

Vamos agora resumir os traços que temos na equação mestra:

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_B \{A^\dagger(t) A(t') \rho_B(0)\} &= \mathrm{Tr}_B \{A(t') A^\dagger(t) \rho_B(0)\} - \mathcal{J}(t' - t) \\ &= \mathcal{G}(t' - t) - \mathcal{J}(t' - t) \\ &= \mathcal{G}^*(t - t') - \mathcal{J}^*(t - t'),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_B \{A^\dagger(t) \rho_B(0) A(t')\} &= \mathrm{Tr}_B \{A(t') A^\dagger(t) \rho_B(0)\} \\ &= \mathcal{G}^*(t - t'),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_B \{A(t') \rho_B(0) A^\dagger(t)\} &= \mathrm{Tr}_B \{\rho_B(0) A^\dagger(t) A(t')\} \\ &= \mathcal{G}^*(t - t') - \mathcal{J}^*(t - t'),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_B \{\rho_B(0) A(t') A^\dagger(t)\} &= \mathrm{Tr}_B \{A^\dagger(t) \rho_B(0) A(t')\} \\ &= \mathcal{G}^*(t - t'),\end{aligned}$$

$$\mathrm{Tr}_B \{A(t) A^\dagger(t') \rho_B(0)\} = \mathcal{G}(t - t'),$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_B \{A(t) \rho_B(0) A^\dagger(t')\} &= \mathrm{Tr}_B \{\rho_B(0) A^\dagger(t') A(t)\} \\ &= \mathcal{G}(t - t') - \mathcal{J}(t - t'),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_B \{A^\dagger(t') \rho_B(0) A(t)\} &= \mathrm{Tr}_B \{\rho_B(0) A(t) A^\dagger(t')\} \\ &= \mathcal{G}(t - t')\end{aligned}$$

e

$$\mathrm{Tr}_B \{\rho_B(0) A^\dagger(t') A(t)\} = \mathcal{G}(t - t') - \mathcal{J}(t - t').$$

Portanto,

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_B \{[|0\rangle\langle 1| A^\dagger(t), [|1\rangle\langle 0| A(t'), \rho_B(0) \rho_{IS}(t)]]\} &= [\mathcal{G}^*(t - t') - \mathcal{J}^*(t - t')] |0\rangle\langle 0| \rho_{IS}(t) \\ &\quad - \mathcal{G}^*(t - t') |0\rangle\langle 1| \rho_{IS}(t) |1\rangle\langle 0| \\ &\quad - [\mathcal{G}^*(t - t') - \mathcal{J}^*(t - t')] |1\rangle\langle 0| \rho_{IS}(t) |0\rangle\langle 1| \\ &\quad + \mathcal{G}^*(t - t') \rho_{IS}(t) |1\rangle\langle 1|,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_B \{[|1\rangle\langle 0| A(t), [|0\rangle\langle 1| A^\dagger(t'), \rho_B(0) \rho_{IS}(t)]]\} &= \mathcal{G}(t - t') |1\rangle\langle 1| \rho_{IS}(t) \\ &\quad - [\mathcal{G}(t - t') - \mathcal{J}(t - t')] |1\rangle\langle 0| \rho_{IS}(t) |0\rangle\langle 1| \\ &\quad - \mathcal{G}(t - t') |0\rangle\langle 1| \rho_{IS}(t) |1\rangle\langle 0| \\ &\quad + [\mathcal{G}(t - t') - \mathcal{J}(t - t')] \rho_{IS}(t) |0\rangle\langle 0|\end{aligned}$$

e, assim,

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_B \{ [H_I(t), [H_I(t'), \rho_B(0) \rho_{IS}(t)]] \} &= [\mathcal{G}^*(t-t') - \mathcal{J}^*(t-t')] |0\rangle \langle 0| \rho_{IS}(t) \\
&+ [\mathcal{G}(t-t') - \mathcal{J}(t-t')] \rho_{IS}(t) |0\rangle \langle 0| \\
&- \mathcal{G}^*(t-t') |0\rangle \langle 1| \rho_{IS}(t) |1\rangle \langle 0| \\
&- \mathcal{G}(t-t') |0\rangle \langle 1| \rho_{IS}(t) |1\rangle \langle 0| \\
&- [\mathcal{G}^*(t-t') - \mathcal{J}^*(t-t')] |1\rangle \langle 0| \rho_{IS}(t) |0\rangle \langle 1| \\
&- [\mathcal{G}(t-t') - \mathcal{J}(t-t')] |1\rangle \langle 0| \rho_{IS}(t) |0\rangle \langle 1| \\
&+ \mathcal{G}^*(t-t') \rho_{IS}(t) |1\rangle \langle 1| \\
&+ \mathcal{G}(t-t') |1\rangle \langle 1| \rho_{IS}(t).
\end{aligned}$$

