Interação da radiação com a matéria

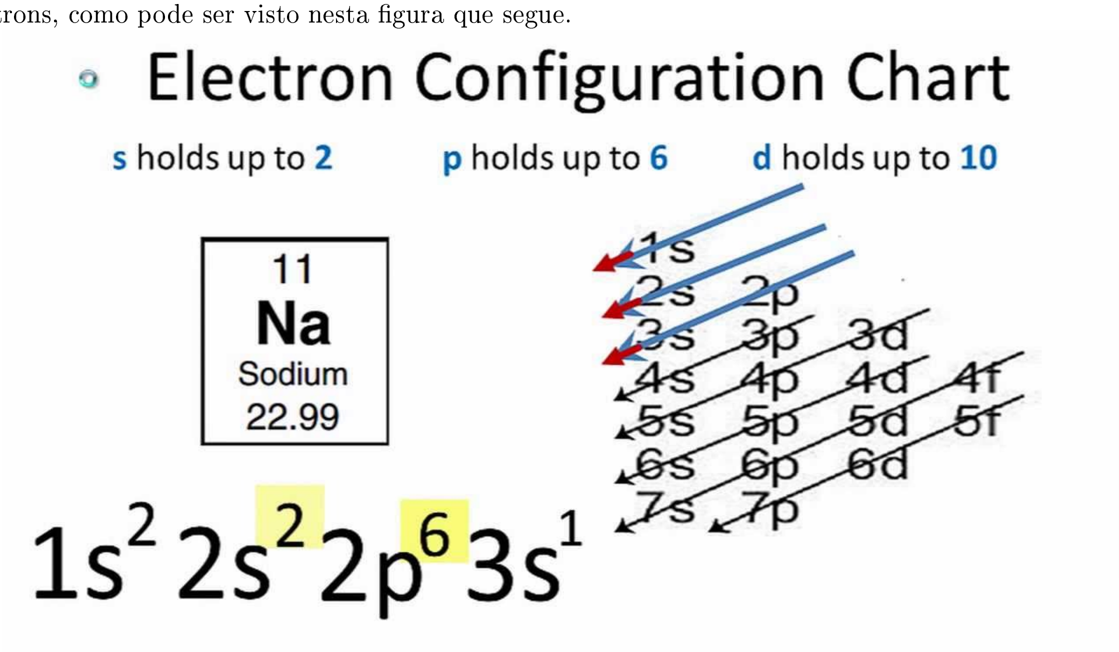
Algumas observações referentes à aula passada

Primeiramente, não ficou claro que a transformação de Power & Zienau & Woolley que adotamos não é a mais geral que estes autores introduziram. É possível ter mais termos na hamiltoniana quando a aproximação de dipolo elétrico não é utilizada. Vejamos, por exemplo, Perspective: Quantum Hamiltonians for optical interactions. Para simplificar as coisas, estivemos utilizando a aproximação de dipolo elétrico, que é suficiente para os propósitos deste curso. Também é importante notar que se tivermos um átomo com Z prótons no núcleo, o valor esperado da distância radial é dada por

$$\langle r\rangle = \frac{a_0 n^2}{Z}\left[1+\frac{1}{2}\left(1-\frac{\ell\left(\ell+1\right)}{n^2}\right)\right].$$

Notemos, no entanto, que este valor esperado é apenas para um único elétron orbitando um núcleo com Z prótons. $n = 1, 2, \ldots$ são os números quânticos principais e $\ell = s, p, d, \ldots, n-1$ são os números quânticos do momentum angular do elétron, onde $s, p, d, \ldots$ significam $\ell = 0, 1, 2, \ldots$, respectivamente.

Em segundo lugar, o átomo de sódio tem a configuração eletrônica dada por $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$, já que o sódio tem 11 elétrons, como pode ser visto nesta figura que segue.



Já a configuração eletrônica do átomo de rubídio é dada por $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^1$, que pode ser também visto na figura acima, mas agora temos 37 elétrons. Notemos que a ordem que se verifica não é a do esquema da figura que é obedecido pelo sódio: o $4s$ aparece depois do $3d$, enquanto, pela figura, deveria ser ao contrário. Para uma boa tabela periódica on-line, podemos olhar Tabela Periódica online.

