a - a^\dagger), \quad (\text{C.3})$$

os quais satisfazem às relações canônicas de comutação

$$[q, p] = i. \quad (\text{C.4})$$

Podemos também definir o operador número

$$N = a^\dagger a, \quad (\text{C.5})$$

cujos autovetores ortonormalizados serão aqui representados por $|n\rangle\rangle$, de forma que

$$N|n\rangle\rangle = n|n\rangle\rangle, \quad \langle\langle m|n\rangle\rangle = \delta_{nm}. \quad (\text{C.6})$$

Neste contexto, é possível mostrar que sendo a^\dagger o hermitiano conjugado de a , o autovalor n é não negativo e $a|n\rangle\rangle$ e $a^\dagger|n\rangle\rangle$ são autovetores de N com autovalor

$n - 1$ e $n + 1$, respectivamente. Com efeito, n , sendo não negativo, deve ter um valor mínimo. Representando por $|0\rangle\rangle$ o autoestado associado a tal autovalor, segue que

$$a|0\rangle\rangle = 0, \quad (\text{C.7})$$

o que implica em

$$N|0\rangle\rangle = 0. \quad (\text{C.8})$$

Isto mostra que o autovalor de N no estado $|0\rangle\rangle$ é zero, justificando assim nossa notação. Denominaremos esse estado como estado de vácuo. Assim, um estado qualquer $|n\rangle\rangle$ normalizado pode ser obtido atuando n vezes o operador a^\dagger sobre o estado de vácuo,

$$|n\rangle\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle\rangle. \quad (\text{C.9})$$

Representaremos por $\mathcal{H}(a)$ o espaço vetorial formado por todas as superposições normalizáveis dos vetores de estado $\{|n\rangle\rangle\}$: $\mathcal{H}(a) = \{\sum c_n|n\rangle\rangle : \sum |c_n| < \infty\}$. Esse espaço é conhecido como espaço de Fock e o conjunto $\{|n\rangle\rangle\}$ representa uma base de $\mathcal{H}(a)$. Como n é não negativo, esta representação é também conhecida como representação de número.

Introduzindo a notação

$$\Delta A = A - \langle A \rangle \quad (\text{C.10})$$

onde $\langle A \rangle = \langle i|A|i \rangle$ e $|i \rangle$ representa um vetor de estado qualquer de $\mathcal{H}(a)$, obtemos o princípio de incerteza

$$\langle (\Delta p)^2 \rangle \langle (\Delta q)^2 \rangle \gg \frac{1}{4}. \quad (\text{C.11})$$

Note que estamos usando $\hbar = 1$.

C.2 Estados Coerentes

Na seção anterior introduzimos o estado de vácuo, $|0\rangle\rangle$, associado ao operador a . Entretanto, quando estamos interessados em tratar fenômenos que estão no âmbito da eletrodinâmica quântica (QED), nos deparamos com um sério problema a respeito da escolha do estado de vácuo. A existência de vários tipos diferentes de estados

de vácuo está ligada ao número infinito de graus de liberdade utilizados para descrever o campo de radiação. De fato, na QED, o campo de radiação é descrito por um ensemble de fótons, embora existam fenômenos onde encontramos não somente estados de fótons mas também uma grande variedade de formas macroscópicas de radiação clássica.

Para tratarmos situações como esta, poderíamos intuitivamente supor que os estados macroscópicos são formados através da condensação de muitos fótons. Isso sugere que tais estados não devem ser autoestados do operador N , mas sim estados cujo número de partículas tenha grande incerteza. Um exemplo disso é encontrado na teoria do laser, onde os pacotes de onda, por terem uma fase bem definida, apresentam grande incerteza no número de partículas (pois $\Delta\phi\Delta n \geq 1/2$). Em situações como esta, faz-se necessário o uso de um outro estado de vácuo, onde muitos fótons são condensados, correspondendo aos estados coerentes citados no Apêndice A.

Veremos agora como representar um estado associado a uma radiação macroscópica a qual contém um grande número de fótons, obtidos através de um mecanismo de condensação. Denotaremos este estado por $|0\rangle$. Obviamente, este não é o estado $|0\rangle\rangle$ do operador a , pois $a|0\rangle$ não é zero. Entretanto, podemos introduzir um novo operador, α , o qual satisfaz $\alpha|0\rangle = 0$ e $[\alpha, \alpha^\dagger] = 1$. Assim, se encontrarmos tal operador, o estado $|0\rangle$ será seu estado de vácuo.