Integrando, obtemos:

$$\begin{aligned}
\int_0^t dt' \text{Tr}_B \{ [H_I(t), [H_I(t'), \rho_B(0) \rho_{IS}(t)]] \} &= \hbar^2 (i\Xi_T + \Gamma_T) |0\rangle \langle 0| \rho_{IS}(t) \\
&+ \hbar^2 (-i\Xi_T + \Gamma_T) \rho_{IS}(t) |0\rangle \langle 0| \\
&- 2\hbar^2 (\Gamma_T + \Gamma_0) |0\rangle \langle 1| \rho_{IS}(t) |1\rangle \langle 0| \\
&- 2\hbar^2 \Gamma_T |1\rangle \langle 0| \rho_{IS}(t) |0\rangle \langle 1| \\
&+ \hbar^2 (i\Xi_T + \Gamma_T + i\Xi_0 + \Gamma_0) \rho_{IS}(t) |1\rangle \langle 1| \\
&+ \hbar^2 (-i\Xi_T + \Gamma_T - i\Xi_0 + \Gamma_0) |1\rangle \langle 1| \rho_{IS}(t).
\end{aligned}$$

Usando comutadores e anti-comutadores, podemos simplificar essa equação assim:

$$\begin{aligned}
\int_0^t dt' \text{Tr}_B \{ [H_I(t), [H_I(t'), \rho_B(0) \rho_{IS}(t)]] \} &= i\hbar^2 [\Xi_T |0\rangle \langle 0| - (\Xi_T + \Xi_0) |1\rangle \langle 1|, \rho_{IS}(t)] \\
&+ \hbar^2 \{ \Gamma_T |0\rangle \langle 0| + (\Gamma_T + \Gamma_0) |1\rangle \langle 1|, \rho_{IS}(t) \} \\
&- 2\hbar^2 (\Gamma_T + \Gamma_0) |0\rangle \langle 1| \rho_{IS}(t) |1\rangle \langle 0| \\
&- 2\hbar^2 \Gamma_T |1\rangle \langle 0| \rho_{IS}(t) |0\rangle \langle 1|.
\end{aligned}$$

Nossa equação mestra agora fica

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \rho_{IS}(t) &\approx \frac{1}{i\hbar} [\hbar\Xi_T |0\rangle \langle 0| - \hbar(\Xi_T + \Xi_0) |1\rangle \langle 1| + H_L(t), \rho_{IS}(t)] \\
&- \{ \Gamma_T |0\rangle \langle 0| + (\Gamma_T + \Gamma_0) |1\rangle \langle 1|, \rho_{IS}(t) \} \\
&+ 2(\Gamma_T + \Gamma_0) |0\rangle \langle 1| \rho_{IS}(t) |1\rangle \langle 0| \\
&+ 2\Gamma_T |1\rangle \langle 0| \rho_{IS}(t) |0\rangle \langle 1|.
\end{aligned}$$

Precisamos agora entender o que o termo $\hbar\Xi_T |0\rangle \langle 0| - \hbar(\Xi_T + \Xi_0) |1\rangle \langle 1|$ causa na prática. A primeira coisa a notar, mas que só vai ficar explícita quando passarmos para o limite do contínuo, é que Ξ_T é finito para temperatura finita, enquanto que Ξ_0 diverge. No entanto, ω_{at} é a chamada frequência “nua” do átomo, quando desligamos a interação com o vácuo eletromagnético. Mas não podemos, na prática, fazer isso. O fato é que quando tivermos $\omega_{at} - \Xi_0$, aí supomos que isso é finito e igual à frequência “vestida” que, de fato, observamos. Para vermos isso, vamos voltar para a representação de Schrödinger, lembrando que temos:

$$H_I(t) = \exp\left(i\frac{H_{at}}{\hbar}t\right) \exp\left(i\frac{H_B}{\hbar}t\right) H_{int} \exp\left(-i\frac{H_B}{\hbar}t\right) \exp\left(-i\frac{H_{at}}{\hbar}t\right),$$

com

$$H_{at} = E_0 |0\rangle \langle 0| + E_1 |1\rangle \langle 1|, \quad (1)$$

de acordo com a aula 8. É bom tomar $E_0 = 0$ e $E_1 = \hbar\omega_{at}$, para simplificar a escolha do zero na escala de energia atômica. Só para recordar, na aula 7 tínhamos usado

$$H_{rad} \equiv \sum_{\lambda,s} \hbar\omega_s \left(a_{\lambda,s}^\dagger a_{\lambda,s} + \frac{1}{2} \right),$$