Para ver a estrutura hiperfina dos estados do sódio, temos a figura que seguinte. Notemos que o spin nuclear do sódio 23 é $I = 3/2$.

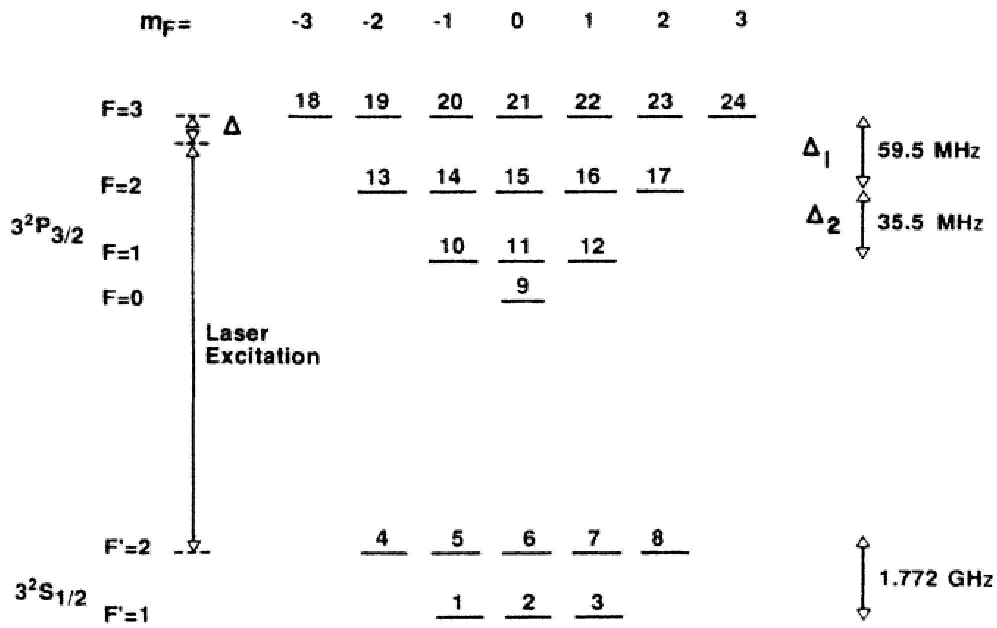
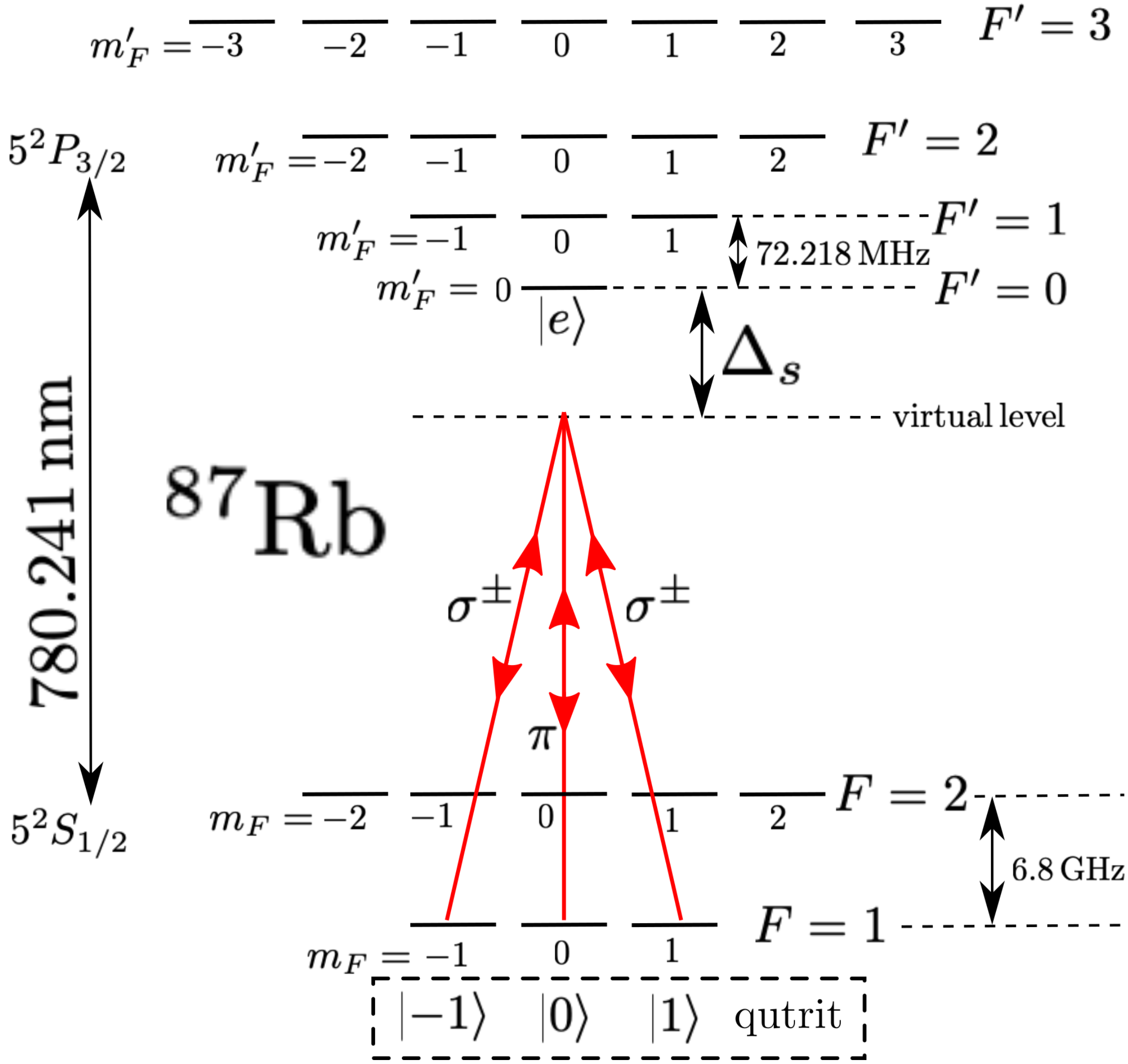


