

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

EQUAÇÃO MESTRA MICROSCÓPICA
PARA O MODELO DE RABI

Iury Nunes Lopes

UFSCar – São Carlos

Fevereiro/2013

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

EQUAÇÃO MESTRA MICROSCÓPICA PARA O MODELO DE RABI

Iury Nunes Lopes

Dissertação submetida ao Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos – DF/UFSCar – como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientação: Prof. Dr. Celso Jorge Villas-Bôas

UFSCar – São Carlos

Fevereiro/2013

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária da UFSCar**

L864em Lopes, Iury Nunes.
Equação mestra microscópica para o modelo de Rabi /
Iury Nunes Lopes. -- São Carlos : UFSCar, 2013.
60 f.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São
Carlos, 2013.

1. Ótica quântica. 2. Eletrodinâmica quântica de
cavidades. 3. Sistemas quânticos abertos. I. Título.

CDD: 535 (20^a)

IURY NUNES LOPES

Dissertação de Mestrado submetida à Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal de São Carlos, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Aprovada em: 27 de Fevereiro de 2013

BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Celso Jorge Villas-Bôas (orientador)

Universidade Federal de São Carlos - DF



Prof. Dr. Norton Gomes de Almeida

Universidade Federal de Goiás - IF



Prof. Dr. Wesley Bueno Cardoso

Universidade Federal de Goiás - IF

Agradecimentos

A Deus, pelas bênçãos recebidas durante toda minha vida.

Ao professor Celso Jorge Villas-Bôas pela orientação, incentivo e auxílio ao longo desse curso de mestrado.

Aos meus pais e avós pelo suporte emocional e por toda contribuição que deram para que eu chegasse até esse ponto.

À minha namorada Jordanna pelo apoio e compreensão.

Aos colegas Daniel Rossatto, James de Souza e Thiago Werlang pelas valiosas discussões, tão úteis para a conclusão desse trabalho.

A todos meus familiares, amigos e professores que de alguma forma contribuíram para o meu crescimento.

À CAPES, pelo apoio financeiro.

Agradecemos também à FAPESP (processo número 2012/00176-9) que nos permitiu adquirir um computador de alta capacidade de processamento, onde fizemos a maioria das simulações apresentadas nessa dissertação.

Resumo

O modelo de Rabi é o mais completo que se tem para entender a interação entre radiação e matéria. Entretanto, por não se ter uma solução exata para esse modelo, muitos trabalhos recentes têm recorrido ao modelo de Jaynes-Cummings, que elimina do Hamiltoniano do sistema os termos “contragirantes”, em um processo conhecido como “Aproximação de onda girante”. Essa aproximação tem sido bastante precisa para descrever os experimentos na área de Óptica Quântica nas últimas duas décadas, especialmente no contexto da Eletrodinâmica Quântica de Cavidades, onde o acoplamento átomo-campo g é muito fraco comparado com a frequência de transição atômica ω_0 e a frequência da cavidade ω_c . Entretanto, em recentes experimentos no contexto de Eletrodinâmica Quântica de Circuitos, o acoplamento átomo-campo tem atingido valores comparáveis aos das frequências do átomo e do campo, de modo que a aproximação de onda girante deixa de ser válida. É nesse contexto que esse trabalho se encontra, isto é, avalia as situações em que a aproximação de onda girante deixa de ser válida e mostra, através da análise de algumas propriedades do sistema, as diferenças devidas à escolha do modelo.

Levamos também em conta a dissipação do sistema, e para isso analisamos dois modelos distintos: um fenomenológico, onde a equação mestra é deduzida adicionando-se os decaimentos do átomo e do campo independentemente da interação entre eles, e outro microscópico, onde a equação mestra é deduzida considerando-se a interação entre o átomo e o campo. Investigamos, então, o que acontece quando se tem dois átomos interagindo com o mesmo campo na cavidade, analisando, por exemplo, a geração "espontânea" de correlações entre os átomos mediada pelo campo, isto é, assumindo que todos os subsistemas (átomo e campo) estão inicialmente no seus estados fundamentais, nós estudamos a dinâmica das correlações geradas entre os átomos. Para quantificar essas correlações utilizamos medidas de discórdia quântica e emaranhamento de formação.

Abstract

The Rabi model is the most complete one has to describe the interaction between radiation and matter. However, as it is difficult to obtain the exact solution to this model, many of recent atom-field studies have used the Jaynes-Cummings model, which eliminates the "counter rotating" terms from the Rabi Hamiltonian in an approach known as "rotating wave approximation". This approach was very precise to describe many experiments in quantum optics area in the past two decades, especially in the context of cavity quantum electrodynamics, where the atom-field coupling g is very weak compared to the atomic transition frequency ω_0 and the cavity field frequency ω_c . However, in recent experiments in the context of circuit quantum electrodynamics, the atom-field coupling can be comparable to the atom and field frequencies so that the rotating wave approximation is no longer valid. A first goal of the present work is to examine the validity of the rotating-wave approximation in the context of circuit quantum electrodynamics.

We also take into account the dissipation of the system, and to do that we have analyzed two different models: a phenomenological approach where the master equation is derived by adding the free decay of the atom and the field, regardless of the interaction between them, and another microscope, where the master equation is derived by taking into account the interaction between the atom and the field. We then investigate what happens when one has two atoms interacting with the same field in the cavity, considering, for example, the "spontaneous" generation of correlations between the atoms mediated by the field, that is, assuming initially all subsystems (atoms and field) in their ground states, we study the dynamics of correlations generated between the atoms. To quantify those correlations we employ measures as quantum discord and entanglement of formation.

Lista de Figuras

Figura 1: Representação esquemática de uma cavidade óptica. Um feixe de laser é direcionado para o interior da cavidade, onde interage com o átomo - p. 2

Figura 2: Aparato utilizado em experimentos de Eletrodinâmica Quântica de Cavidades no regime de micro-ondas - p.2

Figura 3: Representação esquemática de um guia de ondas coplanar, utilizado na implementação de CQED através de circuitos supercondutores - p.3

Figura 4: (a): Representação de uma caixa de pares de Cooper (qubit de carga); (b): Representação de uma corrente interrompida por três junções Josephson (qubit de fluxo) - p.4

Figura 5: Gráfico do número médio de fótons (a) e da população atômica (b) em função de ωt , usando o modelo de Rabi e a equação mestra microscópica, para $\Delta = 0$, $\gamma = 0$, $\kappa = 0,5\omega$ e $g = \omega$ (linha vermelha tracejada), $g = 0,75\omega$ (linha verde sólida) e $g = 0,35\omega$ (linha azul pontilhada) - p. 28

Figura 6: Gráficos da evolução temporal do número médio de fótons na cavidade e da população atômica, usando a equação mestra microscópica e o modelo de Jaynes Cummings, para $\Delta = 0$, $\gamma = 0$, $\kappa = 0,5\omega$, $g = \omega$ (linha vermelha tracejada) e $g < \omega$ (linha azul sólida) - p.29

Figura 7: Gráfico das 5 primeiras autoenergias do Hamiltoniano de Jaynes Cummings - p.30

Figura 8: Gráficos da evolução temporal do número médio de fótons na cavidade (a) e da população atômica (b), usando a equação mestra microscópica e o modelo de Rabi, para $\Delta = 0$, $\gamma = 0$, $\kappa = 0,5\omega$, $g = \omega$ (linha vermelha tracejada), $g = 0,75\omega$ (linha verde sólida) e $g = 0,35\omega$ (linha azul pontilhada). No inset, os gráficos em função de g - p.31

Figura 9: Gráficos da evolução temporal do número médio de fótons na cavidade (a) e da população atômica (b), usando a equação mestra microscópica e comparando os modelos de Rabi (linha verde sólida) e Jaynes-Cummings (linha vermelha tracejada), usando $\Delta = 0$, $\gamma = 0$, $\kappa = 0,5\omega$ e $g = \omega$ - p.31

Figura 10: Gráficos da evolução temporal do número médio de fótons na cavidade (a) e da população atômica (b), usando a equação mestra fenomenológica e o modelo de Rabi, para $\Delta = 0$, $\gamma = 0$, $\kappa = 0,5\omega$, $g = \omega$ (linha vermelha tracejada), $g = 0,75\omega$ (linha

verde s3lida) e $g = 0,35\omega$ (linha azul pontilhada) - p.32

Figura 11: Gr3ficos da evolu33o temporal do n3mero m3dio de f3tons na cavidade (a) e da popula33o at3mica (b), usando o modelo de Rabi e comparando as equa33es mestras fenomenol3gica (linha azul pontilhada) e microsc3pica (linha vermelha s3lida), para $\Delta = 0$, $\gamma = 0$, $\kappa = 0,5$ e $g = \omega$ - p.33

Figura 12: Gr3ficos da evolu33o temporal do n3mero m3dio de f3tons na cavidade (a) e da popula33o at3mica (b), usando o modelo de Rabi e comparando as equa33es mestras fenomenol3gica (linha azul pontilhada) e microsc3pica (linha vermelha s3lida), para $\Delta = 0$, $\gamma = 0$, $\kappa = 0,5$ e $g = 0,35\omega$ - p.34

Figura 13: Gr3ficos do n3mero m3dio de f3tons (a) e da popula33o at3mica (b) em fun33o do acoplamento g , usando o modelo de Rabi, $\kappa = 0,5\omega$ e as equa33es mestras fenomenol3gica (linha azul pontilhada) e microsc3pica (linha vermelha s3lida) - p.35

Figura 14: Gr3ficos do n3mero m3dio de f3tons na cavidade (a) e da popula33o at3mica (b) em fun33o do acoplamento g , usando a equa33o mestra microsc3pica e os Hamiltonianos de Rabi (linha verde s3lida) e Bloch-Siegert (linha vermelha tracejada), para $\Delta = 0$, $\gamma = 0$ e $\kappa = 0,5\omega$ - p.36

Figura 15: Gr3ficos do n3mero m3dio de f3tons (a) e da popula33o at3mica (b) em fun33o do acoplamento g , usando o modelo de Rabi, $\kappa = 0,1\omega$ e as equa33es mestras fenomenol3gica (linha azul pontilhada) e microsc3pica (linha vermelha s3lida) - p.37

Figura 16: Gr3ficos da disc3rdia qu3ntica em fun33o de ωt , para $\kappa = 0,2\omega$, $\Delta = 0,01\omega$ e $g = \omega$ (linha vermelha tracejada), $g = 0,75\omega$ (linha verde s3lida), $g = 0,35\omega$ (linha azul pontilhada) e $g = 0,25\omega$ (linha preta tracejada e pontilhada), e da disc3rdia qu3ntica em fun33o do acoplamento g (inset), utilizando as equa33es mestras (a) microsc3pica e (b) fenomenol3gica - p.41

Figura 17: Gr3ficos da disc3rdia qu3ntica em fun33o de ωt , para $g = 0,35\omega$, $\Delta = 0,01\omega$ e $\kappa = \omega$ (linha vermelha tracejada), $\kappa = 0,5\omega$ (linha verde s3lida) e $\kappa = 0,1\omega$ (linha azul pontilhada), e da disc3rdia em fun33o de κ (inset), utilizando as equa33es mestras (a) microsc3pica e (b) fenomenol3gica - p.42

Figura 18: Gr3fico da disc3rdia qu3ntica em fun33o do tempo, utilizando o modelo de Rabi, para $g = 0,35\omega$, $\kappa = 0,2\omega$, $\gamma = 0$, e usando as equa33es mestras fenomenol3gica (linha azul pontilhada) e microsc3pica (linha vermelha s3lida) - p.43

Figura 19: Gráfico da discórdia em função de g , para $\kappa = 0,2\omega$, usando as equações mestras microscópica (linha vermelha sólida) e fenomenológica (linha azul pontilhada) - p.44

Figura 20: Gráficos do emaranhamento de formação em função de ωt , para $\kappa = 0,2\omega$, $\Delta = 0,01\omega$ e $g = \omega$ (linha vermelha tracejada), $g = 0,75\omega$ (linha verde sólida), $g = 0,35\omega$ (linha azul pontilhada) e $g = 0,25\omega$ (linha preta tracejada e pontilhada), e do emaranhamento de formação em função do acoplamento g (inset), utilizando as equações mestras microscópica (a) e fenomenológica (b) - p.45

Figura 21: Gráficos do emaranhamento de formação em função de ωt , para $g = 0,35\omega$, $\Delta = 0,01\omega$ e $\kappa = \omega$ (linha vermelha tracejada), $\kappa = 0,5\omega$ (linha verde sólida) e $\kappa = 0,1\omega$ (linha azul pontilhada), e do emaranhamento de formação em função da constante κ (inset), utilizando as equações mestras (a) microscópica e (b) fenomenológica - p.45

Figura 22: Gráfico da discórdia em função de ωt , para $g = 0,35\omega$ e $\kappa = 0,2\omega$, usando as equações mestras microscópica (linha vermelha sólida) e fenomenológica (linha azul pontilhada) - p.46

Figura 23: Gráfico do emaranhamento de formação em função de g , para $\kappa = 0,2\omega$, usando as equações mestras microscópica (linha vermelha sólida) e fenomenológica (linha azul pontilhada) - p.47

Sumário

Capítulo 1: Introdução	1
Capítulo 2: Interação radiação-matéria: os modelos de Rabi e Jaynes-Cummings....	7
Capítulo 3: Equações Mestras	12
3.1 A equação mestra em uma abordagem fenomenológica.....	13
3.2 Derivação Microscópica da Equação Mestra.....	15
3.3 Cálculo numérico.....	25
Capítulo 4: Análise do número médio de fótons em uma cavidade com um átomo..	27
Capítulo 5: Interação com dois átomos.....	38
5.1 Correlações quânticas	38
5.2 Resultados obtidos.....	40
Conclusão.....	49
Referências bibliográficas.....	51
Apêndice A: O operador densidade.....	55
Apêndice B: Termos dissipativos da equação mestra fenomenológica.....	59
B.1 Dissipação apenas no campo.....	59
B.2 Dissipação apenas no átomo.....	61

Capítulo 1

Introdução

A compreensão que se tem sobre a natureza da luz e suas aplicações tecnológicas tem desempenhado um papel importante ao longo do desenvolvimento dos conceitos da Física. Pudemos observar, nas últimas décadas, muitos avanços no campo da Óptica Quântica, sobretudo no que se refere à interação da luz com a matéria. Tal interação é o objeto de análise desse trabalho.

Experimentalmente, a interação átomo-campo é estudada, por exemplo, dentro da Eletrodinâmica Quântica de Cavidades (*Cavity QED*), citada como CQED no restante desse texto. A CQED pode ser aplicada no regime óptico ou de microondas. A versão óptica, representada esquematicamente na Figura 1, consiste em direcionar um feixe de laser para o interior da cavidade formada por dois espelhos e, então, monitorar as mudanças na transmissão da cavidade causadas pela interação com os átomos. Para que se obtenha uma separação eficiente do mundo externo, os espelhos utilizados devem ser de boa qualidade, de modo que a reflexão seja a máxima possível. O campo é quantizado dentro da cavidade como um conjunto de osciladores harmônicos. Nesse caso é possível também analisar a emissão espontânea dos átomos em modos não confinados pela cavidade. Para observar alguns efeitos descritos teoricamente, o acoplamento entre o átomo e o campo deve ser muito maior que os tempos de relaxação da cavidade e do átomo. Tais condições, embora simples de serem formuladas, eram difíceis de se obter experimentalmente, sendo caracterizadas como "regime de acoplamento forte" [1].

No regime de microondas [2] um ressonador supercondutor tridimensional é usado para acoplar fótons às transições atômicas. Utilizam-se aqui átomos de Rydberg. A Figura 2, retirada da referência [2], é a representação do aparato usado em experimentos de CQED no regime de microondas. Átomos de Rydberg circulares são produzidos em B pela excitação de um feixe de átomos de rubídio emitido em O. Eles cruzam, um por um, a cavidade supercondutora C e são detectados em D. Durante o experimento, a temperatura é mantida em torno de 1K para minimizar os ruídos de origem térmica.

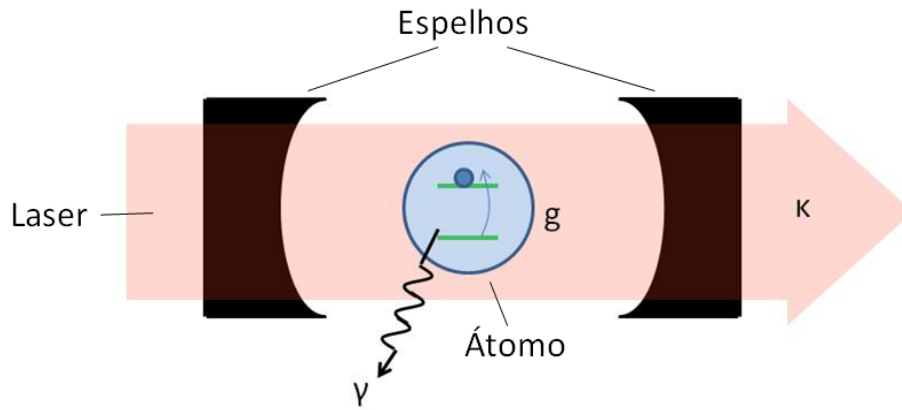


Figura 1: Representação esquemática de uma cavidade óptica. Um feixe de laser é direcionado para o interior da cavidade, onde interage com o átomo.

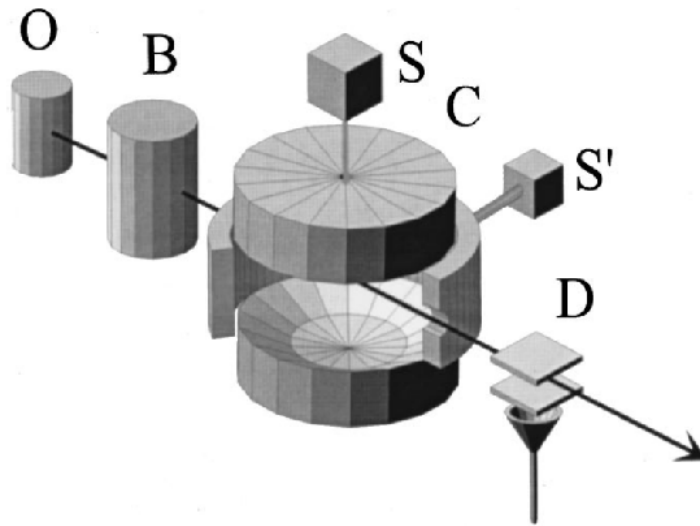


Figura 2: Aparato utilizado em experimentos de Eletrodinâmica Quântica de Cavidades no regime de microondas. Figura retirada da referência [2]

Os átomos de Rydberg em estados "circulares" [3] são átomos cujos estados são descritos por um número quântico principal grande e números quânticos orbitais e magnéticos máximos. Nos experimentos são usados átomos com número quântico principal da ordem de 50. Já a cavidade é um ressonador feito com dois espelhos semiesféricos de nióbio cuidadosamente polidos. Uma fonte S pode ser usada para injetar na cavidade um pequeno campo coerente. S', por sua vez, representa uma fonte clássica de microondas. Esse tipo de experimento tem ganhado destaque recentemente, sobretudo após o anúncio do prêmio

Nobel de Física de 2012 para o cientista francês Serge Haroche, pioneiro no estudo de tais sistemas, e também para o norte-americano David Wineland.

Outros autores, entretanto, têm proposto a implementação de CQED através de circuitos supercondutores [4, 5, 6, 7]. Nessa abordagem, um guia de ondas coplanar (Figura 3) faz o papel da cavidade e um *qubit* supercondutor representa o átomo. Frequentemente, esse átomo artificial é obtido usando-se caixas de pares de Cooper (*qubit* de carga - Figura 4a) ou um *loop* supercondutor interrompido por uma ou três junções Josephson (*qubit* de fluxo - Figura 4b).

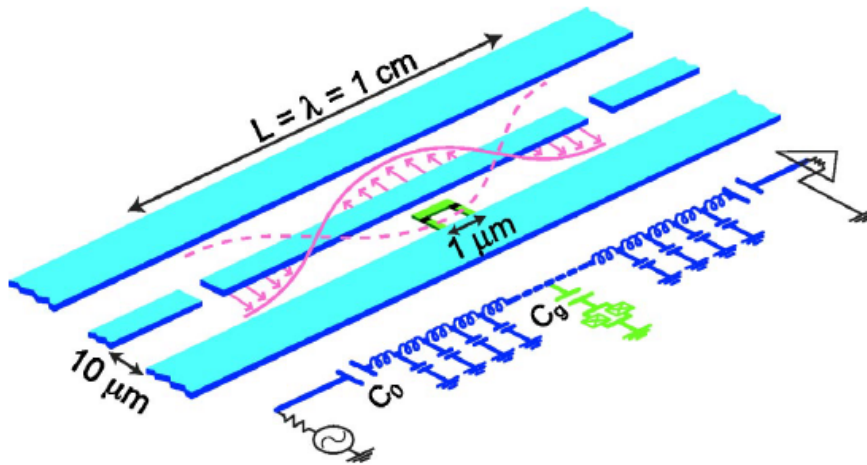


Figura 3: Representação esquemática de um guia de ondas coplanar, utilizado na implementação de CQED através de circuitos supercondutores. Figura retirada da referência [4]

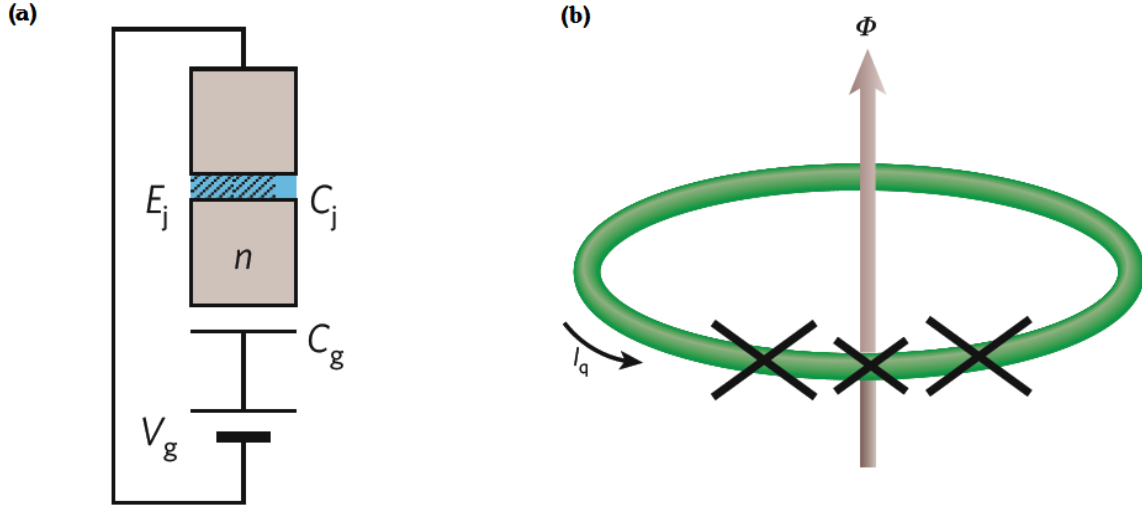


Figura 4: (a): Representação de uma caixa de pares de Cooper (qubit de carga). E_j e C_j são a energia de acoplamento Josephson e a autocapacitância, respectivamente, e n é o número de pares de Cooper na ilha supercondutora, que é acoplada a uma fonte de voltagem V_g via um capacitor com capacitância C_g ; (b): Representação de uma corrente interrompida por três junções Josephson (qubit de fluxo). I_q é a supercorrente que circula no *loop* supercondutor. Imagens retiradas da referência [6].