mas que, como sempre, começamos a medir a energia a partir do ponto zero do vácuo eletromagnético e definimos, inspirados pelo espírito da aula 14,

$$H_B \equiv \sum_{\mathbf{k},\lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k},\lambda},$$

como pouco mais acima, já trocando nosso índice generalizado s das primeiras aulas para o específico índice \mathbf{k} mais recente. Vamos, portanto, definir

$$H_{IB}(t) \equiv \exp\left(i\frac{H_B}{\hbar}t\right) H_{int} \exp\left(-i\frac{H_B}{\hbar}t\right),$$

para simplificar a notação e escrever

$$H_I(t) = U_S^\dagger(t) H_{IB}(t) U_S(t),$$

onde compactamos ainda mais a notação definindo

$$U_S(t) \equiv \exp\left(-i\frac{H_{at}}{\hbar}t\right).$$

Correspondentemente, seja

$$\rho_I(t) \equiv U_S^\dagger(t) \rho_{IB}(t) U_S(t).$$

Com isso, podemos escrever agora

$$\mathrm{Tr}_B \{ [H_I(t), [H_I(t'), \rho_B(0) \rho_{IS}(t)]] \} = \mathrm{Tr}_B \left\{ \left[U_S^\dagger(t) H_{IB}(t) U_S(t), \left[U_S^\dagger(t') H_{IB}(t') U_S(t'), \rho_B(0) U_S^\dagger(t) \rho_{IB}(t) U_S(t) \right] \right] \right\}.$$

Novamente, dentro do integrando teremos termos envolvendo $U_S(t') U_S^\dagger(t)$ que oscila rapidamente quando t' for muito diferente de t . Com isso, portanto, vamos, somente dentro do integrando, usar $U_S(t') \approx U_S(t)$ e, nesse caso,

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}_B \{ [H_I(t), [H_I(t'), \rho_B(0) \rho_{IS}(t)]] \} &\approx \mathrm{Tr}_B \left\{ \left[U_S^\dagger(t) H_{IB}(t) U_S(t), \left[U_S^\dagger(t) H_{IB}(t') U_S(t), \rho_B(0) U_S^\dagger(t) \rho_{IB}(t) U_S(t) \right] \right] \right\} \\ &= \mathrm{Tr}_B \left\{ \left[U_S^\dagger(t) H_{IB}(t) U_S(t), U_S^\dagger(t) [H_{IB}(t'), \rho_B(0) \rho_{IB}(t)] U_S(t) \right] \right\} \\ &= \mathrm{Tr}_B \left\{ U_S^\dagger(t) [H_{IB}(t), [H_{IB}(t'), \rho_B(0) \rho_{IB}(t)]] U_S(t) \right\} \\ &= U_S^\dagger(t) \mathrm{Tr}_B \{ [H_{IB}(t), [H_{IB}(t'), \rho_B(0) \rho_{IB}(t)]] \} U_S(t). \end{aligned}$$

Logo, a equação mestra lá do começo,

$$\frac{d}{dt}\rho_{IS}(t) \approx \frac{1}{i\hbar} [H_L(t), \rho_{IS}(t)] - \frac{1}{\hbar^2} \text{Tr}_B \left\{ \int_0^t dt' [H_I(t), [H_I(t'), \rho_B(0) \rho_{IS}(t)]] \right\}, \quad (2)$$

pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \text{Tr}_B [U_S^\dagger(t) \rho_{IB}(t) U_S(t)] &\approx \frac{1}{i\hbar} [H_L(t), \text{Tr}_B [U_S^\dagger(t) \rho_{IB}(t) U_S(t)]] \\ &\quad - \frac{1}{\hbar^2} U_S^\dagger(t) \int_0^t dt' \text{Tr}_B \{ [H_{IB}(t), [H_{IB}(t'), \rho_B(0) \rho_{IB}(t)]] \} U_S(t) \\ &= \frac{1}{i\hbar} [U_S^\dagger(t) U_S(t) H_L(t) U_S^\dagger(t) U_S(t), U_S^\dagger(t) \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t) U_S(t)]] \\ &\quad - \frac{1}{\hbar^2} U_S^\dagger(t) \int_0^t dt' \text{Tr}_B \{ [H_{IB}(t), [H_{IB}(t'), \rho_B(0) \rho_{IB}(t)]] \} U_S(t) \\ &= \frac{1}{i\hbar} U_S^\dagger(t) [U_S(t) H_L(t) U_S^\dagger(t), \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]] U_S(t) \\ &\quad - \frac{1}{\hbar^2} U_S^\dagger(t) \int_0^t dt' \text{Tr}_B \{ [H_{IB}(t), [H_{IB}(t'), \rho_B(0) \rho_{IB}(t)]] \} U_S(t). \end{aligned}$$