FIG. 1. D_2 line of sodium in hyperfine representation. The states are labeled for direct reference. Δ is the light detuning in rad s^{-1} from the $F'=2\rightarrow F=3$ transition and Δ_1 (Δ_2) is the frequency splitting in rad s^{-1} of the $F=2$ ($F=1$) level from the $F=3$ ($F=2$) level.

Como exemplo, também temos a figura a seguir para o rubídio 87, que utilizamos em recente artigo sobre um possível qutrit atômico. Para esta variedade isotópica, $I = 3/2$, que possibilita, como para o sódio acima, que tenhamos um nível fundamental com três componentes Zeeman, já que, neste caso, $F = 1$ para o nível fundamental. Esses estados hyperfinos foram os que utilizamos para constituir nosso qutrit. Há também, mais abundante, a variedade rubídio 85, com $I = 5/2$, mas aí teríamos um estado fundamental com $F = 2$, com cinco componentes Zeeman, e isso poderia dar para emular um quidit com $d = 5$.



Átomo de dois níveis (e estados) de energia (reprise e continuação)

Neste curso não estaremos lidando com as entranhas atômicas, pois não é um curso de física atômica. Para nossos objetivos, vamos supor que já temos todos os auto-estados de energia calculados para a hamiltoniana atômica,

$$H_{at} \equiv \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + q\phi_p(\mathbf{r}) + \sum_{\lambda,s} \hbar\omega_s \left(\mathbf{u}_{\lambda,s} \cdot \mathbf{r}\right)^2 .$$

Logo, vamos escrevê-la como

$$H_{at} = \sum_n E_n \left|n\right\rangle \left\langle n\right| ,$$

onde a soma vai ser infinita e simboliza a parte discreta como também a parte contínua do espectro atômico.