Para encontrarmos um operador com essas características, façamos uma translação no operador a ,

$$a \rightarrow \alpha(\theta) = a + \theta, \quad (\text{C.12})$$

onde θ é um c-número. Esta transformação é chamada de translação bosônica ou transformação de Bogoliubov para os estados coerentes. O estado de vácuo associado ao operador $\alpha(\theta)$ será denotado por $|0(\theta)\rangle$

$$\alpha(\theta)|0(\theta)\rangle = 0. \quad (\text{C.13})$$

De (C.12), teremos

$$a|0(\theta)\rangle = -\theta|0(\theta)\rangle. \quad (\text{C.14})$$

O estado $|0(\theta)\rangle$ é chamado de estado coerente de a com autovalor $-\theta$ [21].

Usando uma notação mais compacta, temos

$$\alpha(\theta) = U_c(\theta)aU_c^{-1}(\theta) \quad (\text{C.15})$$

onde

$$U_c(\theta) = \exp[iG_c(\theta)] \quad (\text{C.16})$$

e o gerador $G_c(\theta)$ é dado por

$$G_c(\theta) = -i(\theta^*a - \theta a^\dagger). \quad (\text{C.17})$$

Aplicando esta transformação ao estado $|0\rangle$, obtemos

$$|0(\theta)\rangle = U_c(\theta)|0\rangle. \quad (\text{C.18})$$

Expandindo $U_c(\theta)$ chegamos a

$$U_c(\theta) = \exp\left(-\frac{1}{2}|\theta|^2\right) \exp(-\theta a^\dagger) \exp(\theta a). \quad (\text{C.19})$$

Com isso, (C.18) torna-se

$$|0(\theta)\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\theta|^2\right) \exp(-\theta a^\dagger)|0\rangle. \quad (\text{C.20})$$

Esse resultado indica que o estado de vácuo $|0(\theta)\rangle$ é dado por uma superposição de estados contendo um grande número de quanta a , ilustrando assim, como se dá *condensação* de partículas a .

Da mesma maneira que construímos o espaço de Fock, $\mathcal{H}(a)$, podemos construir o espaço $\mathcal{H}(\theta)$ atuando o operador α sobre o estado $|0(\theta)\rangle$. Devemos notar que $\mathcal{H}(a)$ é equivalente à $\mathcal{H}(\theta)$ no sentido de que qualquer vetor de $\mathcal{H}(a)$ é dado por uma superposição de vetores de $\mathcal{H}(\theta)$ e vice versa. De fato, obtemos uma parametrização do espaço $\mathcal{H}(\theta)$ onde, para dois valores diferentes quaisquer de θ , dois novos espaços, equivalentes entre si, são gerados.

Neste contexto, devemos enfatizar que para os estados coerentes a relação de incerteza, (C.11), fica

$$\langle(\Delta p)^2\rangle\langle(\Delta q)^2\rangle = \frac{1}{4}. \quad (\text{C.21})$$

C.3 Estados Squeezed

No caso em que a incerteza

$$\langle (\Delta p)^2 \rangle \leq \frac{1}{2} \quad (\text{C.22})$$

ou

$$\langle (\Delta q)^2 \rangle \leq \frac{1}{2}, \quad (\text{C.23})$$

dizemos que a onda é uma onda comprimida ou “squeezed”. Nesta seção estu- daremos a estrutura de vácuo para os estados squeezed de dois modos. Para isso devemos considerar dois conjuntos de operadores, a e \tilde{a} , satisfazendo

$$[a, a^\dagger] = [\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger] = 1 \quad (\text{C.24})$$

$$[a, \tilde{a}] = [a, \tilde{a}^\dagger] = 0. \quad (\text{C.25})$$

Introduzindo o gerador

$$G_c(\theta) = i[a\tilde{a} - \tilde{a}^\dagger a^\dagger], \quad (\text{C.26})$$

e definindo $U_B(\theta) = \exp[i\theta G_B]$, chegamos à transformação

$$\alpha(\theta) = U_B(\theta)aU_B^{-1}(\theta), \quad (\text{C.27})$$

$$\tilde{\alpha}(\theta) = U_B(\theta)\tilde{a}U_B^{-1}(\theta), \quad (\text{C.28})$$

onde θ é um parâmetro real. Expandindo $U_B(\theta)$, encontramos

$$\alpha(\theta) = ca - d\tilde{a}^\dagger, \quad (\text{C.29})$$

$$\tilde{\alpha}(\theta) = c\tilde{a} - da^\dagger, \quad (\text{C.30})$$

onde c e d são c -números dados por $c = \cosh \theta$ e $d = \sinh \theta$, respectivamente. Esta transformação é chamada de transformação de Bogoliubov para os estados squeezed de dois modos [22]. Note que