Mas, da Eq. 3),

$$H_L(t) = -\hbar \frac{\Omega_L}{2} \{ \exp[i(\omega_L - \omega_{at})t] |0\rangle \langle 1| + \exp[-i(\omega_L - \omega_{at})t] |1\rangle \langle 0| \}, \quad (3)$$

vemos que

$$\begin{aligned} U_S(t) H_L(t) U_S^\dagger(t) &= -\hbar \frac{\Omega_L}{2} \{ \exp(i\omega_L t) |0\rangle \langle 1| + \exp(-i\omega_L t) |1\rangle \langle 0| \} \\ &\equiv H_{LB}(t). \end{aligned}$$

Também,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \text{Tr}_B [U_S^\dagger(t) \rho_{IB}(t) U_S(t)] &= \frac{i}{\hbar} \text{Tr}_B \{ U_S^\dagger(t) [H_{at}, \rho_{IB}(t)] U_S(t) \} + \text{Tr}_B \left\{ U_S^\dagger(t) \left[\frac{d}{dt} \rho_{IB}(t) \right] U_S(t) \right\} \\ &= \frac{i}{\hbar} U_S^\dagger(t) [H_{at}, \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]] U_S(t) + U_S^\dagger(t) \left[\frac{d}{dt} \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] \right] U_S(t). \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} U_S^\dagger(t) \left\{ \frac{i}{\hbar} [H_{at}, \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]] + \frac{d}{dt} \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] \right\} U_S(t) &\approx \frac{1}{i\hbar} U_S^\dagger(t) [U_S(t) H_L(t) U_S^\dagger(t), \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]] U_S(t) \\ &\quad - \frac{1}{\hbar^2} U_S^\dagger(t) \int_0^t dt' \text{Tr}_B \{ [H_{IB}(t), [H_{IB}(t'), \rho_B(0) \rho_{IB}(t)]] \} U_S(t), \end{aligned}$$

que dá

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] &\approx \frac{1}{i\hbar} [H_{at} + H_{LB}(t), \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]] \\ &\quad - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \text{Tr}_B \{ [H_{IB}(t), [H_{IB}(t'), \rho_B(0) \rho_{IB}(t)]] \}. \end{aligned}$$

Como vimos acima na Eq. (1),

$$H_{at} = E_0 |0\rangle \langle 0| + E_1 |1\rangle \langle 1|.$$

Assim,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] &\approx \frac{1}{i\hbar} [E_0 |0\rangle \langle 0| + E_1 |1\rangle \langle 1| + H_{LB}(t), \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]] \\ &\quad - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \text{Tr}_B \{[H_{IB}(t), [H_{IB}(t'), \rho_B(0) \rho_{IB}(t)]]\}. \end{aligned}$$

Mas nós vimos acima que

$$\begin{aligned} \int_0^t dt' \text{Tr}_B \{[H_{IB}(t), [H_{IB}(t'), \rho_B(0) \rho_{IB}(t)]]\} &= U_S(t) \int_0^t dt' \text{Tr}_B \{[H_I(t), [H_I(t'), \rho_B(0) \rho_{IS}(t)]]\} U_S^\dagger(t) \\ &= i\hbar^2 U_S(t) [\Xi_T |0\rangle \langle 0| - (\Xi_T + \Xi_0) |1\rangle \langle 1|, \rho_{IS}(t)] U_S^\dagger(t) \\ &\quad + \hbar^2 U_S(t) \{\Gamma_T |0\rangle \langle 0| + (\Gamma_T + \Gamma_0) |1\rangle \langle 1|, \rho_{IS}(t)\} U_S^\dagger(t) \\ &\quad - 2\hbar^2 (\Gamma_T + \Gamma_0) U_S(t) |0\rangle \langle 1| \rho_{IS}(t) |1\rangle \langle 0| U_S^\dagger(t) \\ &\quad - 2\hbar^2 \Gamma_T U_S(t) |1\rangle \langle 0| \rho_{IS}(t) |0\rangle \langle 1| U_S^\dagger(t). \end{aligned}$$