Na Figura 3 vemos o esquema de uma linha de transmissão unidimensional e o circuito LC que a representa. Na figura 4 vemos dois modelos de *qubits*: o modelo de caixas de pares de Cooper (Figura 4-a) tem como principal componente uma ilha supercondutora composta por n pares de Cooper e conectada a um terra por uma junção Josephson; o modelo de *qubit* de fluxo consiste em um *loop* supercondutor interrompido por uma ou três junções Josephson (Figura 4-b). Ambos modelos podem ser tratados como sistemas átomo-cavidade, sendo a cavidade representada pelo guia de ondas coplanar e os átomos representados pelos átomos artificiais.

Os principais parâmetros que caracterizam um sistema CQED são a frequência de ressonância da cavidade (ω), a frequência de transição atômica (ω_0) e o acoplamento entre o átomo e o campo (g). Além desses também identificamos a taxa de decaimento da cavidade (κ) e a taxa de decaimento do átomo (γ). Em nossas análises, usamos sempre $\gamma = 0$. A tabela abaixo, cujos dados foram retirados das referências [4, 8, 9], mostra os valores aproximados de $\omega/2\pi$, $g/2\pi$ e $\kappa/2\pi$ para sistemas CQED nos regimes óptico e de

microondas, e também na implementação via circuitos.

Parâmetro	Símbolo	Óptico	Microondas	Circuitos
Frequência da cavidade	$\omega/2\pi$	350 THz	51 GHz	7 GHz
Frequência de Rabi do vácuo	$g/2\pi$	110 MHz	51 KHz	150 MHz
Decaimento na cavidade	$\kappa/2\pi$	8 GHz	0,2 MHz	0,9 MHz

A implementação de CQED através de circuitos é capaz de produzir acoplamentos mais fortes em relação à frequência do campo na cavidade do que os outros sistemas. A partir da tabela acima é possível observar que, para os experimentos com circuitos, g/ω é da ordem de 10^{-2} , enquanto que para os regimes óptico e de microondas é da ordem de 10^{-4} e 10^{-6} , respectivamente.

O fato de ser possível atingir acoplamentos fortes permitiu a observação de fenômenos que não eram tão evidentes nos outros regimes, como a assimetria nos picos dos gráficos de transmissão da cavidade em função da dessintonia entre a frequência do campo de prova (ω_p) e do modo da cavidade (ω_c) [9]. O avanço nessa área possibilitou, também, a simulação do efeito Casimir dinâmico [10] em microcavidades semicondutoras [11, 12, 13] ou em experimentos de Eletrodinâmica Quântica de Circuitos [14].

Nesse trabalho, inicialmente são apresentados os dois modelos mais utilizados para se entender a interação átomo-campo: o modelo de Rabi e o modelo de Jaynes-Cummings, sendo o segundo uma aproximação do primeiro. Estamos interessados em ver a validade dessa aproximação.

Em seguida é feita uma análise sobre o acoplamento de um sistema átomo + campo com um reservatório. A dinâmica do sistema é dada por uma equação para seu operador densidade, a "equação mestra". Discutimos duas deduções diferentes para a equação mestra: uma fenomenológica e uma microscópica, e o regime em que cada uma é válida. Veremos que, para um regime de acoplamento forte, a equação fenomenológica, ou "padrão", deixa de ser válida, e o formalismo microscópico é exigido para explicar os fenômenos observados.

O estudo desses modelos é importante para se ter uma correta compreensão dos fenômenos que ocorrem nesse sistema, sobretudo à luz dos experimentos mais recentes nessa área. Têm sido sugeridas aplicações desses sistemas no desenvolvimento de novas tecnologias, principalmente na área de processamento e armazenamento da informação, e esse

estudo pretende acrescentar informações importantes para tais aplicações.

Por fim, são mostrados os resultados obtidos, centrados no estudo de correlações quânticas e do número médio de fótons dentro de uma cavidade.

Capítulo 2

Interação radiação-matéria: os modelos de Rabi e Jaynes-Cummings

O primeiro modelo a ser descrito aqui foi proposto por I. I. Rabi [15] para descrever a interação entre radiação e matéria. Tal modelo é representado pelo Hamiltoniano que inclui termos referentes ao campo de radiação, ao átomo e à interação entre os dois [16].

$$\hat{H} = \hat{H}_C + \hat{H}_A + \hat{H}_I . \quad (1)$$

A parte do Hamiltoniano referente ao campo, quando se ajustam os parâmetros para que apenas um dos modos do campo, de frequência ω , seja excitado, é dada por

$$\hat{H}_C = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) , \quad (2)$$

onde $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ é o operador número, cujos autoestados são os estados de número, ou estados de Fock, $|n\rangle$, $n = 0, 1, 2, \dots$. No restante do texto, por simplicidade de notação, omitiremos o circunflexo sobre os operadores.

Desprezando-se a energia do ponto zero, obtemos o Hamiltoniano do campo:

$$H_C = \hbar\omega a^\dagger a . \quad (3)$$

Já o termo que representa a energia do átomo pode ser obtido considerando-se um átomo do tipo hidrogênio, cujos níveis são determinados por

$$H_A = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}), \text{ com } H_A |\phi_i\rangle = E_i |\phi_i\rangle; i = 1, 2, \dots \quad (4)$$

Aqui, E_i são as auto energias e $|\phi_i\rangle$ os autoestados. O conjunto $\{|\phi_i\rangle\}$ forma uma base ortonormal, sendo válida a relação de completeza $\mathbb{I} = \sum_i |\phi_i\rangle \langle\phi_i|$. Assim,

$$H_A = \mathbb{I} H_A \mathbb{I} = \sum_{i,j} |\phi_i\rangle \langle\phi_i| H_A |\phi_j\rangle \langle\phi_j| = \sum_i E_i |\phi_i\rangle \langle\phi_i| . \quad (5)$$

Estamos interessados apenas na transição entre dois níveis do átomo, $|\phi_1\rangle$ e $|\phi_2\rangle$, de modo que

$$H_A = E_1 |\phi_1\rangle \langle\phi_1| + E_2 |\phi_2\rangle \langle\phi_2| , \quad (6)$$

onde a diferença de energia entre os níveis é $E_2 - E_1 = \hbar\omega_0$, com ω_0 sendo a frequência de transição entre os níveis.

Estabelecendo uma energia média como referência $E_m = \frac{E_1+E_2}{2}$, escreve-se

$$\begin{aligned} E_2 &= E_m + \frac{\hbar\omega_0}{2}; \\ E_1 &= E_m - \frac{\hbar\omega_0}{2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Desse modo, a equação (6) torna-se:

$$H_A = E_m \{|\phi_1\rangle\langle\phi_1| + |\phi_2\rangle\langle\phi_2|\} + \frac{\hbar\omega_0}{2} \{|\phi_2\rangle\langle\phi_2| - |\phi_1\rangle\langle\phi_1|\}. \quad (8)$$

Colocando o zero de energia sobre E_m e renomeando $|\phi_1\rangle = |g\rangle$ e $|\phi_2\rangle = |e\rangle$,

$$H_A = \frac{\hbar\omega_0}{2} \{|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|\} = \frac{\hbar\omega_0}{2} (\sigma_{ee} - \sigma_{gg}). \quad (9)$$

Se $|e\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $|g\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, pode-se obter a matriz de Pauli:

$$|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma_z. \quad (10)$$

Logo, temos a parte do Hamiltoniano referente ao átomo:

$$H_A = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z. \quad (11)$$

O termo de interação átomo-campo é obtido a partir de uma aproximação de dipolo, que é válida quando o comprimento de onda do campo é muito maior que o raio atômico[17].

A interação então fica

$$H_I = -\vec{d} \cdot \vec{E} = -e \left(\vec{r} \cdot \vec{E} \right). \quad (12)$$

Considerando também aqui um átomo de dois níveis e um único modo do campo, aprisionado dentro de uma cavidade de volume V , obtém-se [17]:

$$H_I = \hbar \{g a \sigma_+ + g^* a^\dagger \sigma_+ + g a \sigma_- + g^* a^\dagger \sigma_-\}, \quad (13)$$

onde a constante de acoplamento g é dada por

$$g(\vec{r}) = -i \sqrt{\frac{\omega}{2\varepsilon_0 \hbar V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{d}_{eg} \cdot \hat{\varepsilon}, \quad (14)$$

onde $\vec{d} = e \vec{r}$ é o operador dipolo atômico, \vec{k} é o vetor de onda do modo do campo eletromagnético, $\hat{\varepsilon}$ é a polarização do campo e ε_0 é a permissividade elétrica do vácuo.

Assumindo g real, a parte da interação, então, fica:

$$H_I = \hbar g (a + a^\dagger) (\sigma_+ + \sigma_-). \quad (15)$$

Assim, obtém-se o Hamiltoniano total (1), conhecido como Hamiltoniano de Rabi:

$$H = \hbar \omega_c a^\dagger a + \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_z + \hbar g (a \sigma_+ + a^\dagger \sigma_- + a \sigma_- + a^\dagger \sigma_+) . \quad (16)$$

Quando se olha para a parte da interação nesse Hamiltoniano, é possível notar termos de dois tipos: aqueles conhecidos como girantes ($a \sigma_+$ e $a^\dagger \sigma_-$) e os contragirantes ($a \sigma_-$ e $a^\dagger \sigma_+$) [18]. Os primeiros representam, respectivamente, a absorção de um fóton pelo átomo, com a transição do estado fundamental para o excitado, e a emissão de um fóton pelo átomo, com a transição do estado excitado para o fundamental. Já os termos contragirantes causam estranheza à primeira vista, sendo chamados de não conservativos por muitos autores, pois aparentemente implicam em uma violação na conservação da energia [16]. Como exemplo dessa suposta violação, consideremos um átomo que esteja no estado fundamental $|g\rangle$ no interior de uma cavidade sem fóton algum (campo no estado de vácuo $|0\rangle$). O termo contragirante $a^\dagger \sigma_+$ leva a uma situação aparentemente absurda, possibilitando a criação de um fóton a partir do vácuo: $|g\rangle \otimes |0\rangle \longrightarrow |e\rangle \otimes |1\rangle$. Entretanto, pela equação de Heisenberg, vemos:

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\theta, H] + \frac{\partial \theta}{\partial t} . \quad (17)$$

Fazendo $\theta = H(0)$,

$$\frac{dH}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, H] = 0 . \quad (18)$$

O resultado mostra que a energia é sim uma constante de movimento. O aparente paradoxo é desfeito quando tratamos a energia total do sistema não como sendo apenas a energia do átomo mais a energia do campo, mas acrescentando a energia de interação entre o átomo e o campo. Desse modo, a energia total no Hamiltoniano de Rabi é conservada.

O modelo de Rabi é o mais completo e adequado para se descrever a interação entre átomo e campo. Entretanto, as soluções analíticas para esse modelo [19] são sofisticadas e de difícil utilização, e por isso muitos trabalhos recentes têm recorrido ao modelo

de Jaynes-Cummings [20], que elimina do Hamiltoniano do sistema os termos “contra-girantes”, em uma aproximação conhecida como “Aproximação de Onda Girante”. Tal aproximação mostrou-se bastante precisa para descrever muitos experimentos em óptica quântica nas últimas duas décadas, em especial na área de eletrodinâmica quântica de cavidades, onde o acoplamento átomo-campo g é muito fraco comparado às frequências de transição atômica ω_0 e do campo na cavidade ω . No entanto, em experimentos recentes no contexto de eletrodinâmica quântica de circuitos [9, 7] tem sido possível obter valores para o acoplamento átomo-campo comparáveis às frequências do átomo e/ou do campo, de modo que a aproximação de onda girante deixa de ser válida.

Para compreender melhor essa aproximação, vamos escrever o Hamiltoniano de Rabi na representação de interação, usando para isso uma transformação unitária:

$$H_I = U_0^\dagger H U_0 - H_0 , \quad (19)$$

onde

$$U_0 = e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \quad (20)$$

e

$$H_0 = \hbar\omega a^\dagger a + \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z . \quad (21)$$

Procedendo dessa forma, obtemos:

$$H_I = \hbar g (a\sigma_+ e^{i\Delta t} + a^\dagger\sigma_- e^{-i\Delta t}) + \hbar g (a\sigma_- e^{i\bar{\omega}t} + a^\dagger\sigma_+ e^{-i\bar{\omega}t}) , \quad (22)$$

onde $\Delta = \omega - \omega_0$ e $\bar{\omega} = \omega + \omega_0$.

A Aproximação de Onda Girante consiste em desprezar os termos mais oscilantes desse Hamiltoniano. Através de uma média temporal, verifica-se que os termos do segundo parêntese podem ser negligenciados quando $|\Delta| \ll \bar{\omega}$, se $g\langle a \rangle / \bar{\omega} \ll 1$, onde $\langle a \rangle \approx \sqrt{\bar{n}}$, onde \bar{n} é o número médio de fótons do campo.

O Hamiltoniano na representação de interação então fica:

$$H_I = \hbar g (a\sigma_+ e^{i\Delta t} + a^\dagger\sigma_- e^{-i\Delta t}) . \quad (23)$$

Aplicando-se a transformação inversa, obtem-se o Hamiltoniano na representação de Schrödinger com a aproximação de onda girante:

$$H = \hbar\omega a^\dagger a + \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z + \hbar g (a\sigma_+ + a^\dagger\sigma_-) , \quad (24)$$

que é conhecido como Hamiltoniano de Jaynes-Cummings [17].

Esse Hamiltoniano pode ser resolvido analiticamente de maneira simples. Os autoestados, com as respectivas autoenergias, são os seguintes:

$$\begin{aligned}
|\psi_0\rangle &= |g, 0\rangle \quad \longrightarrow \quad E_0 = -\frac{\hbar\omega_0}{2} ; \\
|\psi_n^+\rangle &= \cos\theta_n |e, n-1\rangle - \sin\theta_n |g, n\rangle \quad \longrightarrow \quad E_n^+ = \hbar \left[(n-1)\omega + \frac{\omega_0}{2} \right] - \frac{\hbar}{2} (\Omega_n - \Delta) ; \\
|\psi_n^-\rangle &= \sin\theta_n |e, n-1\rangle + \cos\theta_n |g, n\rangle \quad \longrightarrow \quad E_n^- = \hbar \left[n\omega - \frac{\omega_0}{2} \right] + \frac{\hbar}{2} (\Omega_n - \Delta) ;
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
\Omega_n &= \sqrt{\Delta^2 + 4g^2n} ; \\
\sin\theta_n &= \frac{\Omega_n - \Delta}{\sqrt{(\Omega_n - \Delta)^2 + 4g^2n}} ; \\
\cos\theta_n &= \frac{2g\sqrt{n}}{\sqrt{(\Omega_n - \Delta)^2 + 4g^2n}} .
\end{aligned}$$

Muitos trabalhos mais recentes, entretanto, têm obtido um regime de parâmetros onde a aproximação de onda girante [21, 22, 23] pode não ser mais válida, e outros têm proposto aproximações analíticas para o Hamiltoniano de Rabi [7, 19, 24, 25, 26]. Alguns autores mostraram também que os termos contragirantes são responsáveis por vários fenômenos quânticos novos, como transições de fase quânticas [27] e geração de emaranhamento entre o átomo e a cavidade [14, 28].

Capítulo 3

Equações mestras

Os modelos teóricos descritos até agora são importantes para descrever o que acontece na interação entre a matéria e a radiação. Entretanto, uma consideração ainda resta a ser feita: em experimentos, os sistemas de interesse não são isolados, e sim abertos, interagindo com outros sistemas. Aqui trabalharemos com um sistema S fracamente acoplado a um reservatório R, tendo este um número infinito de graus de liberdade.

Diferentemente do que ocorre com os sistemas fechados, a dinâmica quântica de um sistema aberto geralmente não pode ser representada por uma evolução temporal unitária. Na maioria dos casos, torna-se apropriado formular tal dinâmica através de uma equação de movimento para seu operador densidade, a chamada "equação mestra".

No caso em que um sistema está em um estado de mistura - isto é, pode assumir qualquer estado $|\psi_j\rangle$, com $j = 0, 1, \dots$ - toda informação pode ser encontrada no operador densidade [29, 30]:

$$\rho = \sum_{j=0}^{\infty} P_{|\psi_j\rangle} |\psi_j\rangle \langle \psi_j| = \sum_{j=0}^{\infty} \rho_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| . \quad (25)$$

Nota-se que este operador só possui os elementos diagonais do operador na base $\{|\psi_j\rangle\}$, e podemos facilmente reconhecer que cada um desses elementos $\langle \psi_m | \hat{\rho} | \psi_m \rangle = P_{|\psi_m\rangle} = \rho_m$ representa a probabilidade $P_{|\psi_m\rangle}$ de se encontrar o sistema no estado $|\psi_m\rangle$. A soma de todas as probabilidades deve ser, claramente, 1. Logo, o traço de $\hat{\rho}$ é igual à unidade.

$$Tr \rho = \sum_{m=0}^{\infty} \langle \psi_m | \rho | \psi_m \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} P_{|\psi_m\rangle} = 1 . \quad (26)$$

Podemos também reescrever o operador densidade (25) na base de autoestados do Hamiltoniano do sistema: $\{|u_m\rangle\}$. Nessa base, $\rho = \sum_{n,m} \rho_{nm} |m\rangle \langle n|$. O significado físico dos coeficientes ρ_{mn} da matriz densidade nessa base também merece destaque: os termos diagonais (ρ_{mm}) representam a probabilidade de se encontrar o sistema em um determinado estado ($|u_m\rangle$), e são chamados de "populações". Já os termos "cruzados" expressam os efeitos da interferência entre $|u_m\rangle$ e $|u_n\rangle$ quando $|\psi_k\rangle$ é uma superposição linear coerente desses estados. Por isso, esses coeficientes são chamados de "coerência".

Consideremos agora dois sistemas (1) e (2) acoplados, gerando um sistema global (1) + (2). O espaço dos estados é o produto tensorial $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$. O operador densidade ρ do sistema global é um operador que atua em \mathcal{E} . A construção de um operador ρ_1 (ou ρ_2), que atua apenas em \mathcal{E}_1 (ou \mathcal{E}_2) é feita a partir do conceito de traço parcial.

Se $\{|u_n(1)\rangle\}$ forma uma base de \mathcal{E}_1 , e $\{|v_p(2)\rangle\}$ forma uma base de \mathcal{E}_2 , então $\{|u_n(1)\rangle \otimes |v_p(2)\rangle\}$ forma uma base de \mathcal{E} . Nessa situação, os elementos de matriz do operador ρ_1 são dados por:

$$\langle u_n(1) | \rho_1 | u_m(1) \rangle = \sum_p [\langle u_n(1) | \langle v_p(2) | \rho | u_m(1) \rangle | v_p(2) \rangle] , \quad (27)$$

isto é, ρ_1 é obtido através de ρ por um traço parcial sobre as variáveis de (2):

$$\rho_1 = Tr_{(2)} \rho . \quad (28)$$

Pode-se também verificar que:

$$Tr \rho = Tr_{(1)} (Tr_{(2)} \rho) = Tr_{(2)} (Tr_{(1)} \rho) . \quad (29)$$

Para um sistema que é uma mistura de estados, a evolução do operador densidade é dada pela equação de Liouville-von Neumann:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] . \quad (30)$$

No Apêndice A pode ser encontrada uma discussão mais detalhada sobre o operador densidade. De posse dessas ferramentas, passamos agora à análise da equação que representa a dinâmica de um sistema aberto. No restante desse texto consideramos $\hbar = 1$.