$$c^2 - d^2 = 1. \quad (\text{C.31})$$

Utilizando uma notação matricial para (C.29) e (C.30), obtemos

$$\begin{bmatrix} a \\ \tilde{a}^\dagger \end{bmatrix}^\mu = B^{-1}(\theta)^{\mu\nu} \begin{bmatrix} \alpha(\theta) \\ \tilde{\alpha}^\dagger(\theta) \end{bmatrix}^\nu \quad (\text{C.32})$$

e

$$[a^\dagger, -\tilde{a}]^\mu = [\alpha^\dagger(\theta), -\tilde{\alpha}(\theta)]^\nu B(\theta)^{\nu\mu} \quad (\text{C.33})$$

onde

$$B(\theta) = \begin{bmatrix} c & -d \\ -d & c \end{bmatrix}. \quad (\text{C.34})$$

Podemos mostrar facilmente que

$$B^{-1}(\theta) = \tau_3 B(\theta) \tau_3, \quad (\text{C.35})$$

onde fazemos uso da matrize de Pauli τ_3 ,

$$\tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.36})$$

Torna-se conveniente adotarmos a seguinte notação de dubleto,

$$a^\mu : a^1 = a, \quad a^2 = \tilde{a}^\dagger, \quad (\text{C.37})$$

$$\tilde{a}^\mu : \tilde{a}^1 = a^\dagger, \quad \tilde{a}^2 = -\tilde{a}, \quad (\text{C.38})$$

$$\alpha(\theta)^\mu : \alpha(\theta)^1 = \alpha(\theta), \quad \alpha(\theta)^2 = \tilde{\alpha}^\dagger(\theta), \quad (\text{C.39})$$

$$\tilde{\alpha}(\theta)^\mu : \tilde{\alpha}(\theta)^1 = \alpha^\dagger(\theta), \quad \tilde{\alpha}(\theta)^2 = -\tilde{\alpha}, \quad (\text{C.40})$$

pois dessa forma as transformações (C.32) e (C.33) tornam-se

$$a^\mu = B^{-1}(\theta)^{\mu\nu} \alpha(\theta)^\nu, \quad (\text{C.41})$$

$$\tilde{a}^\mu = \tilde{\alpha}(\theta)^\nu B(\theta)^{\nu\mu}. \quad (\text{C.42})$$

Denotaremos o vácuo de (a, \tilde{a}) por $|0\rangle$, e o de $(\alpha(\theta), \tilde{\alpha}(\theta))$ por $|0(\theta)\rangle$. Como em (C.18),

$$|0(\theta)\rangle = U_B(\theta)|0\rangle \quad (\text{C.43})$$

ou também

$$|0(\theta)\rangle = \exp[-\ln \cosh \theta] \exp[-a^\dagger \tilde{a}^\dagger \tanh \theta] |0\rangle. \quad (\text{C.44})$$

A relação acima indica que em $|0(\theta)\rangle$ o par (a, \tilde{a}) é condensado. O estado $|0(\theta)\rangle$ é chamado de estado esqeezed de dois modos do par (a, \tilde{a}) . Podemos construir o

espaço de Fock de (a, \tilde{a}) (denotado por $\mathcal{H}(a\tilde{a})$) atuando potências de a^\dagger e \tilde{a}^\dagger sobre $|0\rangle$, enquanto que o espaço de Fock $\mathcal{H}(\theta)$ é construído atuando $\alpha^\dagger(\theta)$ e $\tilde{\alpha}^\dagger(\theta)$ sobre $|0(\theta)\rangle$. Como o vácuo $|0(\theta)\rangle$ é um estado que contém a condensação do par (a, \tilde{a}) , então pode-se verificar que $|0(\theta)\rangle$ é invariante sob a troca de a por \tilde{a} e vice versa. Esta troca é chamada, em TFD, de regra de conjugação de “tilde” [17].

Introduzindo os parâmetros número $n \equiv \langle 0(\theta)|a^\dagger a|0(\theta)\rangle$ e $\tilde{n} \equiv \langle 0(\theta)|\tilde{a}^\dagger \tilde{a}|0(\theta)\rangle$, vemos que $n = \tilde{n} = d^2$. Logo, a matriz B depende do parâmetro número.