Temos só que notar que

$$\begin{aligned} U_S(t) \rho_{IS}(t) U_S^\dagger(t) &= U_S(t) \text{Tr}_B [\rho_I(t)] U_S^\dagger(t) \\ &= U_S(t) \text{Tr}_B [U_S^\dagger(t) \rho_{IB}(t) U_S(t)] U_S^\dagger(t) \\ &= \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)], \end{aligned}$$

$$U_S(t) |0\rangle \langle 0| U_S^\dagger(t) = |0\rangle \langle 0|$$

e

$$U_S(t) |1\rangle \langle 1| U_S^\dagger(t) = |1\rangle \langle 1|.$$

Logo,

$$\begin{aligned} \int_0^t dt' \text{Tr}_B \{[H_{IB}(t), [H_{IB}(t'), \rho_B(0) \rho_{IB}(t)]]\} &= i\hbar^2 [\Xi_T |0\rangle \langle 0| - (\Xi_T + \Xi_0) |1\rangle \langle 1|, \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]] \\ &\quad + \hbar^2 \{\Gamma_T |0\rangle \langle 0| + (\Gamma_T + \Gamma_0) |1\rangle \langle 1|, \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]\} \\ &\quad - 2\hbar^2 (\Gamma_T + \Gamma_0) |0\rangle \langle 1| \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] |1\rangle \langle 0| \\ &\quad - 2\hbar^2 \Gamma_T |1\rangle \langle 0| \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] |0\rangle \langle 1|. \end{aligned}$$

Então,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] &\approx \frac{1}{i\hbar} [E_0 |0\rangle \langle 0| + E_1 |1\rangle \langle 1| + H_{LB}(t), \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]] \\ &\quad - i [\Xi_T |0\rangle \langle 0| - (\Xi_T + \Xi_0) |1\rangle \langle 1|, \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]] \\ &\quad - \{\Gamma_T |0\rangle \langle 0| + (\Gamma_T + \Gamma_0) |1\rangle \langle 1|, \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]\} \\ &\quad + 2(\Gamma_T + \Gamma_0) |0\rangle \langle 1| \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] |1\rangle \langle 0| \\ &\quad + 2\Gamma_T |1\rangle \langle 0| \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] |0\rangle \langle 1|. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] &\approx \frac{1}{i\hbar} [(E_0 + \hbar\Xi_T) |0\rangle \langle 0| + (E_1 - \hbar\Xi_T - \hbar\Xi_0) |1\rangle \langle 1| + H_{LB}(t), \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]] \\ &\quad - \{\Gamma_T |0\rangle \langle 0| + (\Gamma_T + \Gamma_0) |1\rangle \langle 1|, \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]\} \\ &\quad + 2(\Gamma_T + \Gamma_0) |0\rangle \langle 1| \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] |1\rangle \langle 0| \\ &\quad + 2\Gamma_T |1\rangle \langle 0| \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] |0\rangle \langle 1|. \end{aligned}$$

Com nossa escolha do zero de energia atômica acima, também temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] &\approx \frac{1}{i\hbar} [\hbar\Xi_T |0\rangle \langle 0| + \hbar(\omega_{at} - \Xi_T - \Xi_0) |1\rangle \langle 1| + H_{LB}(t), \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]] \\ &\quad - \{\Gamma_T |0\rangle \langle 0| + (\Gamma_T + \Gamma_0) |1\rangle \langle 1|, \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)]\} \\ &\quad + 2(\Gamma_T + \Gamma_0) |0\rangle \langle 1| \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] |1\rangle \langle 0| \\ &\quad + 2\Gamma_T |1\rangle \langle 0| \text{Tr}_B [\rho_{IB}(t)] |0\rangle \langle 1|. \end{aligned}$$

Agora temos uma inconsistência. Inicialmente, só para o átomo, desacoplado do vácuo, usamos ω_{at} . Esse valor aparece na expressão de Γ_T e Γ_0 . Como o que apareceu nessa equação é $\omega_{at} - \Xi_T - \Xi_0$, com Ξ_0 divergente, então, para que a energia vestida do estado excitado seja finita, ω_{at} , que era a frequência nua, deve ser infinita para cancelar Ξ_0 e deixar a energia vestida finita. Mas, no entanto, se supusermos isso, Γ_T e Γ_0 são infinitos. Como sair desse dilema?

O problema não está em Ξ_T , pois, para temperaturas finitas, esse shift não é divergente. O problema vem de Ξ_0 , que diverge no limite superior da integral em ω , como veremos explicitamente no limite do contínuo. Ingenuamente, no começo nós usamos ω_{at} pensando que era a frequência observável de transição do átomo. Mas, no entanto, não era. É como quando temos uma bola dentro d'água. A inércia da bola fora d'água é medida por sua massa inercial. Mas, dentro d'água, porque para mover a bola temos que mover também a água, a inércia efetiva ou massa inercial efetiva da bola é maior do que a massa inercial da bola fora d'água. Mas, de forma análoga, a bola no ar também não está livre da inércia envolvida em mover o ar também quando movemos a bola. Logo, a menos que estejamos no vácuo (onde ainda há pressão de radiação), estamos sempre pensando na massa da bola de forma efetiva.