3.1 A equação mestra em uma abordagem fenomenológica

Para um sistema em contato com um reservatório, a equação mestra fenomenológica pode ser escrita da seguinte forma [31]:

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -i [H(t), \rho_S(t)] + \mathcal{L}(\rho_S(t)) . \quad (31)$$

Aqui, toda a informação acerca do reservatório está contida no super operador \mathcal{L} , que é dado por:

$$\mathcal{L}(\rho_S) = \mathcal{L}_a(\rho_S) + \mathcal{L}_f(\rho_S) + \mathcal{L}_{da}(\rho_S) + \mathcal{L}_{df}(\rho_S) , \quad (32)$$

onde:

$\mathcal{L}_a(\rho_S) = \gamma(n_a + 1)\mathcal{D}[\sigma_-]\rho_S + \gamma(n_t)\mathcal{D}[\sigma_+]\rho_S$ descreve a interação do átomo com um reservatório térmico. $\gamma/2$ é a taxa de decaimento atômico e n_a é o número médio de fótons térmicos devido à interação do átomo com o reservatório;

$\mathcal{L}_f[\rho_S] = \kappa(n_f + 1)\mathcal{D}[a]\rho_S + \kappa(n_t)\mathcal{D}[a^\dagger]\rho_S$ descreve a interação do campo com o reservatório térmico. $\kappa/2$ é a constante de decaimento do campo, e n_f é o número médio de fótons térmicos devido à interação do campo com o reservatório;

$\mathcal{L}_{da}[\rho_S] = \gamma_{ph}\mathcal{D}[\sigma_z]\rho_S$ representa um reservatório de fase atuando no átomo. $\gamma_{ph}/2$ é a taxa de defasagem do átomo;

$\mathcal{L}_{df}[\rho_S] = \Gamma_{ph}\mathcal{D}[n]\rho_S$ representa um reservatório de fase atuando no campo. $\Gamma_{ph}/2$ é a taxa de defasagem do campo;

$$\text{Em todos os casos, } \mathcal{D}[L]\rho_S \equiv L\rho_S L^\dagger - \frac{1}{2}L^\dagger L\rho_S - \frac{1}{2}\rho_S L^\dagger L.$$

A obtenção da equação (31) leva em consideração as seguintes aproximações [32]:

1. Aproximação de Born: considerando o sistema fracamente interagente com o reservatório, podemos usar a seguinte aproximação: $\rho_{S+R}(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_R(t)$, $\rho_R(t) \approx \rho_R(0) \equiv \rho_R$.
2. Aproximação de Markov: a evolução no tempo t não depende do que aconteceu até t' ("falta de memória"). Consideramos, então, $\rho_S(t) \approx \rho_S(t')$. Podemos pensar na evolução do sistema: $\rho_S(t)$ varia muito lentamente com relação à troca de energia entre os infinitos modos do reservatório. Ou ainda, H oscila muito rápido, em comparação com a evolução de ρ_S , de modo que $\rho_S(t')$ é constante se comparado com $H(t')$. A condição básica para se fazer essa aproximação é que as funções de correlação do reservatório $\langle B_\alpha^\dagger(t) B_\beta(0) \rangle$ decaiam em um tempo suficientemente pequeno comparado ao tempo de relaxação, o que acontece quando se considera um reservatório infinitamente grande.
3. Aproximação de onda girante: elimina da equação mestra termos que oscilam muito rápido em comparação com a escala típica de tempo da evolução do sistema S .

No tratamento fenomenológico considera-se o decaimento do átomo independentemente da presença do campo, e o decaimento do campo independentemente da presença do átomo. Então, *assume-se* que, mesmo quando o átomo e o campo interagem, seus decaimentos individuais permanecem inalterados. No Apêndice B deduzimos as equações

mestras que descrevem o decaimento do átomo e do campo quando estes encontram-se sozinhos.

3.2 Derivação Microscópica da Equação Mestra

Para essa dedução, seguiremos o roteiro apresentado em [32]. As aproximações utilizadas aqui são as mesmas mencionadas na seção anterior.

Inicialmente, consideramos um sistema átomo + campo, e um reservatório modelado como um conjunto de osciladores harmônicos. O operador densidade e o hamiltoniano totais são dados por:

$$\rho = \rho_{S+R} \quad \text{e} \quad (33)$$

$$H = H_S + H_R + H_I, \quad (34)$$

onde H_S , H_R e H_I são os Hamiltonianos do sistema, do reservatório e da interação entre eles, respectivamente.

Para encontrarmos a evolução temporal do operador densidade, fazemos, então, a transformação $\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t)$, onde $U(t) = e^{-iH_0t}$, com $H_0 = H_S + H_R$.

Na representação de interação, escrevemos a equação de Liouville-von Neumann (30):

$$\frac{d\rho_I(t)}{dt} = -i[H_I(t), \rho_I(t)]. \quad (35)$$

Doravante, por simplicidade, omitiremos o índice I em ρ_I :

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H_I(t), \rho(t)]. \quad (36)$$

Integrando formalmente essa equação,

$$\int_0^t \frac{d\rho}{dt'} dt' = -i \int_0^t [H_I(t'), \rho(t')] dt'; \quad (37)$$

$$\rho(t) = \rho(0) - i \int_0^t [H_I(t'), \rho(t')] dt'. \quad (38)$$

Para obter o operador densidade relativo ao sistema (ρ_S), no qual estamos interessados, basta tomar o traço parcial sobre as variáveis do reservatório:

$$\rho_S = Tr_R(\rho) \longrightarrow \rho_S(t) = Tr_R(U(t)\rho(0)U^\dagger(t)); \quad (39)$$

$$\rho_S(t) = \rho_S(0) - iT r_R \int_0^t [H_I(t'), \rho(t')] dt'. \quad (40)$$

Derivando no tempo, obtemos:

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -i \frac{d}{dt} \int_0^t T r_R([H_I(t'), \rho(t')]) dt' = -iT r_R[H_I(t), \rho(t)]. \quad (41)$$

Substituindo (38),

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -iT r_R \left[H_I(t), \left(\rho(0) - i \int_0^t [H_I(t'), \rho(t')] dt' \right) \right]; \quad (42)$$

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -iT r_R[H_I(t), \rho(0)] - \int_0^t T r_R[H_I(t), [H_I(t'), \rho(t')]] dt'. \quad (43)$$

Calculando o primeiro termo da equação (43): como o reservatório é considerado como um conjunto de osciladores, podemos escrever $\rho_R(0) = \rho_1(0) \otimes \rho_2(0) \otimes \dots \otimes \rho_k(0) = \prod_k \rho_k(0)$, onde k refere-se ao k -ésimo modo do reservatório.

A interação entre o sistema e o reservatório, então, fica:

$$\begin{aligned} H_I(t) &= A_S(t) \otimes B(t), \\ \text{com } B(t) &= \sum_k g_k \left(b_k(t) + b_k^\dagger(t) \right). \end{aligned} \quad (44)$$

Nesse caso, $A_S(t)$ é o operador do sistema e $B(t)$ é o operador do reservatório, ambos na representação de interação.

Para um reservatório térmico,

$$\rho_R = \prod_k \left(\sum_n P_n^k |n\rangle_k \langle n| \right), \quad (45)$$

sendo esses produtos tensoriais, e sendo P_n^k a distribuição térmica.

Calculamos, então $T r_R[H_I(t), \rho_0]$:

$$\begin{aligned} T r_R[H_I(t), \rho_0] &= T r_R(H_I \rho(0) - \rho(0) H_I) = \\ &= \prod_{k'} \sum_m \langle m| H_I \rho(0) |m\rangle_{k'} \\ &\quad - \prod_{k'} \sum_m \langle m| \rho(0) H_I |m\rangle_{k'}; \\ &= \prod_{k,k'} \sum_{n,m} \langle m| H_I \rho_S(0) \otimes P_n^k |n\rangle_k \langle n| m\rangle_{k'} \\ &\quad - \prod_{k,k'} \sum_{n,m} \langle m| \rho_S(0) H_I \otimes P_n^k |n\rangle_k \langle n| m\rangle_{k'}. \end{aligned} \quad (46)$$

Considerando que ${}_k \langle n | m \rangle_{k'} = \delta_{n,m} \delta_{k,k'}$, e usando (44):

$$\begin{aligned} Tr_R [H_I(t), \rho_0] &= \prod_k \sum_m P_m^k A_S(t) \rho_S(0) {}_k \langle m | B(t) | m \rangle_k \\ &\quad - \prod_k \sum_m P_m^k \rho_S(0) A_S(t) {}_k \langle m | B(t) | m \rangle_k, \end{aligned} \quad (47)$$

com

$${}_k \langle m | B(t) | m \rangle_k = {}_k \langle m | b_{k'}(t) + b_{k'}^\dagger(t) | m \rangle_k = 0 \quad (48)$$

e $b_{k'}(t) = b_{k'}(0) e^{-i\omega_k t}$.

Então,

$$Tr_R [H_I(t), \rho_0] = 0. \quad (49)$$

Logo, a equação (43) torna-se:

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = - \int_0^t Tr_R [H_I(t), [H_I(t'), \rho(t')]] dt'. \quad (50)$$

Considerando o sistema fracamente interagente com o reservatório, podemos usar a aproximação de Born: $\rho_{S+R}(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_R(t)$, $\rho_R(t) \approx \rho_R(0) \equiv \rho_R$.

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -Tr_R \int_0^t [H_I(t), [H_I(t'), \rho_S(t') \otimes \rho_R]] dt'. \quad (51)$$

Procedemos agora à aproximação de Markov, segundo a qual a evolução no tempo t não depende do que aconteceu até t' ("falta de memória"). Consideramos, portanto, $\rho_S(t) \approx \rho_S(t')$. Podemos pensar na evolução do sistema: $\rho_S(t)$ varia muito lentamente com relação à troca de energia entre os infinitos modos do reservatório.

Temos, assim,

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -Tr_R \int_0^t [H_I(t), [H_I(t'), \rho_S(t) \otimes \rho_R]] dt', \quad (52)$$

que é conhecida como a equação de Redfield. Essa equação é local no tempo, mas ainda não é uma equação markoviana, já que a evolução de $\rho_S(t)$ no tempo depende de uma escolha explícita das condições iniciais em $t = 0$.

Nesse ponto, efetuamos uma mudança de variáveis: $t' = t - s \implies dt' = -ds$, $t' = 0 \implies s = t$, $t' = t \implies s = 0$. A equação (52) então se torna:

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = Tr_R \int_t^0 [H_I(t), [H_I(t-s), \rho_S(t) \otimes \rho_R]] ds. \quad (53)$$

Invertendo os limites de integração,

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -Tr_R \int_0^t [H_I(t), [H_I(t-s), \rho_S(t) \otimes \rho_R]] ds . \quad (54)$$

Como $H_I(t)$ é uma função oscilante ($\sim e^{\pm i\omega t}$), teremos termos do tipo:

$$\begin{aligned} H_I(t) H_I(t-s) &\sim e^{\pm 2i\omega t} e^{\pm i\omega s} \quad \text{ou} \\ &\sim e^{\pm i\omega s} . \end{aligned} \quad (55)$$

No nosso caso, ω (frequência natural do sistema ou do reservatório) é muito grande comparado ao acoplamento com os modos do reservatório, e t é o tempo de evolução do sistema de interesse. Então, a integral $\int_0^t e^{\pm i\omega s} ds$ só será diferente de 0 para tempos muito curtos.

Desse modo, como o tempo de evolução do sistema (t) é muito grande se comparado ao tempo de correlação do sistema, podemos reescrever (54):

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} \simeq -Tr_R \int_0^\infty [H_I(t), [H_I(t-s), \rho_S(t) \otimes \rho_R]] ds , \quad (56)$$

que é a equação de Markov ou Born-Markov.

A terceira aproximação que fazemos é a aproximação de onda girante. O hamiltoniano de interação na representação de Schrödinger, na forma mais geral possível, é:

$$H_I = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes B_{\alpha} . \quad (57)$$

$A_{\alpha} \longrightarrow$ Operadores do sistema;

$B_{\alpha} \longrightarrow$ Operadores do reservatório (vide (44));

Como $H_I = H_I^\dagger$, temos $A_{\alpha} = A_{\alpha}^\dagger$ e $B_{\alpha} = B_{\alpha}^\dagger$.

Primeiramente, decompomos H_I nos autoestados de H_S : $H_S |\psi\rangle = \varepsilon |\psi\rangle$.

Podemos obter projetores através desses autoestados: $\Pi(\varepsilon) = |\psi(\varepsilon)\rangle \langle \psi(\varepsilon)|$, com a

relação de completeza $\sum_{\varepsilon} \Pi(\varepsilon) = \mathbb{I}$.

Reescrevendo (57):

$$\begin{aligned} H_I &= \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes B_{\alpha} = \sum_{\alpha} \mathbb{I} A_{\alpha} \mathbb{I} \otimes B_{\alpha} \\ &= \sum_{\alpha} \sum_{\varepsilon, \varepsilon'} \Pi(\varepsilon) A_{\alpha} \Pi(\varepsilon') \otimes B_{\alpha} . \end{aligned} \quad (58)$$

As somatórias de (58) podem ser reescritas como:

$$\sum_{\varepsilon, \varepsilon'} = \sum_{\omega} \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} , \quad (59)$$

onde a segunda somatória soma sobre todos os ε e ε' com uma diferença fixa ω , e a primeira somatória soma sobre todos os diferentes valores de ω . Assim, ao invés de somar sobre todos os autovalores duas vezes, somamos sobre todos os autoestados com uma diferença fixa de frequência ω e depois somamos sobre todas as frequências ω existentes. A equação (58) então torna-se

$$\begin{aligned} H_I &= \sum_{\alpha} \sum_{\omega} \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} \Pi(\varepsilon) A_{\alpha} \Pi(\varepsilon') \otimes B_{\alpha} \\ &= \sum_{\alpha} \sum_{\omega} A_{\alpha}(\omega) \otimes B_{\alpha} , \end{aligned} \quad (60)$$

onde

$$A_{\alpha}(\omega) \equiv \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} \Pi(\varepsilon) A_{\alpha} \Pi(\varepsilon') . \quad (61)$$

Os operadores $A_{\alpha}(\omega)$ possuem as seguintes propriedades:

1. $[H_S, A_{\alpha}(\omega)] = -\omega A_{\alpha}(\omega)$;
 $[H_S, A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)] = \omega A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)$.

Demonstração:

$$\begin{aligned} [H_S, A_{\alpha}(\omega)] &= H_S A_{\alpha}(\omega) - A_{\alpha}(\omega) H_S \\ &= \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} \{ H_S \Pi(\varepsilon) A_{\alpha} \Pi(\varepsilon') - \Pi(\varepsilon) A_{\alpha} \Pi(\varepsilon') H_S \} \\ &= \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} \{ (\varepsilon - \varepsilon') \Pi(\varepsilon) A_{\alpha} \Pi(\varepsilon') \} = -\omega A_{\alpha}(\omega) . \end{aligned}$$

Analogamente,

$$[H_S, A_{\alpha}^{\dagger}(\omega)] = \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} \{ (\varepsilon' - \varepsilon) \Pi(\varepsilon') A_{\alpha}^{\dagger} \Pi(\varepsilon) \} = \omega A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) .$$

2. $\sum_{\omega} A_{\alpha}(\omega) = A_{\alpha}$;
 $\sum_{\omega} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) = A_{\alpha}^{\dagger}$.

Demonstração:

$$\begin{aligned} \sum_{\omega} A_{\alpha}(\omega) &= \sum_{\omega} \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} \Pi(\varepsilon) A_{\alpha} \Pi(\varepsilon') = \sum_{\varepsilon} \Pi(\varepsilon) A_{\alpha} \sum_{\varepsilon'} \Pi(\varepsilon') \\ &= \mathbb{I} A_{\alpha} \mathbb{I} = A_{\alpha} . \end{aligned}$$

Analogamente,

$$\sum_{\omega} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) = A_{\alpha}^{\dagger} .$$

3. $e^{iHst} A_{\alpha}(\omega) e^{-iHst} = e^{-i\omega t} A_{\alpha}(\omega) ;$

$$e^{-iHst} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) e^{iHst} = e^{i\omega t} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) .$$

Demonstração:

$$\begin{aligned} e^{iHst} A_{\alpha}(\omega) e^{-iHst} &= \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} e^{iHst} \Pi(\varepsilon) A_{\alpha} \Pi(\varepsilon') e^{-iHst} \\ &= \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} e^{i(\varepsilon - \varepsilon')t} \Pi(\varepsilon) A_{\alpha} \Pi(\varepsilon') = e^{-i\omega t} A_{\alpha}(\omega) . \end{aligned}$$

Analogamente,

$$e^{-iHst} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) e^{iHst} = e^{i\omega t} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) .$$

4. $A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) = A_{\alpha}(-\omega) .$

Demonstração:

$$A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) = \left(\sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} \Pi(\varepsilon) A_{\alpha} \Pi(\varepsilon') \right)^{\dagger} = \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} \Pi(\varepsilon') A_{\alpha} \Pi(\varepsilon) .$$

Efetuada uma mudança de variáveis: $\varepsilon \longrightarrow \varepsilon' ; \varepsilon' \longrightarrow \varepsilon ; \varepsilon' - \varepsilon \longrightarrow \varepsilon - \varepsilon' = -\omega .$

$$A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) = \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = -\omega} \Pi(\varepsilon) A_{\alpha} \Pi(\varepsilon') = A_{\alpha}(-\omega) .$$

5. $[H_S, A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha}(\omega)] = 0 .$

Demonstração:

$$[H_S, A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha}(\omega)] = H_S A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha}(\omega) - A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\alpha}(\omega) H_S .$$

Da propriedade 1,

$$H_S A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) = \omega A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) + A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) H_S .$$

Então,

$$\begin{aligned}
[H_S, A_\alpha^\dagger(\omega) A_\alpha(\omega)] &= \omega A_\alpha^\dagger(\omega) A_\alpha(\omega) + A_\alpha^\dagger(\omega) H_S A_\alpha(\omega) \\
&\quad - A_\alpha^\dagger(\omega) A_\alpha(\omega) H_S \\
&= \omega A_\alpha^\dagger(\omega) A_\alpha(\omega) + A_\alpha^\dagger(\omega) [H_S, A_\alpha(\omega)] .
\end{aligned}$$

Novamente usando a propriedade 1,

$$[H_S, A_\alpha^\dagger(\omega) A_\alpha(\omega)] = \omega A_\alpha^\dagger(\omega) A_\alpha(\omega) - \omega A_\alpha^\dagger(\omega) A_\alpha(\omega) = 0 .$$

Voltando ao hamiltoniano de interação na representação de Schrödinger:

$$H_I = \sum_\alpha A_\alpha B_\alpha = \sum_{\alpha, \omega} A_\alpha(\omega) B_\alpha = \sum_{\alpha, \omega} A_\alpha^\dagger(\omega) B_\alpha^\dagger . \quad (62)$$

Na representação de interação,

$$H_I(t) = U^\dagger(t) H_I U(t) ; \quad U(t) = e^{-i(H_S + H_R)t} . \quad (63)$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
H_I(t) &= \sum_\alpha U^\dagger(A_\alpha B_\alpha) U = \sum_\alpha U_S^\dagger U_R^\dagger A_\alpha B_\alpha U_S U_R \\
&= \sum_\alpha U_S^\dagger A_\alpha U_S \left(U_R^\dagger B_\alpha U_R \right) = \sum_{\alpha, \omega} \left\{ U_S^\dagger A_\alpha(\omega) U_S \right\} B_\alpha(t) .
\end{aligned} \quad (64)$$

Calculando o termo entre chaves:

$$\begin{aligned}
U_S^\dagger A_\alpha(\omega) U_S &= \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} e^{iH_S t} \Pi(\varepsilon) A_\alpha \Pi(\varepsilon') e^{-iH_S t} \\
&= \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} e^{-i(\varepsilon' - \varepsilon)t} \Pi(\varepsilon) A_\alpha \Pi(\varepsilon') = e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) .
\end{aligned} \quad (65)$$

Reescrevendo (64), temos:

$$H_I(t) = \sum_{\alpha, \omega} e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) B_\alpha(t) = \sum_{\alpha, \omega} e^{i\omega t} A_\alpha^\dagger(\omega) B_\alpha^\dagger(t) , \quad (66)$$

com $B_\alpha(t) = U_R^\dagger B_\alpha U_R$. Ou podemos escrever da seguinte forma:

$$H_I(t) = \sum_\alpha A_\alpha(t) B_\alpha(t) , \quad (67)$$

onde $A_\alpha(t) = \sum_{\omega} e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega)$.

Voltando à equação (56):

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -Tr_R \int_0^\infty [H_I(t), [H_I(t-s), \rho_S(t) \rho_R]] ds .$$

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} &= -Tr_R \int_0^\infty ds [H_I(t), H_I(t-s) \rho_S(t) \rho_R - \rho_S(t) \rho_R H_I(t-s)] \\ &= -Tr_R \int_0^\infty ds \{H_I(t) H_I(t-s) \rho_S(t) \rho_R - H_I(t) \rho_S(t) \rho_R H_I(t-s) \\ &\quad - H_I(t-s) \rho_S(t) \rho_R H_I(t) + \rho_S(t) \rho_R H_I(t-s) H_I(t)\} . \end{aligned}$$

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = Tr_R \int_0^\infty ds \{H_I(t-s) \rho_S(t) \rho_R H_I(t) - H_I(t) H_I(t-s) \rho_S(t) \rho_R + h.c.\} . \quad (68)$$

Usando (67), e também o fato de que $H_I(t) = H_I^\dagger(t)$,

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} &= Tr_R \int_0^\infty ds \left\{ \sum_{\beta} A_{\beta}(t-s) B_{\beta}(t-s) \rho_S(t) \rho_R \sum_{\alpha} A_{\alpha}^{\dagger}(t) B_{\alpha}^{\dagger}(t) \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\alpha} A_{\alpha}^{\dagger}(t) B_{\alpha}^{\dagger}(t) \sum_{\beta} A_{\beta}(t-s) B_{\beta}(t-s) \rho_S(t) \rho_R + h.c. \right\} . \quad (69) \end{aligned}$$

Agora, substituímos $A_\alpha(t) = \sum_{\omega} e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega)$:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} &= Tr_R \int_0^\infty ds \left\{ \sum_{\beta, \omega} e^{-i\omega(t-s)} A_{\beta}(\omega) B_{\beta}(t-s) \rho_S(t) \rho_R \sum_{\alpha, \omega'} e^{i\omega' t} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega') B_{\alpha}^{\dagger}(t) \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\alpha, \omega'} e^{i\omega' t} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega') B_{\alpha}^{\dagger}(t) \sum_{\beta, \omega} e^{-i\omega(t-s)} A_{\beta}(\omega) B_{\beta}(t-s) \rho_S(t) \rho_R + hc \right\} \quad (70) \end{aligned}$$

Efetuando o traço sobre as variáveis do reservatório:

$$\begin{aligned} Tr_R (B_{\beta}(t-s) \rho_R B_{\alpha}^{\dagger}(t)) &= Tr_R (B_{\alpha}^{\dagger}(t) B_{\beta}(t-s) \rho_R) \\ &= \langle B_{\alpha}^{\dagger}(t) B_{\beta}(t-s) \rangle . \quad (71) \end{aligned}$$

Substituindo o resultado:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} &= \int_0^\infty ds \left\{ \sum_{\alpha, \beta, \omega, \omega'} e^{i(\omega' - \omega)t} A_{\beta}(\omega) \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega') \langle B_{\alpha}^{\dagger}(t) B_{\beta}(t-s) \rangle e^{i\omega s} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\alpha, \beta, \omega, \omega'} e^{i(\omega' - \omega)t} A_{\alpha}^{\dagger}(\omega') A_{\beta}(\omega) \rho_S(t) \langle B_{\alpha}^{\dagger}(t) B_{\beta}(t-s) \rangle e^{i\omega s} + h.c. \right\} . \end{aligned}$$

Portanto,

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \sum_{\alpha,\beta,\omega,\omega'} e^{i(\omega'-\omega)t} \Gamma_{\alpha,\beta}(\omega) \{A_\beta(\omega) \rho_S A_\alpha^\dagger(\omega') - A_\alpha^\dagger(\omega') A_\beta(\omega) \rho_S(t) + h.c.\} , \quad (72)$$

onde $\Gamma_{\alpha,\beta}(\omega) \equiv \int_0^\infty ds e^{i\omega s} \langle B_\alpha^\dagger(t) B_\beta(t-s) \rangle$.