Com bombeamento óptico, por exemplo em sódio, como mostra a figura acima, usando um laser com polarização circular σ^{+}, isto é, se o laser se propaga com $\hat{\mathbf{k}} = \hat{\mathbf{z}}$ e $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{+} \equiv (-\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}})\sqrt{2}$, então somente o estado excitado com $F' = 3$ e $M_{F'} = +3$ e o estado fundamental $F = 2$ e $M_F = +2$ participam da dinâmica em regime estacionário. Desprezando a duração dos efeitos transientes iniciais, podemos efetivamente apenas considerar esses dois estados quânticos como o espaço de Hilbert atômico e escrever a nossa hamiltoniana atômica efetiva como

$$H_{at} = E_0 \left|0\right\rangle \left\langle 0\right| + E_1 \left|1\right\rangle \left\langle 1\right|, \tag{1}$$

onde $|0\rangle$ é o estado fundamental com $F = 2$ e $M_F = +2$ e $|1\rangle$ é o estado excitado com $F' = 3$ e $M_{F'} = +3$.

Estado coerente

O laser tipicamente é dito coerente. Mas o que é isso? Ao longo do curso vamos entender melhor o que a palavra coerente quer dizer em vários contextos. Aqui, o que vamos fazer é pensar que o laser é, para todos os efeitos, um número grande de fótons em um só modo, digamos, (λ, s), na representação discreta. Entretanto, não podemos ter, nesse caso, um estado com número definido. Por quê? É que a luz do laser é como se fosse clássica, mas quase que monocromática, com uma fase quase que bem definida. Podemos dar uma olhada em COHERENT STATES AND THE NUMBER-PHASE UNCERTAINTY RELATION e veremos que há uma ideia de que quando a fase é bem definida, o número tem que ser indefinido e vice-versa, como no princípio de incerteza entre posição e momentum. Então, como um laser tem a cara de luz clássica e com fase bem definida em uma boa aproximação, mas também aproximadamente monocromática, esperamos que o número de fótons seja indefinido. Um comportamento clássico implica em mínima incerteza e o comportamento de um oscilador harmônico, com mínima incerteza, é uma gaussiana na posição e, assim, em termos de uma superposição de estados de número, dá o que se chama estado coerente, com o comportamento mais clássico para a dinâmica do pacote de onda.

Já do nosso ponto de vista, independentemente da "mitologia cosmogônica" histórica a respeito dessas coisas todas, podemos raciocinar de forma mais desprovida de "pé-no-chão" e usar o fato de que tanto faz o ponto de vista que adotamos, bastando utilizar uma transformação unitária para trocar esse ponto de vista. Então, vamos definir o estado coerente como sendo aquele que é auto-estado do operador aniquilação e depois veremos onde chegamos com isso. Aqui, vamos utilizar um só modo e, por enquanto, então, não vamos ficar carregando índices.

Seja $|\alpha\rangle$ o auto-estado do operador a com auto-valor α. Assim,

$$a\left|\alpha\right\rangle = \alpha\left|\alpha\right\rangle.$$

É um bom exercício mostrar que

$$\left|\alpha\right\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\left|n\right\rangle$$

e este é o chamado estado coerente, onde $\alpha \in \mathbb{C}$, sem problema algum, já que a não é hermitiano. Se fosse hermitiano, então seu auto-valor teria que ser obrigatoriamente real. Aqui, isso não é necessário. Vejamos que

$$\left|n\right\rangle = \frac{\left(a^{\dagger}\right)^n}{\sqrt{n!}}\left|0\right\rangle$$

e, portanto,

$$\left|\alpha\right\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\frac{\left(a^{\dagger}\right)^n}{\sqrt{n!}}\left|0\right\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= \exp\left(-\frac{|\alpha|^{2}}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{n}\left(a^{\dagger}\right)^{n}}{n!}|0\rangle \\
&= \exp\left(-\frac{|\alpha|^{2}}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(\alpha a^{\dagger}\right)^{n}}{n!}|0\rangle \\
&= \exp\left(-\frac{|\alpha|^{2}}{2}\right)\exp\left(\alpha a^{\dagger}\right)|0\rangle .
\end{aligned}
$$

Vamos agora enunciar a proposição de que vale a igualdade

$$
\exp\left(-\alpha^{*}a+\alpha a^{\dagger}\right)|0\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^{2}}{2}\right)\exp\left(\alpha a^{\dagger}\right)|0\rangle .
$$

A demonstração desta tese é como segue. Seja

$$
w(\tau) \equiv \exp\left(\alpha a^{\dagger}\tau\right)\exp\left(-\alpha^{*}a\tau\right).
$$