No caso do nosso átomo, como já começamos tratando a situação com o acoplamento com o campo do vácuo eletromagnético, em nossa ω_{at} já está incluído o shift Ξ_0 , que está aparecendo de novo, mas espuriamente. Então, não incluímos esse shift mais, simplesmente eliminando isso do nosso resultado acima.

Tendo dito tudo isso, agora pegamos nosso resultado,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{IS}(t) &\approx \frac{1}{i\hbar} [\hbar\Xi_T |0\rangle \langle 0| - \hbar(\Xi_T + \Xi_0) |1\rangle \langle 1| + H_L(t), \rho_{IS}(t)] \\ &\quad - \{\Gamma_T |0\rangle \langle 0| + (\Gamma_T + \Gamma_0) |1\rangle \langle 1|, \rho_{IS}(t)\} \\ &\quad + 2(\Gamma_T + \Gamma_0) |0\rangle \langle 1| \rho_{IS}(t) |1\rangle \langle 0| \\ &\quad + 2\Gamma_T |1\rangle \langle 0| \rho_{IS}(t) |0\rangle \langle 1|, \end{aligned}$$

tomamos $\Xi_0 = 0$ e redefinimos as energias do níveis atômicos incorporando Ξ_T somado à energia do estado fundamental e Ξ_T subtraída do estado excitado. Perto de ω_{at} esses valores são desprezíveis e não precisamos mudar nada em Γ_0 e Γ_T . Logo, sem perda de generalidade, nossas equações ópticas de Bloch agora ficam:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{IS}(t) &\approx \frac{1}{i\hbar} [H_L(t), \rho_{IS}(t)] \\ &\quad - \{\Gamma_T |0\rangle \langle 0| + (\Gamma_T + \Gamma_0) |1\rangle \langle 1|, \rho_{IS}(t)\} \\ &\quad + 2(\Gamma_T + \Gamma_0) |0\rangle \langle 1| \rho_{IS}(t) |1\rangle \langle 0| \\ &\quad + 2\Gamma_T |1\rangle \langle 0| \rho_{IS}(t) |0\rangle \langle 1|. \end{aligned}$$

Tipicamente, no entanto, Γ_T é desprezado perante os demais termos e ficamos com a aproximação:

$$\frac{d}{dt}\rho_{IS}(t) \approx \frac{1}{i\hbar} [H_L(t), \rho_{IS}(t)] - \Gamma_0 \{|1\rangle\langle 1|, \rho_{IS}(t)\} + 2\Gamma_0 |0\rangle\langle 1| \rho_{IS}(t) |1\rangle\langle 0|.$$

Isso pode ser feito, pois ω_{at} é muito grande e a luz em um laboratório, incluindo ondas de calor, as infra-vermelhas, têm frequências muito menores do que 10^{15} Hz, já que $\langle n_k \rangle$ é desprezível nesse valor para a radiação dentro de um laboratório em equilíbrio com paredes a 300 K. Caso essa maneira de jogar fora o termo infinito pode ser vista como muito pouco sensata, abaixo tem uma tentativa mais à luz do que se faz hoje em dia.

Tentativa de renormalizar a frequência de transição atômica

Nós queremos renormalizar a teoria de forma que só apareça a frequência observável, ω_{at} . Para isso, a primeira coisa a fazer é regularizar o shift divergente, colocando um cutoff:

$$\Xi_0^R \equiv \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \frac{\omega_c}{\omega_k - \omega_0} |g_{\mathbf{k}, \lambda}|^2,$$

onde ω_c é uma frequência finita máxima, a frequência de corte (cutoff frequency) e, ao invés de usar a frequência observável, ω_{at} , com a qual iniciamos, vamos começar a teoria agora novamente, mas com uma outra frequência, $\omega_0 = \omega_0(\omega_c)$. O que vimos em nossos cálculos foi que se começamos com a energia do estado excitado igual a $\hbar\omega_0$, terminamos com uma equação mestra que tem, ao invés de $\hbar\omega_0$ como a energia do estado excitado, $\hbar\omega_0 - \hbar\Xi_0^R$.