C.4 Estados Mistos em TFD

Pode ser mostrado que as transformações de Bogoliubov, (C.29) e (C.30), geram ruído em estados puros, em particular nos estados esqueezed de dois modos. Isto nos deveria surpreender, pois usualmente esperaríamos o aparecimento de ruído somente em um estado misto (ou de mistura), como visto no Apêndice A. Nesta seção mostraremos como este ruído, criado pela transformação de Bogoliubov, pode ser expresso em termos de uma média estatística num estado misto. Com isso, completamos nosso objetivo que é mostrar, de fato, que a transformação bosônica de Bogoliubov gera um ruído térmico.

Com efeito, consideremos dois conjuntos de operadores a e \tilde{a} , satisfazendo (C.24) e (C.25). Denotaremos os autovalores de $a^\dagger a$ e $\tilde{a}^\dagger \tilde{a}$ por m e \tilde{m} respectivamente. Escolhendo o autovetor $|m, \tilde{m}\rangle$ como uma base no espaço de Hilbert dos dois osciladores, segue que um estado puro nesse espaço dobrado é dado por

$$|0\rangle = c_1 \sum_{m=0}^{\infty} \rho^\alpha |m, \tilde{m}\rangle, \quad (\text{C.45})$$

$$|0\rangle = c_2 \sum_{m=0}^{\infty} \langle m, \tilde{m}|\rho^{1-\alpha}, \quad (\text{C.46})$$

onde α é uma constante real, e c_1 e c_2 são constantes de normalização tais que

$$\langle 0|0\rangle = 1. \quad (\text{C.47})$$

O operador ρ é o operador densidade, definido aqui por

$$\rho = f^{a^\dagger a}, \quad (\text{C.48})$$

onde f é um c -número. Com isso, a condição de normalização (C.47) nos diz que

$$c_1 c_2 = 1 - f. \quad (\text{C.49})$$

Portanto, para um operador qualquer, digamos A , consistindo de a 's e a^\dagger 's, segue que

$$\begin{aligned} \langle 0|A(a, a^\dagger)|0\rangle &= c_1 c_2 \sum_{m=0}^{\infty} f^m \langle m|A(a, a^\dagger)|m\rangle \\ &= \frac{\text{Tr}[\rho A(a, a^\dagger)]}{\text{Tr}\rho}, \end{aligned} \quad (\text{C.50})$$

onde usamos $\langle m, \tilde{l}|A(a, a^\dagger)|m', \tilde{l}'\rangle = \delta_{ll'} \langle m|A(a, a^\dagger)|m'\rangle$. O lado direito de (C.50) é média estatística de A com relação ao operador densidade ρ .

A relação

$$\begin{aligned} n &= \langle 0|a^\dagger a|0\rangle \\ &= c_1 c_2 \sum_{m=0}^{\infty} m f^m \\ &= \frac{f}{1-f} \end{aligned} \quad (\text{C.51})$$

nos permite relacionar f com o parâmetro número de partícula n . Neste sentido, encontramos uma igualdade entre o valor esperado no vácuo (um valor esperado num estado puro de um espaço dobrado) e a média estatística (valor esperado num estado misto) [3].

De acordo com (C.45) o vácuo $|0\rangle$ é uma superposição de pares de estado $|m, \tilde{m}\rangle$, com $m = m'$. Mais ainda, quando escolhermos $\alpha = 1/2$ e $c_1 = c_2^*$, $\langle 0|$ torna-se o hermitiano conjugado de $|0\rangle$. Assim, o estado de vácuo em (C.45) está relacionado ao vácuo de (a, \tilde{a}) , que é $|0, \tilde{0}\rangle$, através de uma transformação de Bogoliubov térmica onde n é dado por (C.51). Isto mostra que o estado puro com ruído considerado nesta seção é obtido através de uma transformação de Bogoliubov térmica.

A expressão (C.51) mostra que o valor esperado no vácuo com $f = \exp[-\beta\omega]$ é idêntica à média térmica à temperatura $T = 1/\beta$. Note que estamos considerando unidades onde k_B , a constante de Boltzmann, é igual à unidade.

Apêndice D

Relações Úteis entre Propagadores

Com o intuito de complementarmos o Capítulo 5, mostraremos, neste Apêndice, algumas relações algébricas que podem ser estabelecidas entre propagadores. Utilizaremos, por simplicidade, um campo bosônico real e não massivo. Porém, os resultados aqui obtidos se aplicam diretamente ao caso tratado naquele capítulo.