Com isso,

$$
\frac{dw(\tau)}{dt} = \alpha a^{\dagger}\exp\left(\alpha a^{\dagger}\tau\right)\exp\left(-\alpha^{*}a\tau\right)-\alpha^{*}\exp\left(\alpha a^{\dagger}\tau\right)a\exp\left(-\alpha^{*}a\tau\right).
$$

Mas, notemos que

$$
\left[a,\left(a^{\dagger}\right)^{n}\right] = n\left(a^{\dagger}\right)^{n-1}
$$

e, portanto,

$$
\begin{aligned}
\left[a,\exp\left(\tau\alpha a^{\dagger}\right)\right] &= \left[a,\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\tau\alpha)^{n}\left(a^{\dagger}\right)^{n}\right] \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\tau\alpha)^{n}\left[a,\left(a^{\dagger}\right)^{n}\right] \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\tau\alpha)^{n}n\left(a^{\dagger}\right)^{n-1} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}(\tau\alpha)^{n}n\left(a^{\dagger}\right)^{n-1} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}(\tau\alpha)^{n}\left(a^{\dagger}\right)^{n-1} \\
&= \tau\alpha\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}(\tau\alpha)^{n-1}\left(a^{\dagger}\right)^{n-1} \\
&= \tau\alpha\exp\left(\tau\alpha a^{\dagger}\right).
\end{aligned}
$$

Assim,

$$
a\exp\left(\tau\alpha a^{\dagger}\right)-\exp\left(\tau\alpha a^{\dagger}\right)a = \tau\alpha\exp\left(\tau\alpha a^{\dagger}\right),
$$

ou seja,

$$\exp\left(\tau\alpha a^{\dagger}\right)a \quad = \quad (a-\tau\alpha)\exp\left(\tau\alpha a^{\dagger}\right). \tag{2}$$

Sendo assim,

$$\begin{aligned}
\frac{dw(\tau)}{dt} &= \alpha a^{\dagger}\exp\left(\alpha a^{\dagger}\tau\right)\exp\left(-\alpha^{*}a\tau\right) \\
&\quad -\alpha^{*}\left[a\exp\left(\tau\alpha a^{\dagger}\right)-\tau\alpha\exp\left(\tau\alpha a^{\dagger}\right)\right]\exp\left(-\alpha^{*}a\tau\right) \\
&= \left(\alpha a^{\dagger}-\alpha^{*}a\right)\exp\left(\tau\alpha a^{\dagger}\right)\exp\left(-\alpha^{*}a\tau\right) \\
&\quad +\tau\left|\alpha\right|^{2}\exp\left(\tau\alpha a^{\dagger}\right)\exp\left(-\alpha^{*}a\tau\right),
\end{aligned}$$

isto é,

$$\frac{dw(\tau)}{dt} \quad = \quad \left(\alpha a^{\dagger}-\alpha^{*}a+\tau\left|\alpha\right|^{2}\right)w(\tau).$$

Integrando, obtemos

$$w(\tau) \quad = \quad \exp\left(\frac{\left|\alpha\right|^{2}}{2}\tau^{2}\right)\exp\left[\left(\alpha a^{\dagger}-\alpha^{*}a\right)\tau\right]w(0).$$

Como

$$w(0) \quad = \quad \mathbb{I},$$

segue que

$$w(1) \quad = \quad \exp\left(\frac{\left|\alpha\right|^{2}}{2}\right)\exp\left(\alpha a^{\dagger}-\alpha^{*}a\right)$$

e, vendo que, de sua definição, temos

$$w(1) \quad = \quad \exp\left(\alpha a^{\dagger}\right)\exp\left(-\alpha^{*}a\right),$$

obtemos a tese de nossa proposição acima, ou seja,

$$\exp\left(\alpha a^{\dagger}\right)\exp\left(-\alpha^{*}a\right) \quad = \quad \exp\left(\frac{\left|\alpha\right|^{2}}{2}\right)\exp\left(\alpha a^{\dagger}-\alpha^{*}a\right), \tag{3}$$

isto é,

$$\exp\left(\alpha a^{\dagger}\right) \quad = \quad \exp\left(\frac{\left|\alpha\right|^{2}}{2}\right)\exp\left(\alpha a^{\dagger}-\alpha^{*}a\right)\exp\left(\alpha^{*}a\right).$$