Como logo veremos, no limite do contínuo faremos

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3}.$$

Então,

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} |g_{\mathbf{k}, \lambda}|^2 &\rightarrow \sum_{\lambda} \int \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{2\pi\omega}{\hbar V} |\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}, \lambda} \cdot \mathbf{d}_{10}|^2 \\ &= \sum_{\lambda} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^2} \frac{\omega}{\hbar} |\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}, \lambda} \cdot \mathbf{d}_{10}|^2. \end{aligned}$$

Vamos então simplificar a notação notando que

$$\int d^3 k = \int_{\Omega_k} d\Omega_k \frac{1}{c^3} \int_0^{\omega_c} \omega^2 d\omega$$

e definindo

$$\lambda^2 \equiv \sum_{\lambda} \int_{\Omega_k} \frac{d\Omega_k}{(2\pi)^2} \frac{1}{c^3} |\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}, \lambda} \cdot \mathbf{d}_{10}|^2.$$

Logo,

$$\hbar \sum_{\mathbf{k}, \lambda} |g_{\mathbf{k}, \lambda}|^2 = \lambda^2 \int_0^{\omega_c} \omega^3 d\omega.$$

Assim,

$$\hbar \Xi_0^R = \lambda^2 \mathcal{P} \int_0^{\omega_c} \frac{\omega^3 d\omega}{\omega - \omega_0}$$

e

$$\begin{aligned} E_1 &= \hbar \omega_0 - \hbar \Xi_0^R \\ &= \hbar \omega_0 - \lambda^2 \mathcal{P} \int_0^{\omega_c} \frac{\omega^3 d\omega}{\omega - \omega_0}. \end{aligned}$$

O resultado dessa integral é

$$\mathcal{P} \int_0^{\omega_c} \frac{\omega^3 d\omega}{\omega - \omega_0} = \frac{1}{6} \omega_c (6\omega_0^2 + 3\omega_0 \omega_c + 2\omega_c^2) + 2\omega_0^3 \tanh^{-1} \left(1 - 2\frac{\omega_0}{\omega_c} \right),$$

para $\omega_0 \neq 0$ e $\omega_0 < \omega_c$.

A ideia é manter o cutoff fixo e começar a teoria escolhendo

$$\begin{aligned} \hbar \omega_0 &= E_1 + \lambda^2 \mathcal{P} \int_0^{\omega_c} \frac{\omega^3 d\omega}{\omega - \omega_0} \\ &= \hbar \omega_{at} + \lambda^2 \mathcal{P} \int_0^{\omega_c} \frac{\omega^3 d\omega}{\omega - \omega_0}. \end{aligned}$$

Como sempre vamos manter segunda ordem em λ , podemos aproximar:

$$\hbar \omega_0 \approx \hbar \omega_{at} + \lambda^2 \mathcal{P} \int_0^{\omega_c} \frac{\omega^3 d\omega}{\omega - \omega_{at}}.$$

No final, repetindo o que fizemos acima, obteremos uma energia do estado excitado com um shift, de forma análoga ao que obtivemos antes:

$$E'_1 = \hbar \omega_{at} + \lambda^2 \mathcal{P} \int_0^{\omega_c} \frac{\omega^3 d\omega}{\omega - \omega_{at}} - \lambda^2 \mathcal{P} \int_0^{\omega_c} \frac{\omega^3 d\omega}{\omega - \omega_{at} - \frac{\lambda^2}{\hbar} \mathcal{P} \int_0^{\omega_c} \frac{\omega^3 d\omega}{\omega - \omega_{at}}}.$$

Como vamos sempre manter segunda ordem na constante de acoplamento, que é proporcional a λ , no final teremos

$$\begin{aligned} E'_1 &\approx \hbar \omega_{at} + \lambda^2 \mathcal{P} \int_0^{\omega_c} \frac{\omega^3 d\omega}{\omega - \omega_{at}} - \lambda^2 \mathcal{P} \int_0^{\omega_c} \frac{\omega^3 d\omega}{\omega - \omega_{at}} \\ &= \hbar \omega_{at}, \end{aligned}$$

como deveria ser.

Porém, alguém pode pensar que agora teremos Γ_0 diferente. Relembrando a expressão que tínhamos:

$$\Gamma_0 = \pi \sum_{\mathbf{k}, \lambda} |g_{\mathbf{k}, \lambda}|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_0).$$

Podemos agora usar o truque acima para passar para o contínuo e o resultado fica:

$$\begin{aligned} \hbar \Gamma_0 &= \pi \lambda^2 \int_0^{\omega_c} \omega^3 d\omega \delta(\omega - \omega_0) \\ &= \pi \lambda^2 \omega_0^3 \\ &\approx \pi \lambda^2 \left[\omega_{at} + \frac{\lambda^2}{\hbar} \mathcal{P} \int_0^{\omega_c} \frac{\omega^3 d\omega}{\omega - \omega_{at}} \right]^3. \end{aligned}$$

Mantendo até segunda ordem em λ , ficamos com

$$\hbar\Gamma_0 \approx \pi\lambda^2\omega_{at}^3,$$

sem mudança alguma. Notemos que aqui fizemos uma versão bem ingênua do que teria que ser mais detalhado para poder, por exemplo, tratar o chamado Lamb shift propriamente dito. No entanto, embora ingênua, esta abordagem mostra como podemos considerar a maneira de introduzir as quantidades observadas no laboratório de forma independente do cutoff utilizado. E, claro, fizemos tudo até a segunda ordem de perturbação apenas, como a própria equação mestra.