Da aproximação de Born, $\rho_R(t) \approx \rho_R(0) \equiv \rho_R$. Logo, a função de correlação do reservatório (71) é homogênea no tempo:

$$\langle B_\alpha^\dagger(t) B_\beta(t-s) \rangle = \langle B_\alpha^\dagger(s) B_\beta(0) \rangle . \quad (73)$$

Efetuamos agora a aproximação de onda girante (RWA): para $\omega \neq \omega'$, a equação (72) será altamente oscilante. Consideramos, então, $\omega = \omega'$.

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \sum_{\alpha,\beta,\omega} \Gamma_{\alpha,\beta}(\omega) \{A_\beta(\omega) \rho_S A_\alpha^\dagger(\omega) - A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \rho_S(t) + h.c.\} . \quad (74)$$

Temos que:

$$\Gamma_{\alpha,\beta}(\omega) \equiv \int_0^\infty ds e^{i\omega s} \langle B_\alpha^\dagger(t) B_\beta(t-s) \rangle = \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) + i S_{\alpha\beta}(\omega) . \quad (75)$$

Aqui definimos as seguintes matrizes hermitianas:

$$\gamma_{\alpha\beta}(\omega) \equiv \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) + \Gamma_{\beta\alpha}^*(\omega) \quad \text{e} \quad (76)$$

$$S_{\alpha\beta}(\omega) \equiv \frac{1}{2i} (\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) - \Gamma_{\beta\alpha}^*(\omega)) , \quad (77)$$

onde $\gamma_{\alpha\beta}^* = \gamma_{\beta\alpha}$ e $S_{\alpha\beta}^* = S_{\beta\alpha}$.

Partindo de (76):

$$\begin{aligned} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) &\equiv \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) + \Gamma_{\beta\alpha}^*(\omega) \\ &= \int_0^\infty ds e^{i\omega s} \langle B_\alpha^\dagger(s) B_\beta(0) \rangle + \int_0^\infty ds e^{-i\omega s} \langle B_\beta^\dagger(s) B_\alpha(0) \rangle^* \\ &= \int_0^\infty ds e^{i\omega s} \langle B_\alpha^\dagger(s) B_\beta(0) \rangle + \int_0^\infty ds e^{-i\omega s} \langle B_\alpha^\dagger(0) B_\beta(s) \rangle . \end{aligned} \quad (78)$$

Reescrevendo a segunda integral de (78), fazendo as seguintes transformações: $s = -u$, $ds = -du$, $s = 0 \rightarrow u = 0$, $s = \infty \rightarrow u = -\infty$.

$$\int_0^\infty ds e^{-i\omega s} \langle B_\alpha^\dagger(0) B_\beta(s) \rangle = \int_0^{-\infty} -du e^{i\omega u} \langle B_\alpha^\dagger(0) B_\beta(-u) \rangle . \quad (79)$$

Como $\langle B_\alpha^\dagger(0) B_\beta(-u) \rangle$ é uma função homogênea no tempo, $\langle B_\alpha^\dagger(0) B_\beta(-u) \rangle = \langle B_\alpha^\dagger(u) B_\beta(0) \rangle$. Reescrevemos (79), então, invertendo os limites de integração:

$$\int_0^\infty ds e^{-i\omega s} \langle B_\alpha^\dagger(0) B_\beta(s) \rangle = \int_{-\infty}^0 du e^{i\omega u} \langle B_\alpha^\dagger(u) B_\beta(0) \rangle . \quad (80)$$

Substituindo em (78):

$$\begin{aligned} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) &= \int_0^\infty ds e^{i\omega s} \langle B_\alpha^\dagger(s) B_\beta(0) \rangle + \int_{-\infty}^0 ds e^{i\omega s} \langle B_\alpha^\dagger(s) B_\beta(0) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^\infty ds e^{i\omega s} \langle B_\alpha^\dagger(s) B_\beta(0) \rangle . \end{aligned} \quad (81)$$

Agora, então, reescrevemos (74):

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} &= \sum_{\alpha,\beta,\omega} \{ \Gamma_{\alpha,\beta}(\omega) A_\beta(\omega) \rho_S A_\alpha^\dagger(\omega) - \Gamma_{\alpha,\beta}(\omega) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \rho_S(t) \\ &\quad + \Gamma_{\alpha,\beta}^*(\omega) A_\alpha(\omega) \rho_S A_\beta^\dagger(\omega) - \Gamma_{\alpha,\beta}^*(\omega) \rho_S(t) A_\beta^\dagger(\omega) A_\alpha(\omega) \} . \end{aligned} \quad (82)$$

Fazendo as trocas $\alpha \longleftrightarrow \beta$ e $\beta \longleftrightarrow \alpha$ nos dois últimos termos (pois são índices mudos),

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} &= \sum_{\alpha,\beta,\omega} \{ \Gamma_{\alpha,\beta}(\omega) A_\beta(\omega) \rho_S A_\alpha^\dagger(\omega) - \Gamma_{\alpha,\beta}(\omega) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \rho_S(t) \\ &\quad + \Gamma_{\beta,\alpha}^*(\omega) A_\beta(\omega) \rho_S A_\alpha^\dagger(\omega) - \Gamma_{\beta,\alpha}^*(\omega) \rho_S(t) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \} . \end{aligned} \quad (83)$$

De (76) e (77) temos que:

$$\Gamma_{\alpha,\beta} = \frac{1}{2}\gamma_{\alpha,\beta} + iS_{\alpha,\beta} \longrightarrow \Gamma_{\alpha,\beta}^* = \frac{1}{2}\gamma_{\beta,\alpha} - iS_{\beta,\alpha} . \quad (84)$$

Para encontrarmos a expressão final da equação mestra microscópica, substituímos (84) em (83):

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} &= \sum_{\alpha,\beta,\omega} \{ (\Gamma_{\alpha,\beta}(\omega) + \Gamma_{\beta,\alpha}^*(\omega)) A_\beta(\omega) \rho_S A_\alpha^\dagger(\omega) \\ &\quad - (\frac{1}{2}\gamma_{\alpha,\beta} + iS_{\alpha,\beta}) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \rho_S(t) \\ &\quad - (\frac{1}{2}\gamma_{\alpha,\beta} - iS_{\alpha,\beta}) \rho_S(t) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \} . \end{aligned} \quad (85)$$

Usando (76),

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} = & \sum_{\alpha,\beta,\omega} \gamma_{\alpha,\beta} \{ A_\beta(\omega) \rho_S A_\alpha^\dagger(\omega) + \\ & -\frac{1}{2} A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \rho_S(t) - \frac{1}{2} \rho_S(t) (\omega) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \} \\ & -i \sum_{\alpha,\beta,\omega} S_{\alpha,\beta} \{ A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \rho_S(t) \\ & - \rho_S(t) (\omega) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \} . \end{aligned} \quad (86)$$

Finalmente,

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} = & \sum_{\alpha,\beta,\omega} \gamma_{\alpha,\beta} (A_\beta(\omega) \rho_S A_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} [A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \rho_S(t)]) \\ & -i [\sum_{\alpha,\beta,\omega} S_{\alpha,\beta} A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \rho_S(t)] . \end{aligned} \quad (87)$$

Ou seja,

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = -i [H_{LS}, \rho_S(t)] + D(\rho_S(t)) , \quad (88)$$

onde

$$H_{LS} \equiv \sum_{\alpha,\beta,\omega} S_{\alpha,\beta}(\omega) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \quad (89)$$

é o "*Lamb Shift Hamiltonian*", e

$$D(\rho_S(t)) \equiv \sum_{\alpha,\beta,\omega} \gamma_{\alpha,\beta} (A_\beta(\omega) \rho_S A_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} [A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \rho_S(t)]) \quad (90)$$

é o termo da dissipação. A expressão (90) é geral e vale para qualquer tipo de densidade espectral do reservatório. Vale lembrar, porém, que as aproximações envolvidas (Born e Markov) restringem esse resultado a sistemas que interagem fracamente com o reservatório.

Por fim, da propriedade 6, é fácil observar que

$$[H_{LS}, H_S] = 0 . \quad (91)$$

3.3 Cálculo numérico

Para o estudo das equações mestras apresentadas, foram feitas simulações computacionais utilizando o software MatLab TM.

No caso da equação mestra fenomenológica, os cálculos numéricos são mais simples, sendo necessário apenas estabelecer a base do sistema ($\{|n\rangle\}$ para o campo e $\{|g\rangle, |e\rangle\}$

para o átomo), truncar a base de Fock do campo em algum n_{\max} e então integrar as equações de movimento (31), utilizando o algoritmo em [33].

Já a equação mestra microscópica exige cálculos mais sofisticados. Primeiramente temos que determinar todas as autoenergias e os autoestados do sistema ($H|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle$) e, em seguida, ordená-las de maneira crescente ($\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \varepsilon_3 < \dots < \varepsilon_n$). Estabelecemos, então, as diferenças entre as autoenergias $\omega = \varepsilon - \varepsilon'$ e calculamos os operadores $A_\alpha(\omega)$ (61). De posse desses resultados, podemos calcular o termo dissipativo da equação mestra microscópica (88) e, a partir daí, seguir o mesmo caminho dos cálculos feitos para a equação fenomenológica. O "*Lamb Shift Hamiltonian*" (89) causa apenas um pequeno desvio na energia, sendo desconsiderado em nosso trabalho.

Capítulo 4

Análise do número médio de fótons em uma cavidade com um átomo

A aproximação de onda-girante, discutida no Capítulo 2, tem se mostrado suficientemente precisa para descrever muitos experimentos em Óptica Quântica nas últimas décadas. Especialmente no contexto da CQED, onde o acoplamento átomo-campo g é muito fraco se comparado à frequência de transição atômica ω_0 e à frequência do campo na cavidade ω , os resultados obtidos são bastante satisfatórios [34]. Entretanto, nos experimentos mais recentes na área de Eletrodinâmica Quântica de Circuitos [7], este acoplamento pode ser muito forte, comparável às frequências do átomo e/ou do campo, de modo que a aproximação de onda girante deixa de ser válida.

Assim, um dos principais objetivos do nosso trabalho é compreender adequadamente a validade da aproximação de onda girante no contexto da Eletrodinâmica Quântica de Circuitos. Para tal análise, são apresentados a seguir gráficos do número médio de fótons na cavidade e da população atômica, ambos em função do tempo, em várias situações diferentes. O número médio de fótons é dado por $\langle n \rangle = Tr(\rho a^\dagger a)$, enquanto que a população atômica é dada por $P_E = Tr(\rho \sigma_{ee})$. Utilizamos temperatura $T = 0$ em todas as simulações.

Na Figura 5, temos o gráfico para o caso ideal (sem dissipações), para diferentes valores da constante de acoplamento g , sendo utilizados nos cálculos o modelo de Rabi e a equação mestra microscópica. Nessa situação, o sistema é preparado no estado inicial $|g0\rangle$, isto é, átomo no estado fundamental $|g\rangle$ e campo no vácuo $|0\rangle$, a dessintonia entre o átomo e o campo é $\Delta = \omega - \omega_0 = 0$, e a base utilizada para o campo é truncada em $n_{\max} = 11$. Esse $n_{\max} = 11$ foi escolhido com base nas simulações numéricas que realizamos, onde observamos que tal n_{\max} já nos dava resultados muito precisos.

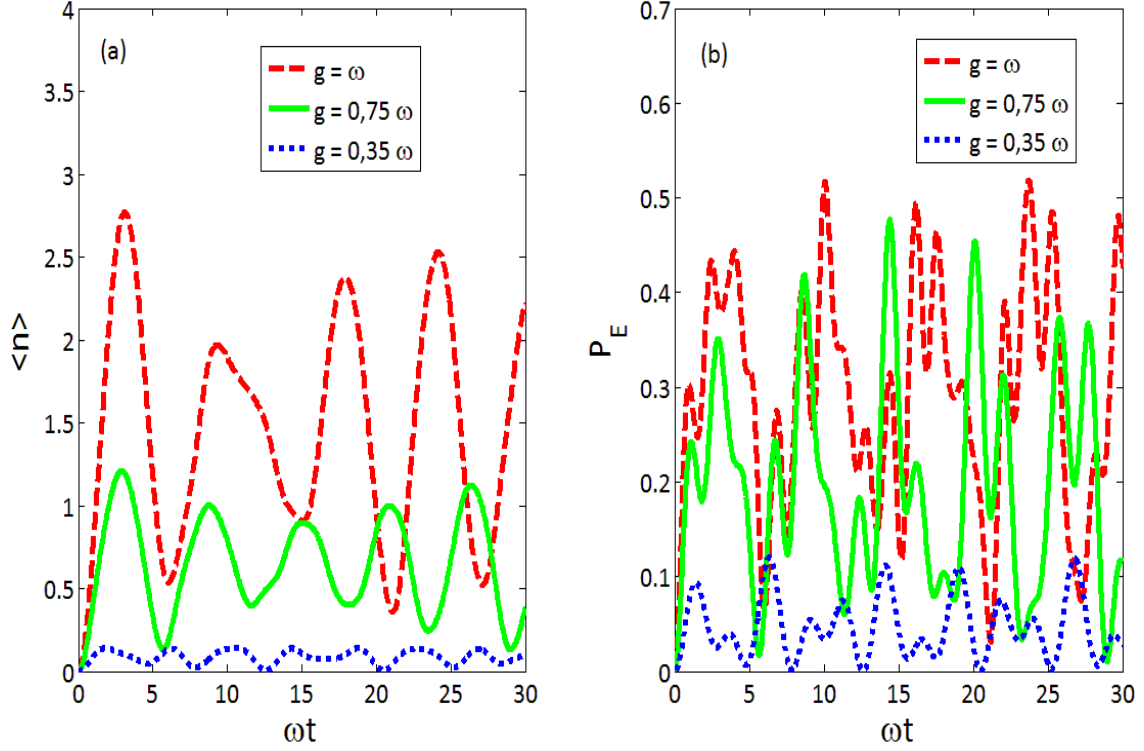


Figura 5: Gráfico do número médio de fótons (a) e da população atômica (b) em função de ωt , usando o modelo de Rabi sem dissipação, para $\Delta = 0$, $\gamma = \kappa = 0$ e $g = \omega$ (linha vermelha tracejada), $g = 0,75\omega$ (linha verde sólida) e $g = 0,35\omega$ (linha azul pontilhada).

Podemos observar em ambos os gráficos as oscilações devidas à escolha do modelo de Rabi. Ocorre aqui uma troca de energia periódica entre o campo e o átomo, representada pelo padrão oscilante no gráfico. Quanto ao modelo de Jaynes-Cummings, na ausência de dissipações, ele prevê que o sistema não sairá de seu estado fundamental, ou seja, se o estado inicial é $|g0\rangle$, o número médio de fótons será sempre igual a zero, para quaisquer valores de acoplamento.

A próxima análise é feita para o caso em que há dissipação apenas na cavidade. Novamente são apresentados gráficos da evolução temporal do número médio de fótons e da população atômica, utilizando a equação mestra microscópica. O valor escolhido para a constante de decaimento do campo foi $\kappa = 0,5\omega$. O primeiro gráfico refere-se ao modelo de Jaynes-Cummings (Figura 6).

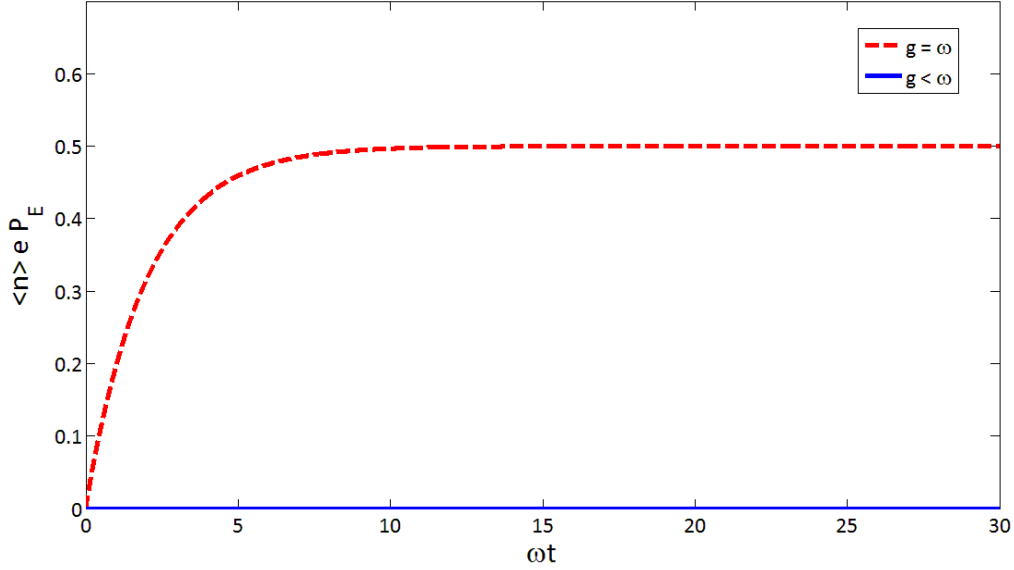


Figura 6: Gráficos da evolução temporal do número médio de fótons na cavidade e da população atômica (as curvas são iguais), usando a equação mestra microscópica e o modelo de Jaynes Cummings, para $\Delta = 0$, $\gamma = 0$, $\kappa = 0,5\omega$, $g = \omega$ (linha vermelha tracejada) e $g < \omega$ (linha azul sólida).

Podemos observar que apenas para o caso em que $g = \omega$ ocorre uma alteração no número médio de fótons e na probabilidade do átomo estar no estado excitado, levando o sistema ao estado assintótico em que $\langle n \rangle = P_E = 0,5$. Isso pode ser entendido se analisarmos os autoestados e as autoenergias do Hamiltoniano de Jaynes Cummings:

$$\begin{aligned}
 |\psi_0\rangle &= |g, 0\rangle \quad \longrightarrow \quad E_0 = -\frac{\hbar\omega_0}{2}, \\
 |\psi_n^+\rangle &= \cos\theta_n |e, n-1\rangle - \sin\theta_n |g, n\rangle \quad \longrightarrow \quad E_n^+ = \hbar \left[(n-1)\omega + \frac{\omega_0}{2} \right] - \frac{\hbar}{2} (\Omega_n - \Delta), \\
 |\psi_n^-\rangle &= \sin\theta_n |e, n-1\rangle + \cos\theta_n |g, n\rangle \quad \longrightarrow \quad E_n^- = \hbar \left[n\omega - \frac{\omega_0}{2} \right] + \frac{\hbar}{2} (\Omega_n - \Delta),
 \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
 \Omega_n &= \sqrt{\Delta^2 + 4g^2n}; \\
 \sin\theta_n &= \frac{\Omega_n - \Delta}{\sqrt{(\Omega_n - \Delta)^2 + 4g^2n}}; \\
 \cos\theta_n &= \frac{2g\sqrt{n}}{\sqrt{(\Omega_n - \Delta)^2 + 4g^2n}}.
 \end{aligned}$$

O gráfico apresentado na Figura 7 nos ajuda a compreender o que acontece com as autoenergias nesse modelo. Para $\omega = \omega_0$, observamos que o estado fundamental é $|\psi_0\rangle$

apenas quando g é menor que ω . A partir de então, o estado fundamental passa a ser $|\psi_1^+\rangle$ e, no caso em que há dissipação, será esse o estado assintótico do sistema. Note que para $g/\omega > \sqrt{2} + 1$ o estado assintótico passa a ser $|\psi_2^+\rangle$.