Representaremos tal campo bosônico por

$$\phi(t) = \phi^{(+)}(t) + \phi^{(-)}(t), \quad (\text{D.1})$$

com

$$\phi^{(+)}(t) = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{2L^3 \omega_{\mathbf{k}}} \right)^{1/2} a_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t}, \quad (\text{D.2})$$

$$\phi^{(-)}(t) = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{2L^3 \omega_{\mathbf{k}}} \right)^{1/2} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{i\omega_{\mathbf{k}} t}, \quad (\text{D.3})$$

onde estamos considerando $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, $\hbar = c = 1$ e $|\mathbf{k}| = \omega_{\mathbf{k}} = k_0$. Nesse contexto, tomamos o comutador (como em (5.10))

$$[\phi(t'), \phi(t'')] \doteq \Delta(t' - t''). \quad (\text{D.4})$$

Fazendo $t' - t'' = \tau$, obtemos

$$\Delta(\tau) = \Delta^{(+)}(\tau) + \Delta^{(-)}(\tau) \quad (\text{D.5})$$

com

$$\Delta^{(+)}(\tau) \doteq [\phi^{(+)}(t'), \phi^{(-)}(t'')] = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{2\omega_{\mathbf{k}}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} \tau}, \quad (\text{D.6})$$

$$\Delta^{(-)}(\tau) \doteq [\phi^{(-)}(t'), \phi^{(+)}(t'')] = \frac{-1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{2\omega_{\mathbf{k}}} e^{i\omega_{\mathbf{k}} \tau}, \quad (\text{D.7})$$

onde já tomamos o limite $L^3 \rightarrow \infty$, e usamos $[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. Comparando (D.6) e (D.7) vemos facilmente que $\Delta^{(+)}(\tau) = -\Delta^{(-)}(-\tau)$. Portanto, essas expressões podem ser escritas como

$$\Delta^{(+)}(\tau) = \frac{1}{2}(\Delta(\tau) + \Delta_{(1)}(\tau)), \quad (\text{D.8})$$

$$\Delta^{(-)}(\tau) = -\frac{1}{2}(\Delta(-\tau) + \Delta_{(1)}(-\tau)), \quad (\text{D.9})$$

onde

$$\Delta_{(1)}(\tau) = \Delta^{(+)}(\tau) - \Delta^{(-)}(\tau). \quad (\text{D.10})$$

Podemos, ainda, escrever (D.8) como

$$\Delta^{(+)}(\tau) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int d^4k [-2\pi i \delta(k_0^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2) \theta(k_0)] e^{-i\omega_{\mathbf{k}}\tau}, \quad (\text{D.11})$$

onde $d^4k = dk dk_0$, e a integração em k_0 é de $-\infty$ a ∞ . Logo, no espaço de frequências

$$\Delta^{(+)}(\omega) = -2\pi i \delta(\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2) \theta(\omega), \quad (\text{D.12})$$

onde substituímos k_0 por ω . De forma análoga,

$$\Delta^{(-)}(\omega) = 2\pi i \delta(\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2) \theta(-\omega) \quad (\text{D.13})$$

Com esses dois resultados escrevemos (D.5) no espaço de frequências

$$\Delta(\omega) = -2\pi i \delta(\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2) (\theta(\omega) - \theta(-\omega)) \quad (\text{D.14})$$

$$= -2\pi i \delta(\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2) \text{sgn}(\omega), \quad (\text{D.15})$$

onde $\text{sgn}(\omega) = \theta(\omega) - \theta(-\omega)$, representa o sinal de ω . Analogamente, (D.10) será dado por

$$\Delta_{(1)}(\omega) = -2\pi i \delta(\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2). \quad (\text{D.16})$$

Outras relações importantes levam em conta o propagador de Feynman:

$$\Delta_F(\tau) = \theta(\tau) \Delta^{(+)}(\tau) - \theta(-\tau) \Delta^{(-)}(\tau). \quad (\text{D.17})$$