A equação de Lindblad

Até agora temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho(t) &= -\frac{i}{\hbar}[H_{at}(t), \rho(t)] \\ &+ \Gamma \left[A\rho(t)A^\dagger - \frac{1}{2}\{A^\dagger A, \rho(t)\} \right], \end{aligned}$$

que já está na forma de Lindblad, onde

$$\{A^\dagger A, \rho(t)\} \equiv A^\dagger A\rho(t) + \rho(t)A^\dagger A$$

é o anti-comutador e definimos

$$A^\dagger \equiv |1\rangle\langle 0|$$

e

$$A \equiv |0\rangle\langle 1|.$$

From Newton's second law to Liouville's equation and back in an intuitive way

Let us start by looking at a classical particle and its Newtonian dynamics. Furthermore, let us assume that the force that acts on the particle, of mass m , is conservative. In one dimension, to simplify the analysis, we have

$$F = -\frac{\partial}{\partial z}V(z),$$

where F is the force along the z -axis and $V(z)$ is the potential energy whose spatial derivative gives the force. Newton's second law gives

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial}{\partial z}V(z). \quad (4)$$

In the phase space we can choose a region \mathcal{R} given a, say, compact set of initial conditions, that is, at $t = 0$. If we let each one of the points in \mathcal{R} evolve during a time $t > 0$, we are going to have the same volume of phase space as we had in \mathcal{R} ,

according to Liouville's theorem. In this case of a single spacial dimension, we actually mean area of phase space, instead of volume, but the word volume is the standard for all dimensions, even if we have more than three spatial dimensions (for more than one particle comprising the system).

Now, after a time interval $t > 0$ has elapsed, let us choose a particular phase-space volume $dzdp$ about the point (z, p) and let $\rho_{cl}(z, p, t) dzdp$ be the probability of finding the particle inside the volume element $dzdp$. If, instead, we think of $\rho_{cl}(z, p, t)$ as the density of N non-interacting particles at the point (z, p) at time t , we see that they left, at time $t = 0$, the region \mathcal{R} from the neighborhood of the point $(z_{cl}(0), p_{cl}(0))$, where z_{cl} and p_{cl} are the functions of time describing the trajectory described by Eq. (4) that, at time t , ends up at the phase-space point (z, p) . By Liouville's theorem, if we have $dzdp\rho_{cl}(z, p, t)$ particles in the region of volume $dzdp$ about the point (z, p) at time $t > 0$, these are the particles that came from the region of phase-space volume value also given by $dzdp$, but centered about the point $(z_{cl}(0), p_{cl}(0))$ at $t = 0$. Therefore, the number of particles about the two different points of phase space is the same, that is,

$$\frac{d}{dt} [dzdp\rho_{cl}(z_{cl}(t), p_{cl}(t), t)] = 0$$

and, since $dzdp$ is the same along the whole trajectory of all the N particles, we can write:

$$\frac{d}{dt} \rho_{cl}(z_{cl}(t), p_{cl}(t), t) = 0,$$

or, equivalently,

$$\frac{dz_{cl}}{dt} \frac{\partial}{\partial z_{cl}} \rho_{cl}(z_{cl}, p_{cl}, t) + \frac{dp_{cl}}{dt} \frac{\partial}{\partial p_{cl}} \rho_{cl}(z_{cl}, p_{cl}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \rho_{cl}(z_{cl}, p_{cl}, t) = 0.$$

Since

$$p_{cl} = m \frac{dz_{cl}}{dt}, \tag{5}$$

using Eq. (4) we obtain

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{cl}(z_{cl}, p_{cl}, t) + \frac{p_{cl}}{m} \frac{\partial}{\partial z_{cl}} \rho_{cl}(z_{cl}, p_{cl}, t) - \frac{\partial V(z_{cl})}{\partial z_{cl}} \frac{\partial}{\partial p_{cl}} \rho_{cl}(z_{cl}, p_{cl}, t) = 0.$$

Therefore, for any point (z, p) of phase space at time t , the dynamics of the probability distribution function is written as

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{cl}(z, p, t) + \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial z} \rho_{cl}(z, p, t) = \frac{\partial V(z)}{\partial z} \frac{\partial}{\partial p} \rho_{cl}(z, p, t), \tag{6}$$

which is the classical Liouville equation.