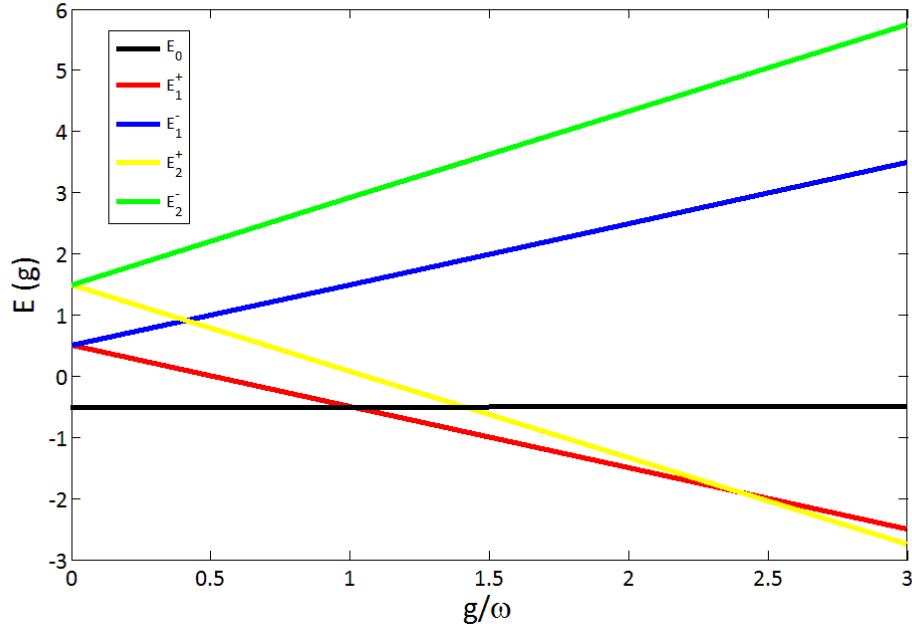


Figura 7: Gráfico das 5 primeiras autoenergias do Hamiltoniano de Jaynes-Cummings.

Em seguida temos os gráficos da evolução temporal do número médio de fótons na cavidade e da população atômica, referentes ao modelo de Rabi (Figura 8) e o gráfico comparativo entre os dois modelos, para o caso em que $g = \omega$ (Figura 9). No *inset* da Figura 8 temos os gráficos em função do acoplamento g , para um tempo suficientemente longo tal que os sistemas se encontrem no estado assintótico.

Uma análise para a situação em que há dissipação na cavidade e no átomo mostra gráficos muitos similares aos apresentados acima, levando o sistema a atingir o mesmo estado assintótico. A inclusão da dissipação no átomo resulta apenas em um tempo diferente para se atingir o estado assintótico.

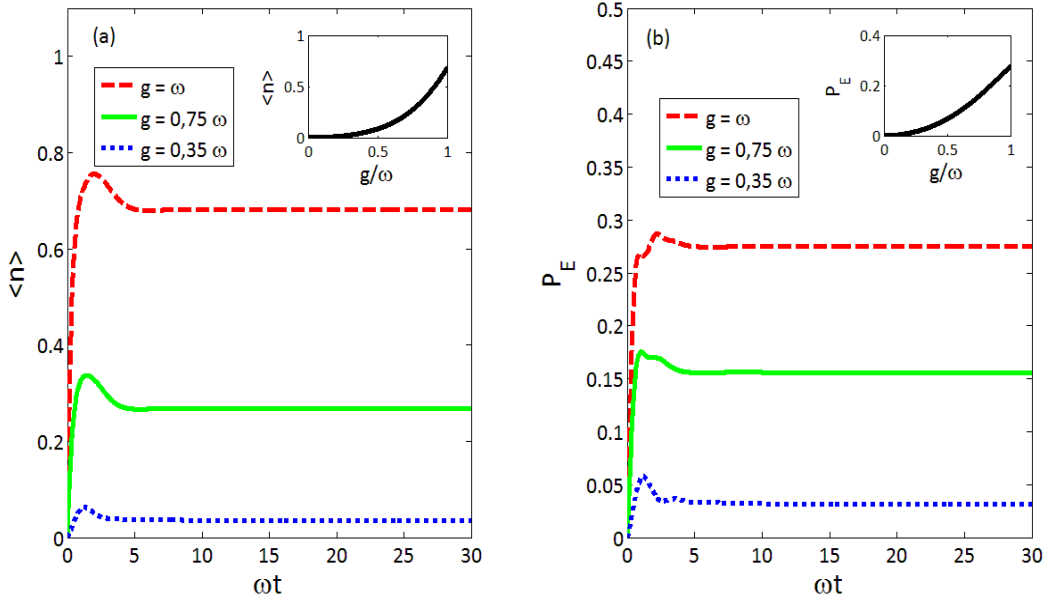


Figura 8: Gráficos da evolução temporal do número médio de fótons na cavidade (a) e da população atômica (b), usando a equação mestra microscópica e o modelo de Rabi, para $\Delta = 0$, $\gamma = 0$, $\kappa = 0,5\omega$, $g = \omega$ (linha vermelha tracejada), $g = 0,75\omega$ (linha verde sólida) e $g = 0,35\omega$ (linha azul pontilhada). No "inset", os gráficos do número médio de fótons e da população atômica em função de g .

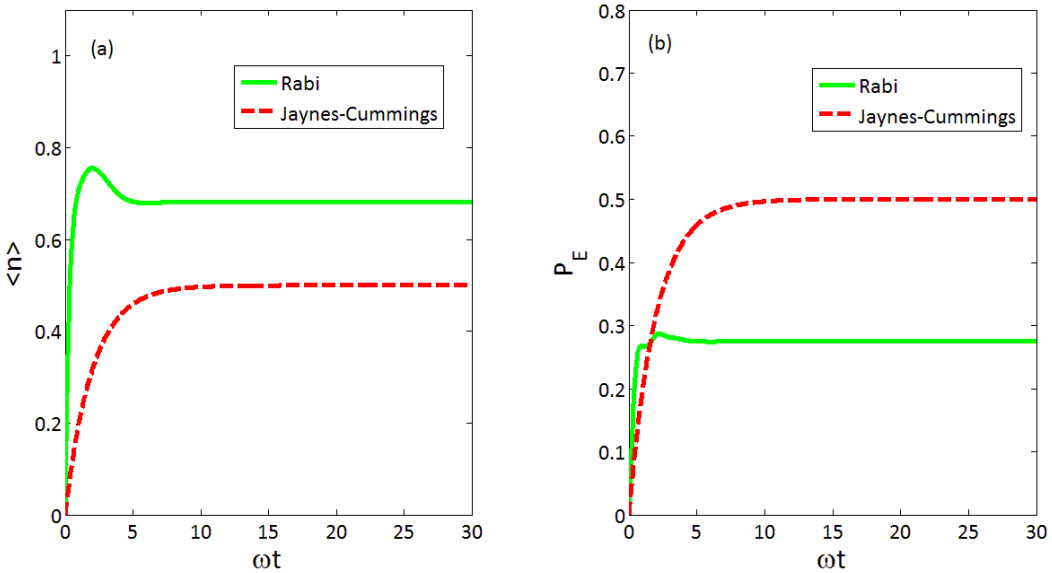


Figura 9: Gráficos da evolução temporal do número médio de fótons na cavidade (a) e da população atômica (b), usando a equação mestra microscópica e comparando os modelos de Rabi (linha verde sólida) e Jaynes-Cummings (linha vermelha tracejada), usando $\Delta = 0$, $\gamma = 0$, $\kappa = 0,5\omega$ e $g = \omega$.

Aqui observamos que a diferença entre os resultados previstos pelos dois modelos para o número médio de fótons no estado estacionário diferem em aproximadamente 27%. No caso da população atômica, o modelo de Jaynes-Cummings prevê um resultado 82% maior que o previsto pelo modelo de Rabi.

Uma outra motivação surge quando se comparam as deduções fenomenológica e microscópica para a equação mestra. A abordagem fenomenológica considera os decaimentos do átomo e do campo individualmente, enquanto que a dedução microscópica leva em conta a interação entre eles. Entender o que ocorre com a equação mestra nos regimes de acoplamentos fraco e forte também é um propósito deste trabalho, uma vez que a equação fenomenológica é limitada e coincide com a microscópica apenas sob certas condições (acoplamento fraco) [35]. Assim, apresentamos o gráfico do número médio de fótons na cavidade e da população atômica em função do tempo, quando há dissipação no campo ($\kappa = 0,5\omega$), utilizando a equação mestra fenomenológica e o modelo de Rabi (Figura 10).

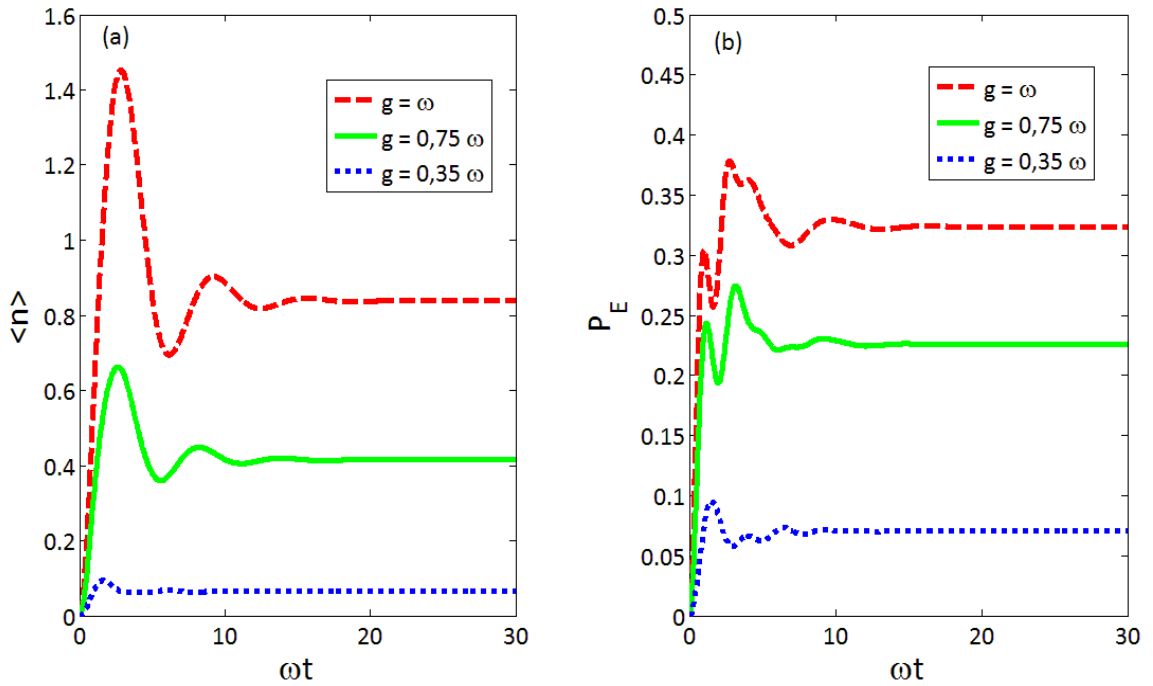


Figura 10: Gráficos da evolução temporal do número médio de fótons na cavidade (a) e da população atômica (b), usando a equação mestra fenomenológica e o modelo de Rabi, para $\Delta = 0$, $\gamma = 0$, $\kappa = 0,5\omega$, $g = \omega$ (linha vermelha tracejada), $g = 0,75\omega$ (linha verde sólida) e $g = 0,35\omega$ (linha azul pontilhada).

Podemos, agora, comparar os resultados obtidos para as equações mestras fenomenológica e microscópica. Para $g = \omega$, encontramos o gráfico mostrado na Figura 11.

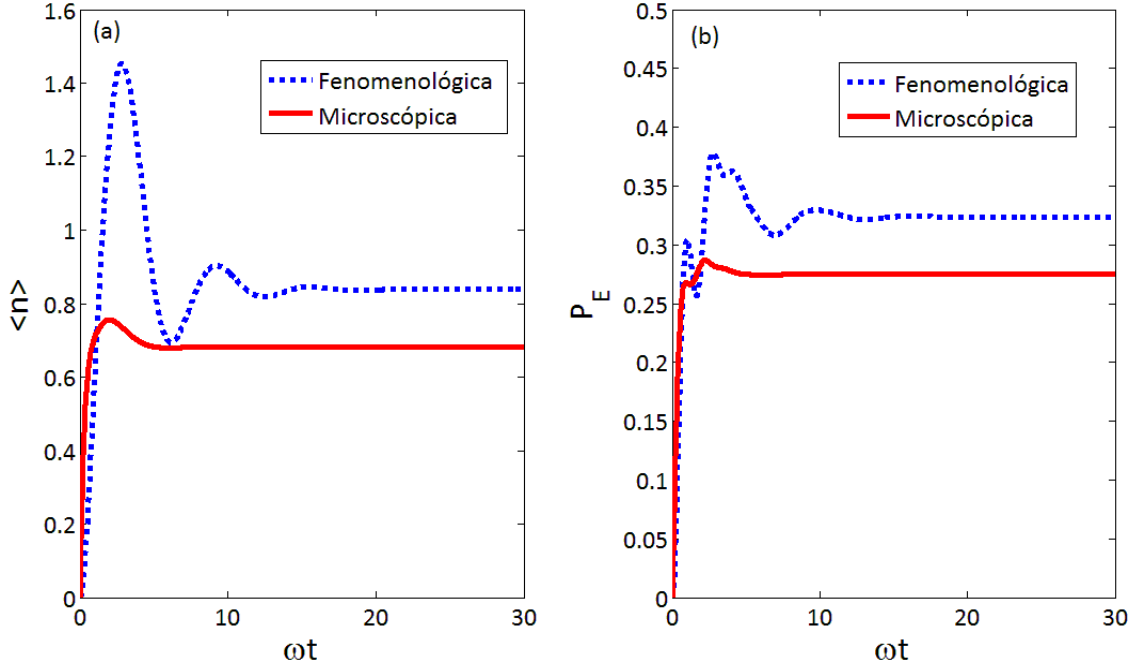


Figura 11: Gráficos da evolução temporal do número médio de fótons na cavidade (a) e da população atômica (b), usando o modelo de Rabi e comparando as equações mestras fenomenológica (linha azul pontilhada) e microscópica (linha vermelha sólida), para

$$\Delta = 0, \gamma = 0, \kappa = 0,5 \text{ e } g = \omega.$$

Podemos observar com esses resultados que, para um acoplamento muito forte ($g = \omega$), os resultados previstos pelas equações mestras fenomenológica e microscópica são bastante diferentes entre si. A diferença entre os valores do número médio de fótons no estado estacionário é de 23%, e no caso da população atômica é de aproximadamente 18%. A mesma comparação pode ser feita para um acoplamento mais fraco (mas ainda assim forte). No caso em que $g = 0,35\omega$, temos o gráfico abaixo:

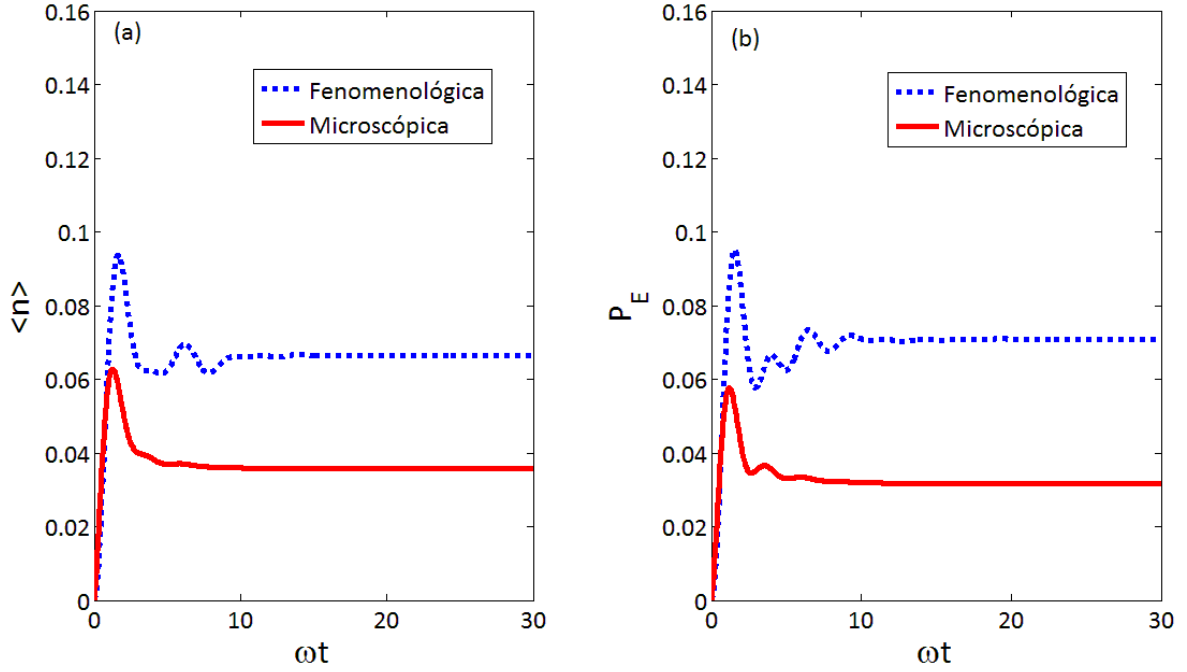


Figura 12: Gráficos da evolução temporal do número médio de fótons na cavidade (a) e da população atômica (b), usando o modelo de Rabi e comparando as equações mestras fenomenológica (linha azul pontilhada) e microscópica (linha vermelha sólida), para

$$\Delta = 0, \gamma = 0, \kappa = 0,5 \text{ e } g = 0,35\omega.$$

Aqui, o resultado previsto pela equação mestra fenomenológica foi aproximadamente 87% maior que o previsto pela Microscópica, no caso do número médio de fótons. No gráfico da população atômica, esse valor chegou a 125%.

Apresentamos agora os gráficos do número médio de fótons e da população atômica em função do acoplamento, onde é possível notar uma coincidência das curvas para valores pequenos de g , e uma divergência à medida que o acoplamento torna-se mais forte.

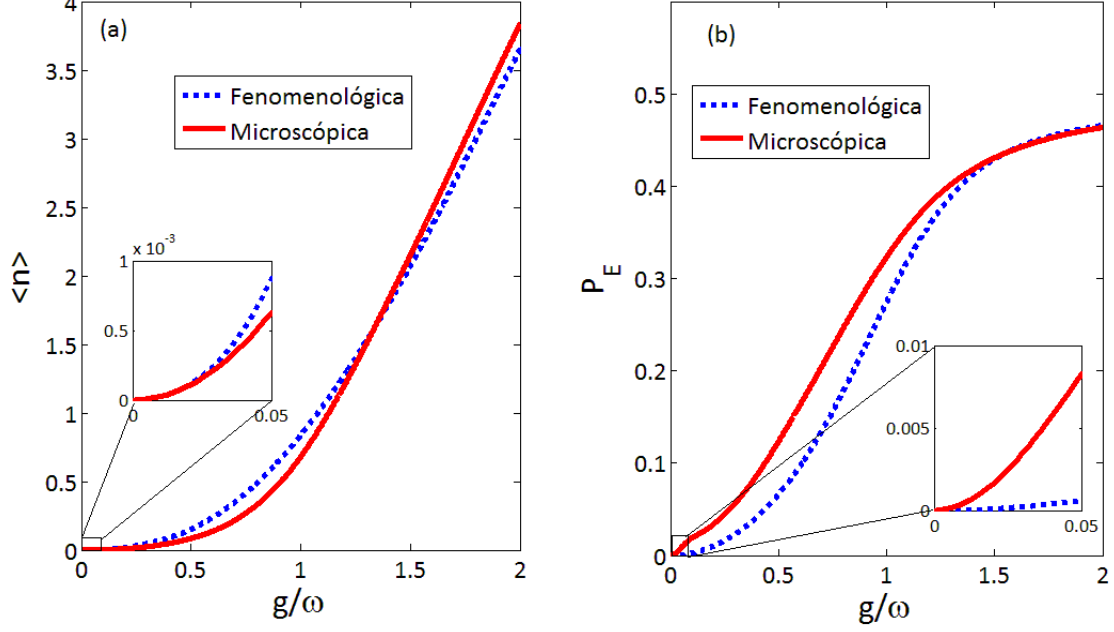


Figura 13: Gráficos do número médio de fótons (a) e da população atômica (b) estacionários em função do acoplamento g , usando o modelo de Rabi, $\kappa = 0, 5\omega$ e as equações mestras fenomenológica (linha azul pontilhada) e microscópica (linha vermelha sólida).

Em um trabalho recente [7], Beaudoin *et. al.* propuseram uma solução aproximada para o Hamiltoniano de Rabi. Para tal, aplicaram ao Hamiltoniano a transformação:

$$U = \exp \{ \Lambda (a\sigma_- - a^\dagger\sigma_+) + \xi (a^2 - a^{\dagger 2}) \sigma_z \}, \quad (92)$$

onde $\Lambda = g/(\omega + \omega_0)$ e $\xi = g\Lambda/2\omega$. Procedendo dessa forma, obtem-se o chamado "Hamiltoniano de Bloch-Siegert", sendo desprezados termos de segunda ordem ou mais em Λ .

$$H_{BS} = (\omega + \mu\sigma_z) a^\dagger a + \frac{\omega_q}{2}\sigma_z + g(a\sigma_+ + a^\dagger\sigma_-), \quad (93)$$

com $\mu = g^2/(\omega + \omega_0)$ e $\omega_q = \omega_0 + \mu$. Os autoestados exatos desse Hamiltoniano são:

$$\begin{aligned} |n, +\rangle &= -\sin\theta_n |e, n-1\rangle + \cos\theta_n |g, n\rangle \\ |n, -\rangle &= -\cos\theta_n |e, n-1\rangle + \sin\theta_n |g, n\rangle, \end{aligned} \quad (94)$$

onde o ângulo θ_n é dado por:

$$\theta_n = \arctan \left[\frac{\Delta_n^{BS} - \sqrt{(\Delta_n^{BS})^2 + 4g^2n}}{2g\sqrt{n}} \right], \quad (95)$$

com $\Delta_n^{BS} = \omega_0 - \omega + 2\mu n$.

Em nosso trabalho, comparamos os resultados previstos por esse Hamiltoniano aproximado com aqueles previstos pelo Hamiltoniano de Rabi, usando a equação mestra microscópica. O gráfico abaixo (Figura 14) mostra o número médio de fótons e a população atômica em função do acoplamento g , para $\kappa = 0, 5\omega$.