Logo,

$$\begin{aligned}
\exp\left(\alpha a^{\dagger}\right)|0\rangle &= \exp\left(\frac{\left|\alpha\right|^{2}}{2}\right)\exp\left(\alpha a^{\dagger}-\alpha^{*}a\right)\exp\left(\alpha^{*}a\right)|0\rangle \\
&= \exp\left(\frac{\left|\alpha\right|^{2}}{2}\right)\exp\left(\alpha a^{\dagger}-\alpha^{*}a\right)|0\rangle,
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\exp\left(\alpha a^{\dagger}-\alpha^{*}a\right)|0\rangle \quad = \quad \exp\left(-\frac{|\alpha|^{2}}{2}\right)\exp\left(\alpha a^{\dagger}\right)|0\rangle\,,$$

que é o que estavamos demonstrando.

Toda essa discussão possibilita agora escrevermos que

$$|\alpha\rangle \quad = \quad \exp\left(\alpha a^{\dagger}-\alpha^{*}a\right)|0\rangle$$

e também podemos usar

$$|\alpha\rangle \quad = \quad \exp\left(-\frac{|\alpha|^{\,2}}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{n}}{\sqrt{n!}}|n\rangle\,.$$

Se a hamiltoniana para esse modo do laser coerente é apenas o termo

$$H_{L} \quad \equiv \quad \hbar\omega_{L}a^{\dagger}a,$$

então o laser, sozinho, começando do estado $|\alpha\rangle$ em $t=0$, vai evoluir como

$$\begin{aligned}
|\psi_{L}(t)\rangle &= \exp\left(-i\frac{H_{L}}{\hbar}t\right)|\alpha\rangle\\
&= \exp\left(-i\omega_{L}ta^{\dagger}a\right)\exp\left(-\frac{|\alpha|^{\,2}}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{n}}{\sqrt{n!}}|n\rangle\\
&= \exp\left(-\frac{|\alpha|^{\,2}}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{n}}{\sqrt{n!}}\exp\left(-i\omega_{L}ta^{\dagger}a\right)|n\rangle\\
&= \exp\left(-\frac{|\alpha|^{\,2}}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{n}}{\sqrt{n!}}\exp\left(-i\omega_{L}tn\right)|n\rangle\\
&= \exp\left(-\frac{|\alpha|^{\,2}}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left[\alpha\exp\left(-i\omega_{L}t\right)\right]^{n}}{\sqrt{n!}}|n\rangle\\
&= \exp\left(-\frac{|\alpha\exp\left(-i\omega_{L}t\right)|^{\,2}}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left[\alpha\exp\left(-i\omega_{L}t\right)\right]^{n}}{\sqrt{n!}}|n\rangle\\
&= |\alpha\exp\left(-i\omega_{L}t\right)\rangle\,.
\end{aligned} \tag{4}$$

Mas, dado o outro resultado,

$$|\alpha\rangle \quad = \quad \exp\left(\alpha a^{\dagger}-\alpha^{*}a\right)|0\rangle\,,$$

então fica evidente que

$$|\alpha\exp\left(-i\omega_{L}t\right)\rangle \quad = \quad \exp\left[\alpha\exp\left(-i\omega_{L}t\right)a^{\dagger}-\alpha^{*}\exp\left(i\omega_{L}t\right)a\right]|0\rangle\,.$$

Equivalentemente,

$$|0\rangle \quad = \quad \exp\left[\alpha^{*}\exp\left(i\omega_{L}t\right)a-\alpha\exp\left(-i\omega_{L}t\right)a^{\dagger}\right]|\alpha\exp\left(-i\omega_{L}t\right)\rangle\,.$$

Seja agora a nova operação unitária

$$U_L(t) \equiv \exp\left[\alpha^* \exp(i\omega_L t)\, a - \alpha \exp(-i\omega_L t)\, a^\dagger\right].$$