Este propagador pode ser escrito de várias formas, em particular,

$$\Delta_F(\tau) = \Delta_{(ret)}(\tau) - \Delta^{(-)}(\tau), \quad (\text{D.18})$$

$$\Delta_F(\tau) = \Delta^{(+)}(\tau) - \Delta_{(adv)}(\tau), \quad (\text{D.19})$$

$$\Delta_F(\tau) = \bar{\Delta}(\tau) + \frac{1}{2} \Delta_{(1)}(\tau), \quad (\text{D.20})$$

onde

$$\Delta_{(ret)}(\tau) \doteq \theta(\tau)\Delta(\tau), \quad (D.21)$$

$$\Delta_{(adv)}(\tau) \doteq -\theta(-\tau)\Delta(\tau), \quad (D.22)$$

$$\bar{\Delta}(\tau) \doteq \frac{1}{2}\text{sgn}(\tau)\Delta(\tau), \quad (D.23)$$

que são, respectivamente, os propagadores retardado, avançado e a parte principal de Δ . No espaço de frequências, o propagador em (D.20) é dado por

$$\Delta_F(\omega) = \mathcal{P}\frac{1}{\omega^2 - \omega_k^2} + \frac{1}{2}\Delta_{(1)}(\omega), \quad (D.24)$$

Utilizando as expressões (D.10), (D.18) e (D.20) obtemos

$$\Delta_{(ret)}(\omega) = \mathcal{P}\frac{1}{\omega^2 - \omega_k^2} + \frac{1}{2}\Delta(\omega). \quad (D.25)$$

Vale notar que os propagadores (D.16) e (D.25) são aqueles que investigamos, no Capítulo 5, no contexto da TFD.

[4] W. B. Eardley and D. R. Page, *Journal of Physics A* **12**, 1025 (1979).

[5] H. A. Bethe, *Phys. Rev.* **71**, 380 (1952).

[6] T. A. Brown, *Journal of Physics A* **12**, 1025 (1979).

[7] C. Kiefer and P. D. Mannheim, *Journal of Physics A* **12**, 1025 (1979).

[8] F. Mitter, *Journal of Physics A* **12**, 1025 (1979).

[9] G. S. Guralnik, *Journal of Physics A* **12**, 1025 (1979).

[10] J. M. Jauch and F. J. Rohrbaugh, *Journal of Physics A* **12**, 1025 (1979).

[11] P. Kiefer, *Journal of Physics A* **12**, 1025 (1979).

[12] H. Leutwyler, *The Quantum Theory of Fields*, Vol. 1 (1982).

Referências

- [1] A. O. Barut, "Fundations of Radiation Theory and Quantum Eletrodynamics". NY (1998);
- [2] J. Dalibard, J. Dupont-Roc and C. Cohen-Tannoudji, J. de Physique **43** (1982) 1617, J. de Physique **45** (1984) 637; C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc and G. Grynberg, "Atom-Photon Interactions - Basic Processes and Aplications", J. Wiley, NY (1998);
- [3] H. Umezawa and Y. Takahashi, Int. J. Mod. Phys. B **10** (1996) 1755;
- [4] W. E. Lamb and R. C. Retherford, Phys. Rev. **72** (1947) 241;
- [5] H. A. Bethe, Phys. Rev. **72** (1947) 339;
- [6] T. A. Welton, Phys. Rev. **74** (1948) 1157;
- [7] C. Itzykson and J. B. Zuber, "Quantum Field Theory", McGraw Hill, Singapore (1985);
- [8] F. Mandl e G. Shaw, "Quantum Field Theory", Wiley, N.Y. (1984);
- [9] G. Scharf, "Finite Quantum Electrodynamics", Springer-Verlag, Berlin (1995);
- [10] J. M. Jauch and F. Rohrlich, "The Theory of Photons and Electrons", Springer-Verlag, NY (1976);
- [11] T. Kinoshita, "Quantum Electrodynamics", World Scientific, Singapore (1990);
- [12] R. Loudon, "The Quantum Thory of Light", Oxford Univ. Press, (1983);

- [13] L. C. Costa e J. L. Tomazelli, "Relatório Fapesp", (08/99);
- [14] L. Allen and J. H. Eberly, "Optical Ressonance and Two Level Atoms", J. Wiley, NY (1975);
- [15] P. W. Milonni, Phys. Rep. **15**, (1976) 1.;
- [16] H. Umezawa, "Advanced Field Theory", AIP Press, NY (1995);
- [17] H. Matsumoto, Y. Nakano and H. Umezawa, Phys. Rev. D **31** (1985) 429;
- [18] H. Matsumoto, Fortsh. Phys. **25** (1977) 1;
- [19] A. A. Abrikosov, Physics of Atomic Nuclei, **59** (1996) 352;
- [20] P. Kulish and L. Faddeev, Theor. Math. Phys., **4** (1970) 745;
- [21] R. J. Glauber, Phys. Rev. **131** (1963) 2766;
- [22] A. Manu, M. Revzen, H. Umezawa and Y. Yamanaka, Phys. Lett. **140A** (1989) 475;