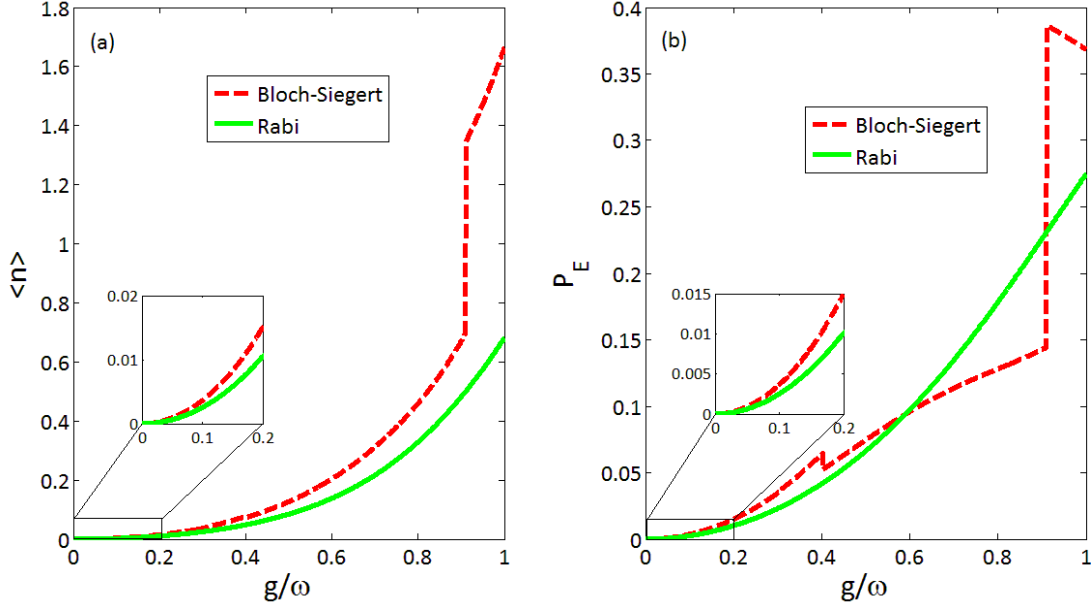


Figura 14: Gráficos do número médio de fótons na cavidade (a) e da população atômica (b) em função do acoplamento g , usando a equação mestra microscópica e os Hamiltonianos de Rabi (linha verde sólida) e Bloch-Siegert (linha vermelha tracejada), para $\Delta = 0$, $\gamma = 0$ e $\kappa = 0, 5\omega$.

Nesse gráfico observamos que a aproximação feita para se obter o Hamiltoniano de Bloch-Siegert é perfeitamente adequada para situações em que g/ω não é muito grande, com valores menores que 0, 2. Entretanto, quando se tem um acoplamento mais forte que isso, é visível a discrepância entre os dois modelos, de modo que a aproximação proposta deixa de ser válida em tais circunstâncias.

Comparamos também nossos resultados com os obtidos em outro trabalho recente [34]. Ali, os autores mostraram gráficos da evolução temporal do número médio de fótons, utilizando o modelo de Rabi e a equação mestra fenomenológica. Um dos casos apresentados foi o de dissipação apenas no campo, com $\kappa = 0, 1\omega$, e um acoplamento de $g = 0, 1\omega$. Construímos, então, gráficos do número médio de fótons e da população atômica em

função de g para avaliar se, nesse regime de parâmetros, a equação fenomenológica é adequada.

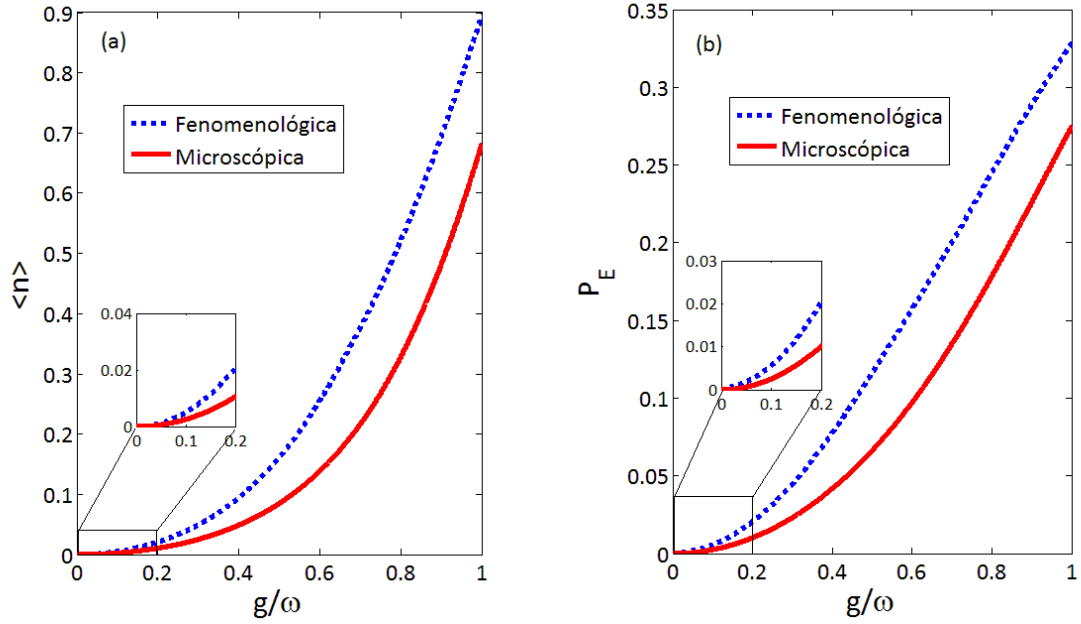


Figura 15: Gráficos do número médio de fótons (a) e da população atômica (b) em função do acoplamento g , usando o modelo de Rabi, $\kappa = 0, 1\omega$ e as equações mestras fenomenológica (linha azul pontilhada) e microscópica (linha vermelha sólida).

É possível observar que, para acoplamentos com valores até $g = 0, 1\omega$, como o usado no artigo [34], a equação mestra fenomenológica pode ser usada para descrever o sistema.

Entretanto, novamente notamos que para valores maiores de g , a equação microscópica faz-se necessária.

Capítulo 5

Interação com dois átomos

5.1 Correlações quânticas

Nesse capítulo estendemos nossos estudos para o caso em que temos dois átomos interagindo com o mesmo modo do campo de radiação, no regime de acoplamento forte, onde novamente a aproximação de onda girante deixa de ser válida e a equação mestra microscópica faz-se necessária. No capítulo anterior notamos que o modelo de Rabi prevê a geração de fótons quando o campo é inicialmente preparado no estado de vácuo e o átomo é preparado no seu estado fundamental. Aqui nesse capítulo veremos que a interação entre os átomos com o campo resulta em uma geração espontânea de correlações entre os átomos, mesmo quando estes são preparados inicialmente em seus estados fundamentais e o campo no estado de vácuo. A seguir apresentamos uma breve descrição sobre as correlações quânticas que empregaremos nesse estudo e em seguida apresentamos nossos resultados.

Correlações exercem um papel notável em vários campos da Física, como Física Estatística e Tecnologia da Informação [36]. Em particular, elas oferecem uma maneira eficaz de se entender as diferenças entre a Física Quântica e a Clássica, e é nesse aspecto que focaremos esta parte do trabalho. Dentre as correlações quânticas conhecidas, escolhemos a discórdia quântica e o emaranhamento de formação para analisarmos a dinâmica de dois átomos que interagem com o mesmo modo quântico.

A discórdia quântica é construída a partir do fato de que duas expressões, equivalentes classicamente, para o cálculo da informação mútua entre duas variáveis aleatórias, diferem quando são aplicadas a sistemas quânticos [37, 38]. A essa diferença dá-se o nome de discórdia quântica.

Na teoria clássica da informação, a entropia $H(X)$, chamada de "entropia de Shannon", representa a ignorância que se tem sobre uma variável aleatória X , e é dada por $H(X) = -\sum_x p_x \log_2 p_x$, onde p_x é a distribuição de probabilidade da variável X [39]. A informação mútua, que mede a correlação entre duas variáveis X e Y , é dada por:

$$J(X : Y) = H(X) - H(X|Y), \quad (96)$$

onde $H(X|Y)$ é a entropia condicional de X dado Y . Essa expressão, conhecida como informação mútua de Shannon, mede a quantidade de informação sobre a variável X que é transmitida através de medidas da variável Y .

Usando o teorema de Bayes, é possível mostrar que $H(X|Y) = H(X, Y) - H(Y)$. Assim, podemos reescrever a equação (96):

$$I(X : Y) = H(X) + H(Y) - H(X, Y). \quad (97)$$

Para se fazer uma generalização do conceito de informação mútua de modo a abranger sistemas quânticos, alguns cuidados devem ser tomados. Primeiramente, analisemos a expressão (97). Todos os itens envolvidos na definição da informação mútua clássica podem ser estendidos a um sistema quântico, bastando apenas substituir as distribuições clássicas de densidade pelos respectivos operadores densidade e a entropia de Shannon pela entropia de von Neumann: $H(S) = H(\rho_S) = -\text{Tr}_S(\rho_S \log_2 \rho_S)$.

Para obtermos a "versão" quântica da equação (96), entretanto, é necessário observar que a entropia condicional $H(X|Y)$ requer que se especifique o estado de X dado o estado de Y , ou seja, a informação mútua dependerá de como for feita a medida sobre a variável X . Assim, para um sistema quântico, a expressão (96) torna-se:

$$J_q(X : Y)_{\{\Pi_j^Y\}} = H(X) - H(X | \{\Pi_j^Y\}), \quad (98)$$

onde $\{\Pi_j^Y\}$ é o conjunto de projetores que definem uma medida em Y .

A discórdia quântica é, portanto, a diferença entre as duas expressões para a informação mútua no caso quântico:

$$D(X : Y) = I_q(X : Y) - J_q(X : Y)_{\{\Pi_j^Y\}} = H(Y) - H(X, Y) + H(X | \{\Pi_j^Y\}). \quad (99)$$

Em outras palavras, a discórdia quântica de um sistema diz o quanto uma medida sobre tal sistema altera sua entropia. Um valor nulo para a discórdia quântica, obviamente, implica em um caso clássico.

A outra medida de correlação quântica que analisamos é o emaranhamento de formação ("*Entanglement of formation*" - EoF), definido como o emaranhamento médio mínimo de um conjunto de estados puros que representa ρ [40]. Estados emaranhados são definidos como aqueles que não podem ser escritos como um produto de estados, ou seja, $\rho \neq$

$\sum_i \rho_i^{(A)} \otimes \rho_i^{(B)}$. O EoF busca quantificar os recursos necessários para se criar um estado emaranhado, e pode ser escrito como [41]:

$$EoF(\rho_{AB}) = -g \log_2 g - (1-g) \log_2 (1-g), \quad (100)$$

com $g = (1 + \sqrt{1 - C^2}/2)$, onde C é a medida conhecida como "concorrência". Para o caso de uma matriz densidade em formato "X", como todas as estudadas neste trabalho, a concorrência pode ser dada pela expressão:

$$C = 2 \max \{0, \Lambda_1, \Lambda_2\}, \Lambda_1 = |\rho_{14}| - \sqrt{\rho_{22}\rho_{33}} e \Lambda_2 = |\rho_{23}| - \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}. \quad (101)$$

5.1 Resultados obtidos

Para avaliarmos o efeito da escolha da equação mestra em medidas de correlações quânticas, apresentamos os gráficos abaixo. Em todos foi utilizado o modelo de Rabi e o estado inicial do sistema, formado pelos dois átomos e o campo, escolhido como sendo $|\psi_0\rangle = |gg0\rangle$. Utilizou-se também para a dessintonia entre as frequências dos átomos e do campo o valor de $\Delta = \omega - \omega_0 = 0,01\omega$, de modo a podermos comparar nossos resultados com aqueles apresentados na referência [42]. Além disso, continuamos aqui usando a temperatura $T = 0$. O modelo de Rabi para dois átomos é dado por:

$$H = \hbar\omega_c a^\dagger a + \frac{1}{2} \hbar\omega_0 (\sigma_z^A + \sigma_z^B) + \hbar g [a (\sigma_+^A + \sigma_+^B) + a^\dagger (\sigma_-^A + \sigma_-^B) + a (\sigma_-^A + \sigma_-^B) + a^\dagger (\sigma_+^A + \sigma_+^B)]. \quad (102)$$

Em nossos cálculos, ainda consideramos a emissão espontânea do campo e desprezamos o decaimento atômico e a defasagem do átomo e do campo. Assim, apenas o termo referente ao decaimento do campo é mantido no Liouvilliano definido na eq. 32 (Fenomenológica). No caso da dedução microscópica, o Hamiltoniano de interação (67) fica:

$$H_I = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes B_{\alpha} = A \otimes B, \quad (103)$$

onde $A = a + a^\dagger$ representa o operador do campo, e $B = \sum_k \lambda_k (b_k + b_k^\dagger)$ é o operador do reservatório. Aqui, k refere-se ao k -ésimo modo do reservatório.

A Figura 16 mostra a evolução da discórdia quântica no tempo para diferentes valores da constante de acoplamento g , utilizando o valor de 0.2ω para a constante κ de decaimento do campo e as equações mestras microscópica (Fig. 16-a) e fenomenológica (Fig.

16-b). No canto superior direito de cada gráfico é mostrado como a discórdia quântica varia com g , no caso em que o sistema está em seu estado assintótico, ou seja, o tempo de evolução foi tomado suficientemente longo para que o valor da discórdia não se altere mais.

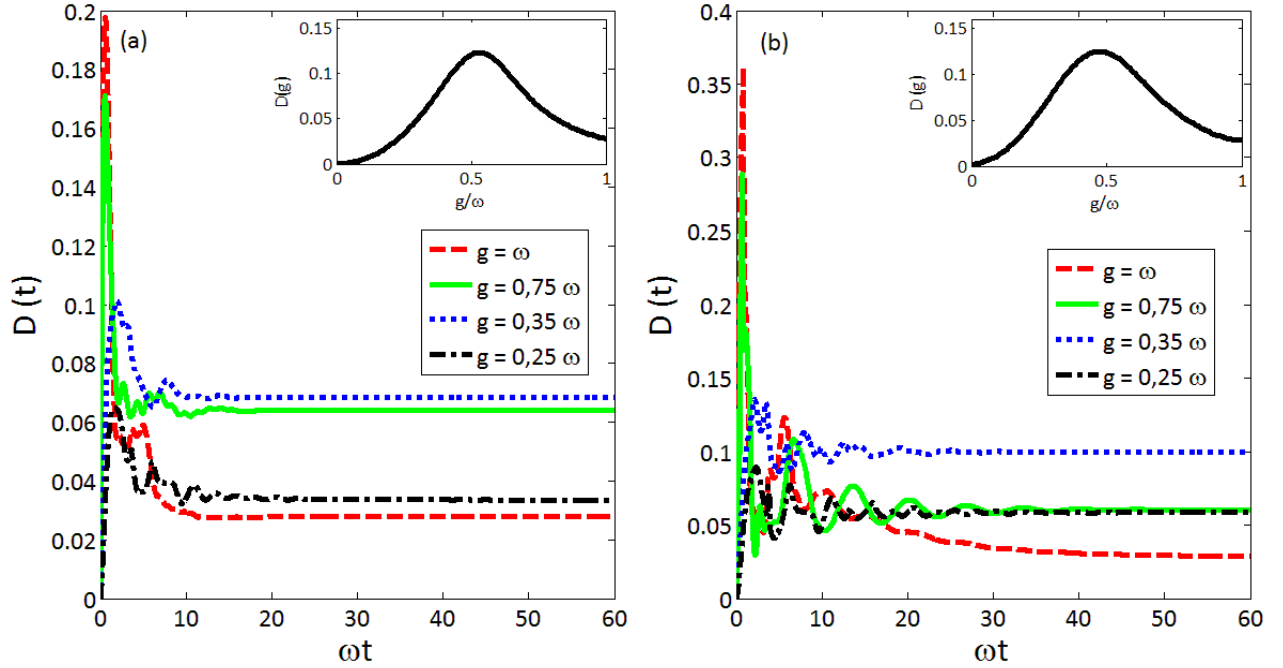


Figura 16: Gráficos da discórdia quântica em função de ωt , para $\kappa = 0,2\omega$, $\Delta = 0,01\omega$ e $g = \omega$ (linha vermelha tracejada), $g = 0,75\omega$ (linha verde sólida), $g = 0,35\omega$ (linha azul pontilhada) e $g = 0,25\omega$ (linha preta tracejada e pontilhada), e da discórdia quântica em função do acoplamento g ("inset"), utilizando as equações mestras (a) microscópica e (b) fenomenológica.

Em seguida, fixamos o valor de $0,35\omega$ para a constante de acoplamento g , e efetuamos o cálculo da discórdia quântica para vários valores da constante κ . O estado inicial e a dessintonia foram mantidos iguais aos do gráfico anterior, e novamente apresentamos os resultados quando se utiliza a equação mestra microscópica (Fig. 17-a) e a fenomenológica (Fig. 17-b).

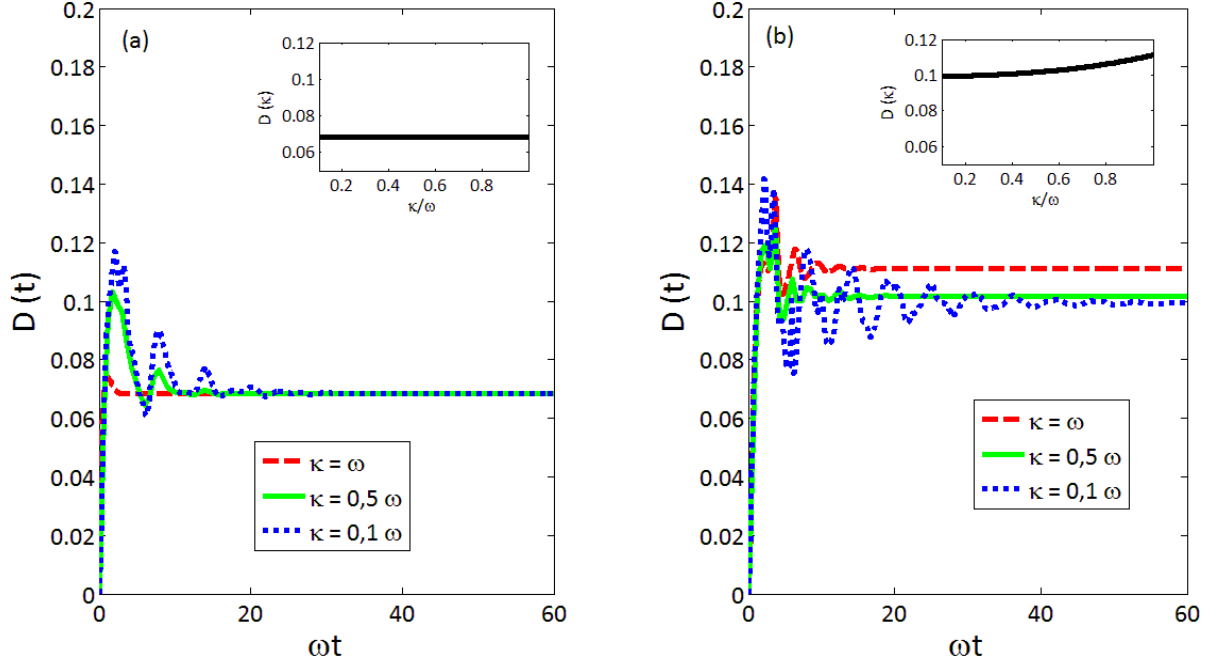


Figura 17: Gráficos da discórdia quântica em função de ωt , para $g = 0,35\omega$, $\Delta = 0,01\omega$ e $\kappa = \omega$ (linha vermelha tracejada), $\kappa = 0,5\omega$ (linha verde sólida) e $\kappa = 0,1\omega$ (linha azul pontilhada), e da discórdia em função de κ ("inset"), utilizando as equações mestras (a) microscópica e (b) fenomenológica.

Quando utilizamos a equação mestra microscópica, observamos que a constante de decaimento do campo influencia apenas no tempo necessário para se atingir o estado assintótico, e não no estado estacionário em si. Esse fato, visto no gráfico da Fig. 17-a, não é observado quando a equação mestra utilizada é a fenomenológica (Fig 17-b).

A partir desses resultados é possível estabelecer uma comparação entre os valores da discórdia no caso em que se utiliza a equação microscópica e aquele em que se utiliza a fenomenológica. Gráficos similares levando-se em conta a equação mestra fenomenológica (Fig. 16-b e 17-b) foram obtidos por [42], e em nosso trabalho comparamos tais resultados com aqueles obtidos quando é utilizada a equação mestra microscópica. Isso é feito no gráfico da Figura 18, escolhendo as curvas referentes aos parâmetros $g = 0,35\omega$ e $\kappa = 0,2\omega$.