Suponhamos uma Hamiltoniana não interagente como

$$H_{n-int} \equiv H_{at} + \sum_{\lambda,s} \hbar\omega_s \left(a^\dagger_{\lambda,s} a_{\lambda,s} + \frac{1}{2}\right),$$

onde H_{at} é dada pela Eq. (1). A hamiltoniana H_{n-int} descreve a dinâmica do átomo e da radiação, mas sem que a radiação interaja com o átomo. Isso pode, aproximadamente, ocorrer se, por exemplo, mesmo que o modo ocupado pelo laser seja intenso, isto é, tenha uma amplitude $|\alpha|^2$ muito maior do que a unidade, se ω_L for muito diferente do que a separação entre os níveis de energia do átomo, então não vai haver interação efetiva. Note que podemos usar o estado inicial do laser como sendo $|\alpha\rangle$ e calcular o valor esperado do número de fótons nesse modo e obter

$$\begin{aligned} \langle\alpha| \sum_{\lambda,s} a^\dagger_{\lambda,s} a_{\lambda,s} |\alpha\rangle &= \left(\langle\alpha| a^\dagger_L\right)\left(a_L |\alpha\rangle\right) \\ &= \alpha^*\alpha \langle\alpha|\alpha\rangle \\ &= |\alpha|^2, \end{aligned}$$

onde estamos usando o subscrito L para indicar o modo ocupado pelo laser.

Então, supondo que o estado inicial do átomo seja

$$|\phi_{at}(0)\rangle = r|0\rangle + s|1\rangle,$$

com

$$|r|^2 + |s|^2 = 1,$$

e que o estado inicial da radiação seja

$$|\phi_{rad}(0)\rangle = \exp\left(\alpha a^\dagger_L - \alpha^* a_L\right)|\text{vac}\rangle,$$

onde $|\text{vac}\rangle$ indica mais explicitamente o estado do vácuo eletromagnético, então, após um intervalo de tempo t o estado do sistema total é dado por

$$\begin{aligned} |\psi_{n-int}(t)\rangle &= \exp\left(-i\frac{H_{n-int}}{\hbar}t\right)|\phi_{at}(0)\rangle \otimes |\phi_{rad}(0)\rangle \\ &= \left(r\exp(-i\omega_0 t)|0\rangle + s\exp(-i\omega_1 t)|1\rangle\right) \\ &\quad \otimes \exp\left[\alpha\exp(-i\omega_L t)\, a^\dagger_L - \alpha^*\exp(i\omega_L t)\, a_L\right]|\text{vac}\rangle. \end{aligned}$$

Vemos então que podemos mudar a representação para que o estado coerente inicial do laser seja trocado, nesta nova representação, pelo estado de vácuo. Para fazer isso basta definirmos o ket transformado para o sistema total como

$$|\psi_L(t)\rangle \equiv \exp\left[\alpha^*\exp(i\omega_L t)\, a_L - \alpha\exp(-i\omega_L t)\, a^\dagger_L\right]|\psi_{n-int}(t)\rangle.$$

Com esta nova representação o estado evoluído não interagente é como se não tivéssemos um laser inicial, mas apenas o vácuo eletromagnético, sem alteração para o estado inicial do átomo. Ou seja,

$$\begin{aligned}
|\psi_L(t)\rangle &= \exp\left[\alpha^* \exp(i\omega_L t)\, a_L - \alpha \exp(-i\omega_L t)\, a_L^\dagger\right] |\psi_{n-int}(t)\rangle \\
&= (r \exp(-i\omega_0 t)\, |0\rangle + s \exp(-i\omega_1 t)\, |1\rangle) \\
&\quad \otimes \exp\left[\alpha^* \exp(i\omega_L t)\, a_L - \alpha \exp(-i\omega_L t)\, a_L^\dagger\right] \\
&\quad \times \exp\left[\alpha \exp(-i\omega_L t)\, a_L^\dagger - \alpha^* \exp(i\omega_L t)\, a_L\right] |\mathrm{vac}\rangle\,,
\end{aligned}$$

isto é,

$$|\psi_L(t)\rangle = (r \exp(-i\omega_0 t)\, |0\rangle + s \exp(-i\omega_1 t)\, |1\rangle) \otimes |\mathrm{vac}\rangle\,.$$

(Continua!)