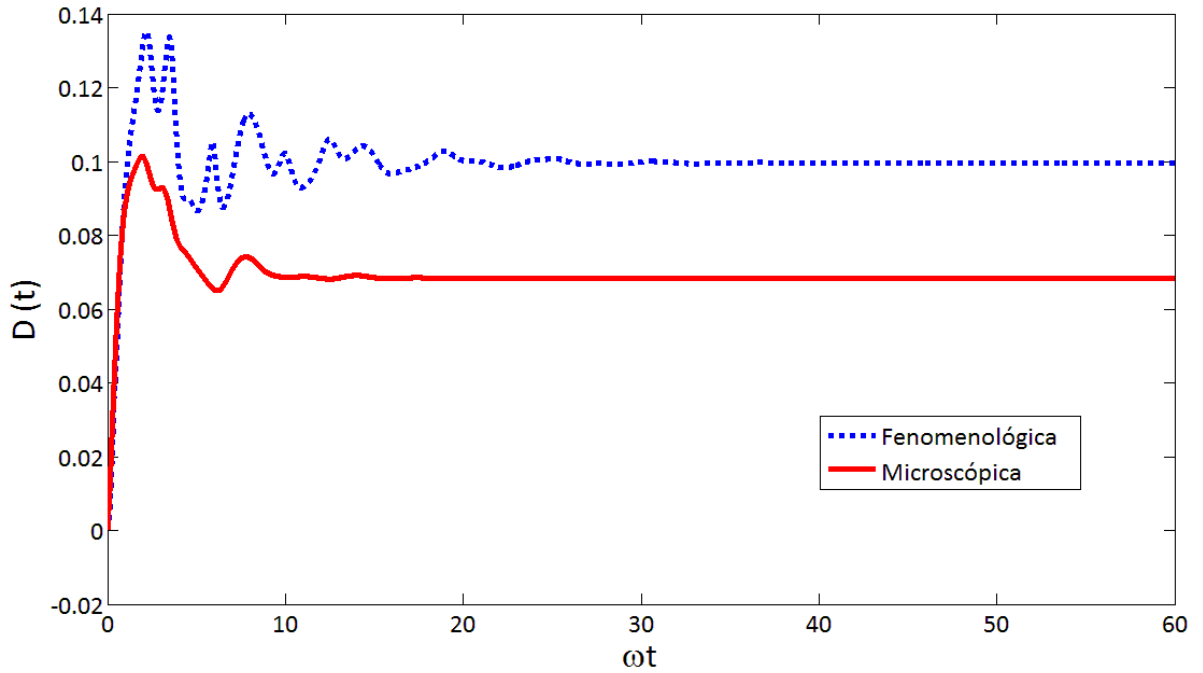


Figura 18: Gráfico da discórdia quântica em função do tempo, utilizando o modelo de Rabi, para $g = 0,35\omega$, $\kappa = 0,2\omega$, $\gamma = 0$, e usando as equações mestras fenomenológica (linha azul pontilhada) e microscópica (linha vermelha sólida).

Nesse gráfico podemos notar que a equação mestra microscópica prevê um resultado aproximadamente 31% menor do que o previsto pela equação fenomenológica. Essa é uma diferença relevante para o estudo da interação entre os átomos e o campo, sobretudo nos recentes experimentos em eletrodinâmica quântica de circuitos.

Podemos ainda comparar os dois modelos através dos gráficos da discórdia quântica em função do acoplamento g , escolhendo as curvas para $\kappa = 0,2\omega$.

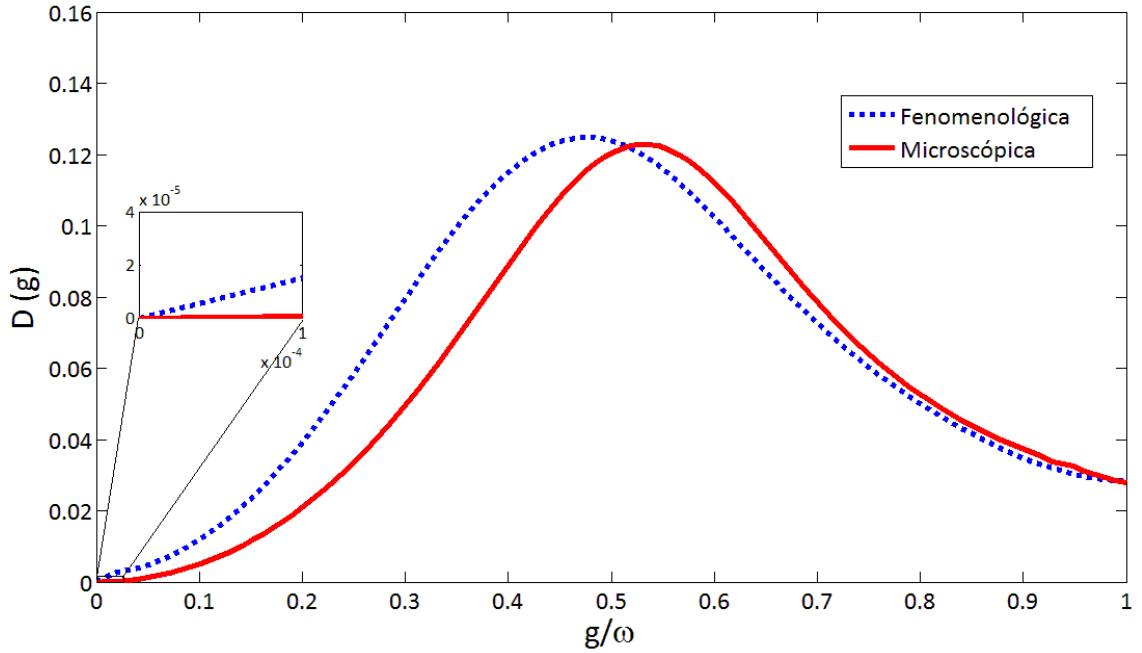


Figura 19: Gráfico da discórdia em função de g , para $\kappa = 0, 2\omega$, usando as equações mestras microscópica (linha vermelha sólida) e fenomenológica (linha azul pontilhada).

O resultado obtido via equação mestra microscópica independe da escolha de κ . No entanto, valores diferentes de κ fornecem resultados diferentes para a discórdia (assintótica) quando se usa a equação mestra fenomenológica.

Apresentamos agora a análise feita para o Emaranhamento de Formação utilizando as equações mestras microscópica e fenomenológica. A Figura 20 mostra os gráficos de $EoF \times t$, para diferentes valores do acoplamento g , utilizando $\kappa = 0, 2\omega$, e a Figura 21 mostra os gráficos de $EoF \times t$, para diferentes valores de κ , utilizando $g = 0, 35\omega$.

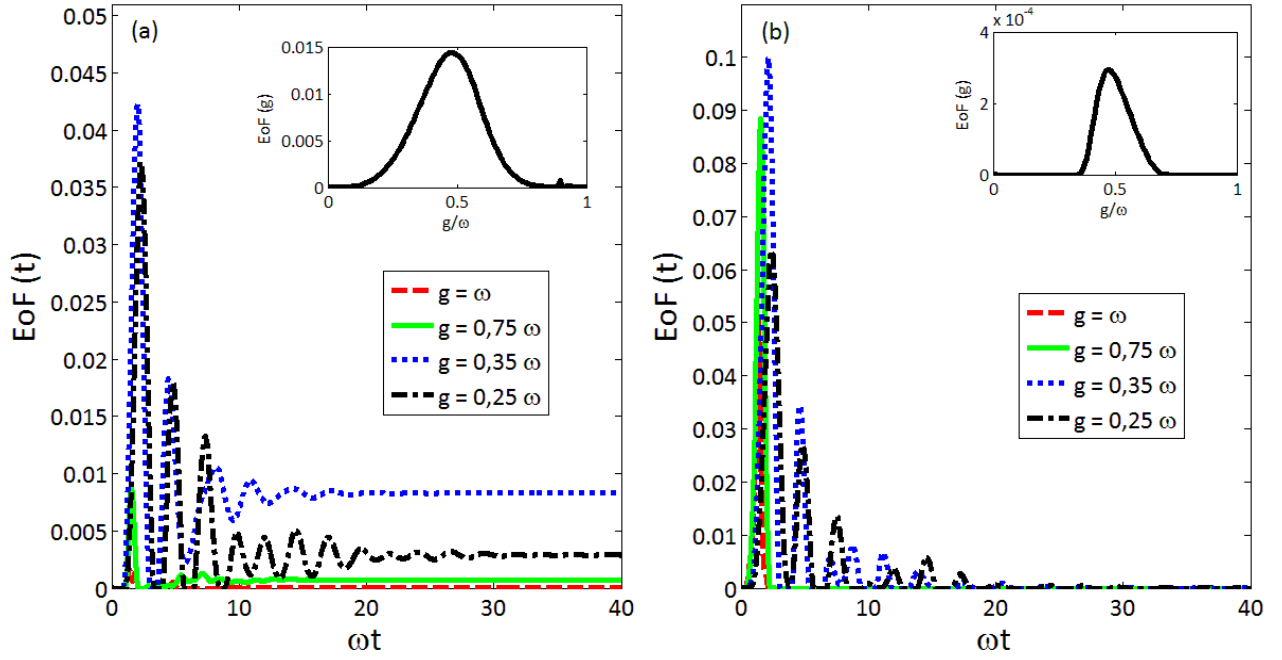


Figura 20: Gráficos do emaranhamento de formação em função de ωt , para $\kappa = 0,2\omega$, $\Delta = 0,01\omega$ e $g = \omega$ (linha vermelha tracejada), $g = 0,75\omega$ (linha verde sólida), $g = 0,35\omega$ (linha azul pontilhada) e $g = 0,25\omega$ (linha preta tracejada e pontilhada), e do emaranhamento de formação em função do acoplamento g ("inset"), utilizando as

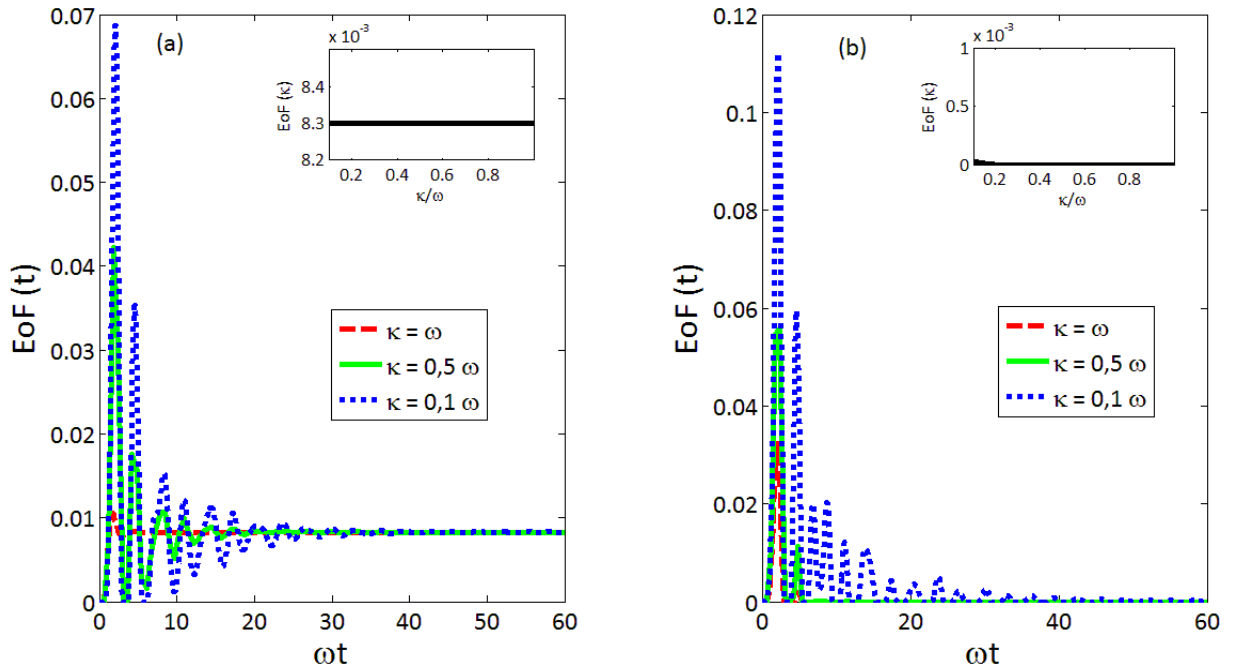


Figura 21: Gráficos do emaranhamento de formação em função de ωt , para $g = 0,35\omega$,

$\Delta = 0,01\omega$ e $\kappa = \omega$ (linha vermelha tracejada), $\kappa = 0,5\omega$ (linha verde s33lida) e $\kappa = 0,1\omega$ (linha azul pontilhada), e do emaranhamento de forma3333o em fun3333o da constante κ (inset), utilizando as equa3333es mestras (a) microsc3333pica e (b) fenomenol3333gica.

Para tornar mais clara a diferen3333a entre os resultados fornecidos pelas equa3333es mestras fenomenol3333gica e microsc3333pica, na Figura 22 comparamos a evolu3333o temporal da disc3333rdia obtida pelas duas equa3333es mestras e para um dado valor de $\kappa(= 0,2\omega)$.

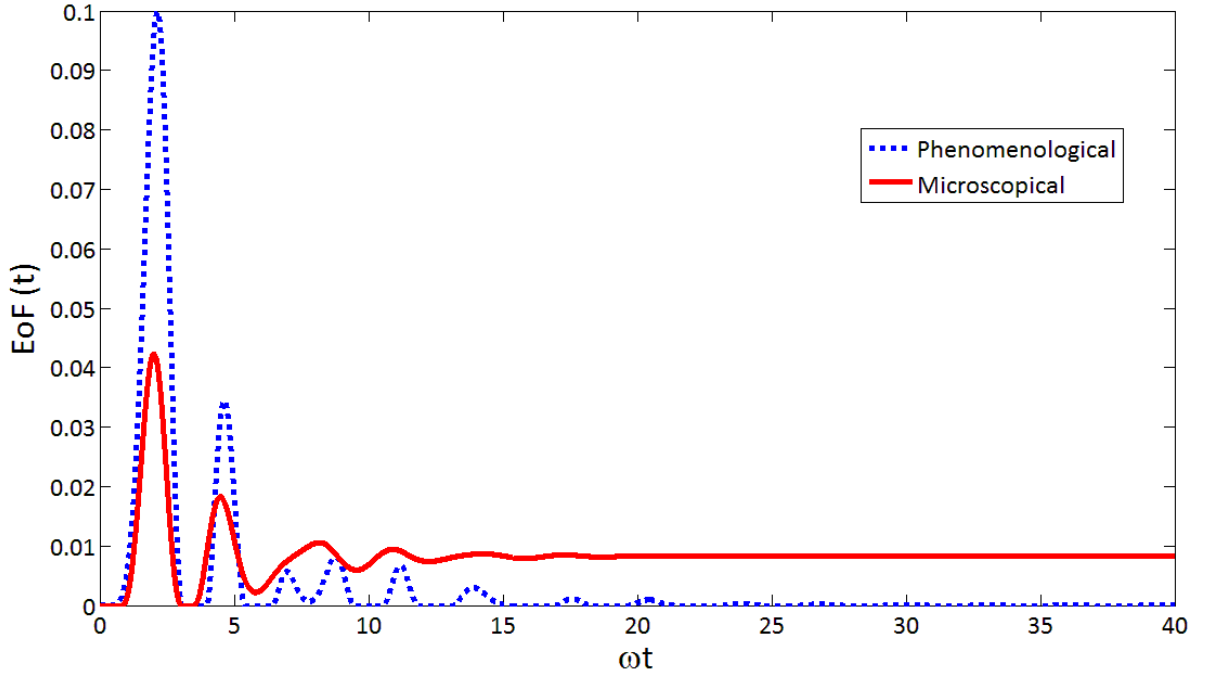


Figura 22: Gr3333fico da disc3333rdia em fun3333o de ωt , para $g = 0,35\omega$ e $\kappa = 0,2\omega$, usando as equa3333es mestras microsc3333pica (linha vermelha s3333lida) e fenomenol3333gica (linha azul pontilhada).

Observamos aqui que a equa3333o mestra fenomenol3333gica n3333o prev3333 um emaranhamento no estado estacion3333rio, enquanto que a microsc3333pica leva a um valor n3333o nulo para o EoF. Por fim, comparamos as curvas de $EoF \times g$, em um estado assint3333tico, para ambas equa3333es mestras, como vemos na Figura 23 abaixo.

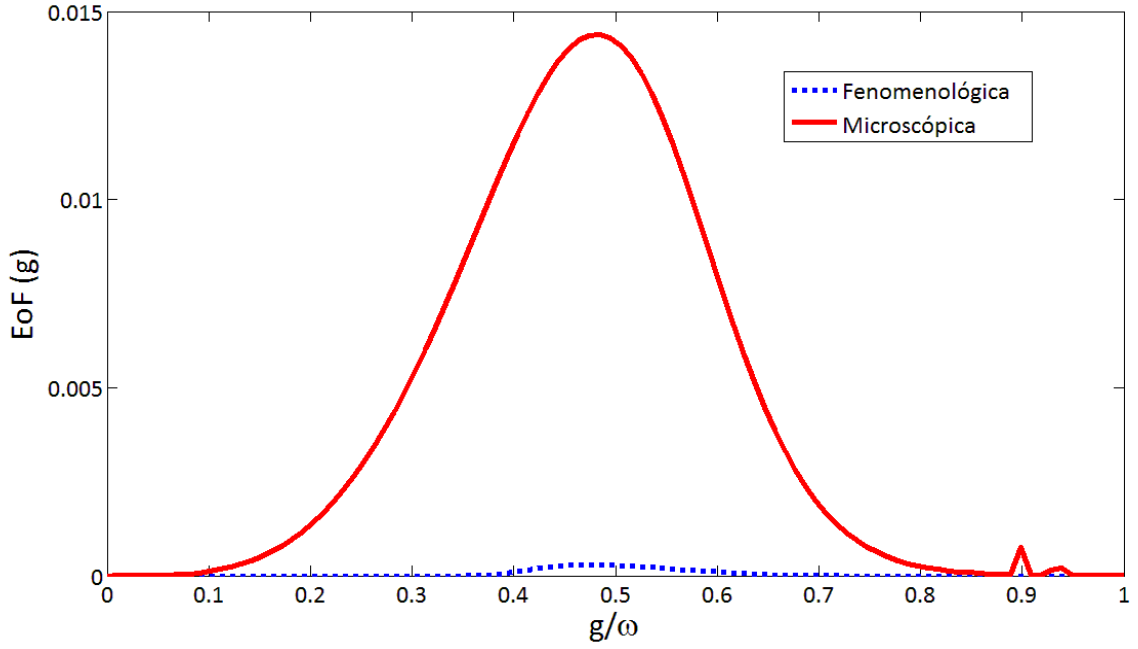


Figura 23: Gráfico do emaranhamento de formação em função de g , para $\kappa = 0, 2\omega$, usando as equações mestras microscópica (linha vermelha sólida) e fenomenológica (linha azul pontilhada).

O gráfico do emaranhamento de formação em função do acoplamento quando se utiliza a equação mestra microscópica apresenta algumas oscilações para valores próximos de $g = \omega$, o que acreditamos tratar-se de um erro numérico no cálculo computacional. Atualmente estamos trabalhando para solucionar esse problema.

Através desses resultados podemos observar que a equação mestra fenomenológica 32 é eficaz para explicar dados de medidas de discórdia quântica e emaranhamento de formação em um regime de acoplamento fraco, onde g não é forte o suficiente para mudar os autoestados do sistema. Entretanto, quando utilizamos valores maiores para o acoplamento g , tal abordagem deixa de ser válida, e devemos recorrer à equação mestra microscópica, apresentada na seção 3.2.

Isso acontece porque, num regime de acoplamento forte, a interação entre o átomo e o campo não pode ser desconsiderada na dedução da equação mestra, o que nos permite afirmar que apenas a equação microscópica descreve corretamente o sistema nesse regime.

Podemos notar, ainda na Figura 21, a geração espontânea de emaranhamento entre os átomos quando utilizamos a equação mestra microscópica, o que ocorre de maneira menos expressiva na abordagem fenomenológica.

Conclusão

Nesse trabalho, inicialmente foram estudados os modelos de Rabi e Jaynes-Cummings para a interação entre radiação e matéria, analisando-se, sobretudo, a validade da aproximação de onda girante. Como esperado, observamos as oscilações no número médio de fótons devido ao modelo de Rabi no caso ideal, ou seja, sem dissipações no átomo ou no campo. Notamos também que, utilizando o modelo de Jaynes Cummings, no caso em que há dissipação apenas na cavidade, o sistema sai de seu estado fundamental só para $g > \omega$.

Em seguida, analisamos as diferenças devidas à escolha do modelo a ser utilizado nas simulações, observando discrepâncias entre os valores previstos pelos modelos de Rabi e Jaynes-Cummings para o estado estacionário do sistema, em casos de acoplamentos ultrafortes. Comparamos também as diferentes deduções para a equação mestra: a fenomenológica (padrão) e a microscópica. Aqui, as diferenças para os números médios de fótons e as populações atômicas chegaram a 23%, para $g = 0,35\omega$, o que nos leva a concluir que, para um regime de acoplamento forte, a utilização da equação mestra fenomenológica torna-se inadequada, uma vez que leva a resultados diferentes daqueles obtidos quando se considera a interação entre o átomo e o campo na dissipação.

Comparamos também nossos resultados com aqueles apresentados em [34], e concluímos que, para o regime de parâmetros usados naquele trabalho, a equação fenomenológica mostra-se eficaz para representar o modelo. Entretanto, para valores maiores do acoplamento, a equação mestra microscópica deve ser utilizada.

Estudamos, ainda, um modelo aproximado, representado pelo Hamiltoniano de Bloch-Siegert, obtido a partir de uma transformação no Hamiltoniano de Rabi. Comparamos os gráficos da evolução temporal do número médio de fótons e da população atômica para os dois modelos e concluímos que, para $g/\omega > 0,2$, a aproximação em questão perde sua validade, devendo ser usado o modelo de Rabi completo.

No capítulo seguinte, foram apresentadas situações em que um sistema formado por dois átomos e o campo está em contato com um reservatório, e, através de simulações de medidas de correlações quânticas, pudemos analisar o regime de validade de cada equação mestra e as diferenças entre os resultados previstos por elas. No caso da discórdia quântica, para $g = 0,35\omega$, a equação mestra microscópica prevê um resultado aproximadamente 31% menor para o estado estacionário do sistema do que o previsto pela equação feno-

menológica. No caso do emaranhamento de formação, observamos que apenas a equação mestra microscópica prevê um valor diferente de zero no estado estacionário.

A importância do trabalho repousa no fato de que os experimentos em Eletrodinâmica Quântica de Circuitos têm atingido acoplamentos cada vez mais fortes, chegando a um regime no qual a descrição correta só pode ser feita através do modelo de Rabi e da equação mestra microscópica, como demonstrado ao longo do texto.

Referências Bibliográficas

References

- [1] HAROCHE, S.; RAIMOND, J.-M. *"Exploring the Quantum: Atoms, Cavities and Photons"*. Oxford: Oxford University Press, 2006.
- [2] RAIMOND, J. -M.; BRUNE, M.; HAROCHE, S. *"Manipulating quantum entanglement with atoms and photons in a cavity"*. Reviews of Modern Physics, **73**, 565-580, 2001.
- [3] HULET, R.; KLEPPNER, D. *"Rydberg Atoms in Circular States"*. Physical Review Letters, **51**, 1430-1433, 1983.
- [4] BLAIS, A.; HUANG, R.-S.; WALLRAFF, A; GIRVIN, S.; SCHOELKOPF, R. *"Cavity quantum electrodynamics for superconducting electrical circuits: An architecture for quantum computation"*. Physical Review A, **69**, 062320, 2004.
- [5] BLAIS, A.; GAMBETTA, J.; WALLRAFF, A.; SCHUSTER, D.; GIRVIN, S.; DEVORET, M.; SCHOELKOPF, R. *"Quantum-information processing with circuit quantum electrodynamics"*. Physical Review A, **75**, 032329, 2007.
- [6] CLARKE, J.; WILHELM, F. *"Superconducting quantum bits"*. Nature, **453**, p. 1031-1042, 2008.
- [7] BEAUDOIN, F.; GAMBETTA, J. M.; BLAIS, A. *"Dissipation and Ultrastrong Coupling in Circuit QED"*. Physical Review A, **84**, 043832, 2011.
- [8] GLEYZES, S.; KUHR, S.; GUERLIN, C.; BERNU, J.; DELÉGLISE, S.; HOFF, U.; BRUNE, M.; RAIMOND, J.-M.; HAROCHE, S. *"Quantum jumps of light recording the birth and death of a photon in a cavity"*. Nature, **446**, p. 297-300, 2007.
- [9] FINK, J. M.; GÖPPL, M.; BAUR, M.; BIANCHETTI, R.; LEEK, P. J.; BLAIS, A.; WALLRAFF, A. *"Climbing the Jaynes-Cummings ladder and observing its \sqrt{n} nonlinearity in a cavity QED system"*. Nature, **454**, p. 315 - 318, 2008.

- [10] DODONOV, V. "*Nonstationary Casimir Effect and analytical solutions for quantum fields in cavities with moving boundaries*". *Advanced Chemical Physics*, **119**, 309, 2001.
- [11] CIUTI, C.; CARUSOTTO, I. "*On the ultrastrong vacuum Rabi coupling of an intersubband transition in a semiconductor microcavity*". *Journal of Applied Physics*, **101**, 081709, 2007.
- [12] DE LIBERATO, S.; CIUTI, C.; CARUSOTTO, I. "*Quantum vacuum radiation spectra from a semiconductor microcavity with a time-modulated vacuum Rabi frequency*". *Physical Review Letters*, **98**, 103602, 2007.
- [13] CIUTI, C.; BASTARD, G.; CARUSOTTO, I. "*Quantum vacuum properties of the intersubband cavity polariton field*". *Physical Review B*, **72**, 115303, 2005.
- [14] DODONOV, A.; CÉLERI, L.; PASCOAL, F.; LUKIN, M.; YELIN, S. "*Photon generation from vacuum in non-stationary circuit QED*". arxiv: 0806.4035, 2008.
- [15] RABI, I. I. "*On the Process of Space Quantization*". *Physical Review*, **49**, p. 324-328, 1936.
- [16] SCULLY, M. O.; ZUBAIRY, M. S. "*Quantum Optics*". Cambridge: Cambridge University Press, 1997. 630p.
- [17] WALLS, D. F.; MILBURN, G. J. "*Quantum Optics*". Berlin: Springer Verlag, 2007. 350p.
- [18] WERLANG, T. "*Estudo do Modelo de Rabi no Contexto de Sistemas Quânticos Abertos*". 2009. 56p. Dissertação de Mestrado em Física - Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2009.
- [19] YU, L.; ZHU, S.; LIANG, Q.; CHEN, G.; JIA, S. "*Analytical solutions for the Rabi model*". *Physical Review A*, **86**, 015803, 2012.
- [20] JAYNES, E. T.; CUMMINGS, F.W. "*Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the bean maser*". *Proceedings of the IEEE*, **51**, p. 89 - 109, 1963.

- [21] KLIMOV, A.; ROMERO, J.; SAAVEDRA, C. "*General properties of quantum systems interacting with a field mode in a low-Q cavity*". Physical Review A, **64**, 063802, 2001.
- [22] LARSON, J. "*Dynamics of the Jaynes-Cummings and Rabi models: old wine in new bottles*". Physical Scripta, **76**, p. 146-160, 2007.
- [23] BERLIN, G.; ALIAGA, J. "*Validity of the rotating wave approximation in the driven Jaynes-Cummings model*". Quantum Semiclassical Optics, **6**, 231, 2004.
- [24] PEREVERZEV, A.; BITTNER, E. "*Exactly solvable approximating models for Rabi Hamiltonian dynamics*". Physical Chemistry and Chemical Physics, **8**, p. 1378-1384, 2006.
- [25] DEBERGH, N.; KLIMOV, A. "*Quasi-Exactly Solvable Approach to the Jaynes-Cummings Model without Rotation Wave Approximation*". International Journal of Modern Physics A, **16**, p. 4057-4068, 2001.
- [26] IRISH, E. "*Generalized Rotating-Wave Approximation for Arbitrarily Large Coupling*". Physical Review Letters, **99**, 173601, 2007.
- [27] EMARY, C.; BRANDES, T. "*Chaos and the quantum phase transition in the Dicke model*". Physical Review E, **67**, 066203, 2003.
- [28] WUBS, M.; KOHLER, M.; HANGGI, P. "*Entanglement creation in circuit QED via Landau-Zener sweeps*". Photonics Spectra, **40**, 187, 2007.
- [29] SCHLEICH, W. P. "*Quantum Optics in Phase Space*". Berlin: Wiley-VCH Verlag, 2001. 695 p.
- [30] COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. "*Quantum Mechanics*". New York: John Willey, 1977. 1524p.
- [31] CARMICHAEL, H. "*An Open Systems Approach to Quantum Optics*". Berlin: Springer Verlag, 1993. 189p.
- [32] BREUER, H. D.; PETRUCCIONE, F. "*The Theory of Open Quantum Systems*". New York: Oxford University Press, 2006. 625p.

- [33] TAN, S. M. "*A Computational Toolbox for Quantum and Atomic Optics*". *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, **1**, p. 424-432, 1999.
- [34] WERLANG, T.; DODONOV, A.; DUZZIONI, E.; VILLAS-BÔAS, C. "*Rabi model beyond the rotating-wave approximation: Generation of photons from vacuum through decoherence*". *Physical Review A*, 053805, **78**, 2008.
- [35] SCALA, M.; MILITELLO, B.; MESSINA, A.; PILO, J.; MANISCALCO, S. "*Microscopic derivation of the Jaynes-Cummings model with cavity losses*". *Physical Review A*, **75**, 013811, 2007.
- [36] DORNER, R.; VEDRAL, V. "*Correlations in Quantum Physics*". arxiv:1208.4961, 2012.
- [37] OLLIVIER, H; ZUREK, W. "*Quantum discord: A measure of the quantumness of correlations*". *Physical Review Letters*, **88**, 017901, 2002.
- [38] WERLANG, T.; RIBEIRO, G.; RIGOLIN, G. "*Interplay between quantum phase transitions and the behavior of quantum correlations at finite temperatures*". Arxiv: 1205.1046, 2012.
- [39] SHANNON, C.; WEAVER, W. "*Mathematical Theory of Communication*". Urbana, IL: University of Illinois Press, 1963.
- [40] BENNETT, C. H.; DI VICENZO, D. P.; SMOLIN, J. A.; WOOTTERS, W. K. "*Mixed-state entanglement and quantum error correction*". *Physical Review A*, **54**, p. 3824 - 3851, 1996.
- [41] WOOTTERS, W. "*Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits*". *Physical Review Letters*, **80**, p. 2245-2248, 1998.
- [42] ALTINTAS, F.; ERYGIT, R. "*Creation of quantum correlations from an initially vacuum state between two atoms in a dissipative environment*". *Physics Letters A*, **376**, p. 1791 - 1796, 2012.

Apêndice A

O operador densidade

Segundo a teoria quântica, o vetor de estado contém toda a informação sobre um sistema. Entretanto, em muitos casos não se pode conhecer todos os detalhes do sistema - quando este possui muitos graus de liberdade, por exemplo - e um novo conceito se faz necessário. Um caso particular ocorre quando o sistema está acoplado a um reservatório, não sendo possível, portanto, manter o controle sobre o movimento de seus constituintes.

Primeiramente, consideremos um sistema cujo vetor de estado no instante t é dado por $|\psi(t)\rangle = \sum_m c_m(t) |u_m\rangle$, onde $\{|u_m\rangle\}$ forma uma base ortonormal no espaço de estado. O coeficiente $c_m(t)$ obedece à relação: $\sum_m |c_m(t)|^2 = 1$ ($|\psi(t)\rangle$ é normalizado). Se um observável A tem elementos de matriz $A_{mn} = \langle u_m | A | u_n \rangle$, então o valor médio de A no instante t é:

$$\langle A \rangle (t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \sum_{m,n} c_m^*(t) c_n(t) A_{mn} \quad (\text{A.1})$$

E, por fim, a evolução de $|\psi(t)\rangle$ é dada pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (\text{A.2})$$

Os coeficientes $c_m(t)$, que aparece na expressão do valor médio de A , são simplesmente os elementos da matriz do operador $|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$:

$$\langle u_m | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | u_n \rangle = c_m^*(t) c_n(t) \quad (\text{A.3})$$

Definimos aqui, então, o operador densidade:

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \quad (\text{A.4})$$

A matriz densidade é a representação do operador densidade na base $\{|u_m\rangle\}$, e seus elementos são dados por:

$$\rho_{mn}(t) = \langle u_m | \rho(t) | u_n \rangle = c_m^*(t) c_n(t) \quad (\text{A.5})$$

A especificação do operador densidade é suficiente para caracterizar o estado quântico do sistema [30]. Apresentaremos agora algumas propriedades importantes desse operador:

1. O traço da matriz densidade é igual a 1.

É possível chegar a essa conclusão a partir da conservação da probabilidade: $\sum_m |c_m(t)|^2 = \sum_m \rho_{mm}(t) = Tr \rho(t) = 1$

2. O valor médio de um observável A pode ser escrito em termos do operador densidade, a partir das relações A.1 e A.5:

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle (t) &= \sum_{m,n} c_m^*(t) c_n(t) A_{mn} \\
 &= \sum_{m,n} \rho_{nm}(t) \cdot A_{mn} = \\
 &= \sum_{m,n} \langle u_n | \rho(t) | u_m \rangle \langle u_m | A | u_n \rangle = \\
 &= \sum_n \sum_{m,n} \langle u_n | \rho(t) A | u_n \rangle = \\
 &= Tr \{ \rho(t) A \}
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

3. A evolução temporal do operador densidade é dada pela equação de Liouville-von Neumann:

Utilizando a equação de Schrödinger A.2, obtemos:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \rho(t) &= \left(\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right) \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \left(\frac{d}{dt} \langle \psi(t)| \right) = \\
 &= \frac{1}{i\hbar} H(t) |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| + \frac{1}{-i\hbar} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| H(t) = \\
 &= \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)]
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

Para um estado puro, o sistema pode ser descrito tanto pelo vetor de estado como pelo operador densidade. No entanto, essa última opção traz algumas vantagens, como por exemplo a eliminação dos problemas advindos da existência de um fator de fase global no vetor de estado.

Vamos avaliar agora o caso em que um sistema está em um estado de mistura, ou seja, pode assumir qualquer estado $|\psi_j\rangle$, com $j = 0, 1, \dots$. Por estar nessa situação, não

se pode dizer que o sistema está no estado $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ ou em um $|\psi_j\rangle$ qualquer, nem ainda descrever seu estado utilizando uma superposição. Como a única coisa que podemos saber em um estado de mistura é a probabilidade $P_{|\psi_j\rangle}$ com que cada estado $|\psi_j\rangle$ aparece, o "estado quântico" do sistema é descrito pelo operador densidade:

$$\hat{\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} P_{|\psi_j\rangle} |\psi_j\rangle \langle \psi_j| = \sum_{j=0}^{\infty} \rho_{jj} |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \quad (\text{A.8})$$

Nota-se que este operador só possui os elementos diagonais do operador $|\psi_j\rangle \langle \psi_k|$, e podemos facilmente reconhecer que cada um desses elementos $\langle \psi_m | \hat{\rho} | \psi_m \rangle = P_{|\psi_m\rangle}$ representa a probabilidade $P_{|\psi_m\rangle}$ de se encontrar o sistema no estado $|\psi_m\rangle$. A soma de todas as probabilidades deve ser, claramente, 1. Logo, o traço de $\hat{\rho}$ é igual à unidade também para um estado de mistura.

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \sum_{m=0}^{\infty} \langle \psi_m | \hat{\rho} | \psi_m \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} P_{|\psi_m\rangle} = 1 \quad (\text{A.9})$$

De fato, podemos generalizar todas as propriedades apresentadas e aplicá-las também a um estado de mistura [Cohen]. O significado físico dos coeficientes ρ_{mn} da matriz densidade na base $\{u_m\}$ também merece destaque: os termos diagonais (ρ_{mm}), como já citado, representam a probabilidade média de se encontrar o sistema em um determinado estado ($|u_m\rangle$), e são chamados de "populações". Já os termos "cruzados" expressam os efeitos da interferência entre $|u_m\rangle$ e $|u_n\rangle$ quando $|\psi_k\rangle$ é uma superposição linear coerente desses estados. Por isso, esses coeficientes são chamados de "coerência".

Consideremos agora dois sistemas (1) e (2) acoplados, gerando um sistema global (1) + (2). O espaço dos estados é o produto tensorial $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$. O operador densidade ρ do sistema global é um operador que atua em \mathcal{E} . A construção de um operador ρ_1 (ou ρ_2), que atua apenas em \mathcal{E}_1 (ou \mathcal{E}_2) é feita a partir do conceito de traço parcial.

Se $\{|u_n(1)\rangle\}$ forma uma base de \mathcal{E}_1 , e $\{|v_p(2)\rangle\}$ forma uma base de \mathcal{E}_2 , então $\{|u_n(1)\rangle |v_p(2)\rangle\}$ forma uma base de \mathcal{E} . Nessa situação, os elementos de matriz do operador ρ_1 são dados por:

$$\langle u_n(1) | \rho_1 | u_m(1) \rangle = \sum_p [\langle u_n(1) | \langle v_p(2) | \rho | |u_m(1)\rangle |v_p(2)\rangle] \quad (\text{A.10})$$

Pela definição, ρ_1 é obtido através de ρ por um traço parcial sobre (2):

$$\rho_1 = \text{Tr}_{(2)} \rho \quad (\text{A.11})$$

Pode-se também verificar que:

$$\text{Tr}\rho = \text{Tr}_{(1)} (\text{Tr}_{(2)}\rho) = \text{Tr}_{(2)} (\text{Tr}_{(1)}\rho) \quad (\text{A.12})$$

Apêndice B

Termos dissipativos da equação mestra fenomenológica

A partir do formalismo microscópico para a equação mestra, é possível deduzir os termos dissipativos que aparecem na equação fenomenológica apenas considerando, inicialmente, a dissipação de um átomo sozinho em contato com um reservatório e, depois, a dissipação do campo sozinho, sem considerar a interação entre o átomo e o campo.

B.1 Dissipação apenas no campo

O termo dissipativo da equação mestra microscópica é dado na eq. 90:

$$D(\rho_S(t)) \equiv \sum_{\alpha, \beta, \omega} \gamma_{\alpha, \beta} (A_\beta(\omega) \rho_S A_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} [A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \rho_S(t)]), \quad (\text{B.1})$$

onde $\gamma_{\alpha, \beta}$ é dado na eq. 81:

$$\gamma_{\alpha, \beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} \langle B_\alpha^\dagger(s) B_\beta(0) \rangle. \quad (\text{B.2})$$

Nas equações acima, $B_{\alpha(\beta)}$ representa os operadores do reservatório, e $A_{\alpha(\beta)}(\omega)$ é dado por:

$$A_\alpha(\omega) \equiv \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} \Pi(\varepsilon) A_\alpha \Pi(\varepsilon'), \quad (\text{B.3})$$

onde $A_{\alpha(\beta)}$ representa os operadores do sistema átomo + campo.

Considerando apenas um átomo ou um campo, os índices α e β na eq. B.1 acima desaparecem:

$$D(\rho_S(t)) \equiv \sum_{\omega} \gamma(A(\omega) \rho_S A^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} [A^\dagger(\omega) A(\omega), \rho_S(t)]). \quad (\text{B.4})$$

Para um campo em contato com o reservatório, o operador é $A = a + a^\dagger$. Calculamos, a partir da eq. B.3, na base de número ($\{|n\rangle\}$):

$$\begin{aligned} A(\omega) &= \sum_{n, n'} |n\rangle \langle n| (a + a^\dagger) |n'\rangle \langle n'| \\ &= \sum_{n, n'} \{ |n\rangle \langle n| a |n'\rangle \langle n'| + |n\rangle \langle n| a^\dagger |n'\rangle \langle n'| \} \\ &= \sum_{n, n'} \{ |n\rangle \langle n'| \sqrt{n'} \delta_{n, n'-1} + |n\rangle \langle n'| \sqrt{n'+1} \delta_{n, n'+1} \} \\ &= \sum_n |n\rangle \langle n+1| \sqrt{n+1} = \sum_n |n\rangle \langle n| a = a. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Nesse desenvolvimento, o segundo termo, referente ao a^\dagger , foi eliminado ao considerarmos $\varepsilon' > \varepsilon$ nos níveis de energia. Agora nos falta encontrar uma expressão para a função $\gamma(\omega)$. Para um reservatório térmico em equilíbrio a uma temperatura T , $\gamma(\omega)$ é dada por [32]:

$$\gamma(\omega) = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} (n_t(\omega) + 1), \quad (\text{B.6})$$

onde $n_t(\omega)$ é o número de fótons térmicos do reservatório, e é obtido pela distribuição de Planck:

$$n(t) = \frac{1}{\exp(\beta\hbar\omega) - 1}, \quad (\text{B.7})$$

sendo $\beta = 1/T$. Essa distribuição satisfaz a condição:

$$n_t(-\omega) = - (n_t(\omega) + 1). \quad (\text{B.8})$$

Para calcularmos a expressão B.4, então, efetuamos a somatória sobre frequências positivas e negativas separadamente. Quando $\omega > 0$,

$$D = \sum_{\omega>0} \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} (n_t(\omega) + 1) \left(A(\omega) \rho_S A^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} [A^\dagger(\omega) A(\omega), \rho_S(t)] \right). \quad (\text{B.9})$$

Já para frequências negativas, temos:

$$D = \sum_{\omega<0} \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} (n_t(\omega) + 1) \left(A(\omega) \rho_S A^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} [A^\dagger(\omega) A(\omega), \rho_S(t)] \right). \quad (\text{B.10})$$

Essa somatória pode ser reescrita como :

$$D = \sum_{\omega>0} \frac{-4\omega^3}{3\hbar c^3} (n_t(-\omega) + 1) \left(A(-\omega) \rho_S A^\dagger(-\omega) - \frac{1}{2} [A^\dagger(-\omega) A(-\omega), \rho_S(t)] \right). \quad (\text{B.11})$$

Usando a equação B.8 e a propriedade que diz que $A(-\omega) = A^\dagger(\omega)$ (e, analogamente, $A^\dagger(-\omega) = A(\omega)$):

$$D = \sum_{\omega>0} \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} n_t(\omega) \left(A^\dagger(\omega) \rho_S A(\omega) - \frac{1}{2} [A(\omega) A^\dagger(\omega), \rho_S(t)] \right). \quad (\text{B.12})$$

Então, temos a expressão final:

$$D = \sum_{\omega>0} \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} (n_t(\omega) + 1) \left(A(\omega) \rho_S A^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} [A^\dagger(\omega) A(\omega), \rho_S(t)] \right) + \sum_{\omega>0} \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} n_t(\omega) \left(A^\dagger(\omega) \rho_S A(\omega) - \frac{1}{2} [A(\omega) A^\dagger(\omega), \rho_S(t)] \right). \quad (\text{B.13})$$

Quando se considera a dissipação apenas em um modo do campo, de frequência ω , a expressão fica:

$$D = \kappa (n_t + 1) \mathcal{D}[a] \rho_S + \kappa (n_t) \mathcal{D}[a^\dagger] \rho_S, \quad (\text{B.14})$$

onde $\mathcal{D}[a] \rho_S \equiv a \rho_S a^\dagger - \frac{1}{2} a^\dagger a \rho_S - \frac{1}{2} \rho_S a^\dagger a$, e $\kappa = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}$.

B.1 Dissipação apenas no átomo

Para um átomo em contato com o reservatório, temos o operador $A = \sigma_+ + \sigma_-$. Temos então, a partir da eq. B.3:

$$A_\alpha(\omega) \equiv \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} \Pi(\varepsilon) A_\alpha \Pi(\varepsilon') = \sum_{\omega_e - \omega_g = \omega_0} |g\rangle \langle g| (\sigma_+ + \sigma_-) |e\rangle \langle e| = |g\rangle \langle e| = \sigma_-. \quad (\text{B.15})$$

O termo dissipativo (eq. B.13) então fica:

$$D = \gamma (n_t + 1) \mathcal{D}[\sigma_-] \rho_S + \gamma (n_t) \mathcal{D}[\sigma_+] \rho_S. \quad (\text{B.16})$$

Podemos observar que tanto a expressão para o átomo quanto a do campo recuperam os termos dissipativos do Liouvilliano da equação mestra fenomenológica.