

## Equação mestra com translação

Nossa hamiltoniana total até agora é baseada nas equações

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

e

$$H_I(t) \equiv -\hbar \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \{ i g_{\mathbf{k}, \lambda} |1\rangle \langle 0| a_{\mathbf{k}, \lambda} \exp [-i(\omega_{\mathbf{k}, \lambda} - \omega_{at})t] - i g_{\mathbf{k}, \lambda}^* |0\rangle \langle 1| a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger \exp [i(\omega_{\mathbf{k}, \lambda} - \omega_{at})t] \}, \quad (2)$$

com a nossa hamiltoniana de interação entre radiação e matéria dada por

$$H_I^{RM}(t) = H_L(t) + H_I(t). \quad (3)$$

Desde o começo foi feita a suposição de que o átomo está com seu centro de massa fixo na origem. Agora, porém, vamos deixar o centro de massa se mover livremente, sofrendo o efeito de troca de momentum com o campo eletromagnético, tanto o do laser como o do vácuo. Para isso, não é difícil ver que a posição do elétron agora é descrita através de um vetor posição relativo  $\mathbf{r}$  como antes, mas que parte de  $\mathbf{R}_{CM}$ , que é o operador do centro de massa do átomo. Então, quando tínhamos, no começo, antes de fazer a aproximação de dipolo elétrico, os fatores  $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ , na verdade temos agora que trocá-los pelos que se obtêm quando fazemos a substituição

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{R}_{CM}.$$

Então esses fatores agora ficam  $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{CM}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{CM})$ , já que os operadores  $\mathbf{r}$  e  $\mathbf{R}_{CM}$  comutam. Quando então fazemos a aproximação de dipolo elétrico, fazemos efetivamente

$$\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \approx 1$$

e, portanto, onde tínhamos  $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{CM})$ , agora teremos apenas  $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{CM})$ . Logo, a Eq. (2) acima, quando consideramos o movimento translacional do átomo, muda para

$$H_I(t) \rightarrow -\hbar \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \{ i g_{\mathbf{k}, \lambda} |1\rangle \langle 0| a_{\mathbf{k}, \lambda} \exp [i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{CM} - i(\omega_{\mathbf{k}, \lambda} - \omega_{at})t] - i g_{\mathbf{k}, \lambda}^* |0\rangle \langle 1| a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger \exp [-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{CM} + i(\omega_{\mathbf{k}, \lambda} - \omega_{at})t] \}.$$

Já o laser, lá na aula 9, tínhamos a transformação unitária para o modo do laser:

$$U_L(t) \equiv \exp \left[ \alpha^* \exp(i\omega_L t) a_L - \alpha \exp(-i\omega_L t) a_L^\dagger \right], \quad (4)$$

Mas o laser pode variar espacialmente e, nesse caso, o que podemos usar é uma dependência da amplitude do valor esperado do número de fótons como sendo uma função de  $\mathbf{R}_{CM}$ . Então, trocamos a Eq. (4) por

$$U_L(t) \rightarrow \exp \left[ \alpha^* (\mathbf{R}_{CM}) \exp(i\omega_L t) a_L - \alpha (\mathbf{R}_{CM}) \exp(-i\omega_L t) a_L^\dagger \right].$$

A única consequência desta troca é que agora a frequência de Rabi na Eq. (1) passa a ser uma função de  $\mathbf{R}_{CM}$  e escremos

$$H_L(t) \rightarrow -\hbar \frac{1}{2} \{ \Omega_L (\mathbf{R}_{CM}) \exp [i(\omega_L - \omega_{at})t] |0\rangle \langle 1| + \Omega_L^* (\mathbf{R}_{CM}) \exp [-i(\omega_L - \omega_{at})t] |1\rangle \langle 0| \}.$$

A nova versão da Eq. (3) agora inclui o centro de massa do átomo:

$$\begin{aligned}
H_I^{RM}(t) \rightarrow & -\frac{\hbar}{2} \{ \Omega_L(\mathbf{R}_{CM}) \exp[i(\omega_L - \omega_{at})t] |0\rangle \langle 1| + \Omega_L^*(\mathbf{R}_{CM}) \exp[-i(\omega_L - \omega_{at})t] |1\rangle \langle 0| \} \\
& -\hbar \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \{ i g_{\mathbf{k}, \lambda} |1\rangle \langle 0| a_{\mathbf{k}, \lambda} \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{CM} - i(\omega_{\mathbf{k}, \lambda} - \omega_{at})t] \\
& - i g_{\mathbf{k}, \lambda}^* |0\rangle \langle 1| a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger \exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{CM} + i(\omega_{\mathbf{k}, \lambda} - \omega_{at})t] \}.
\end{aligned} \tag{5}$$

Para o movimento total do átomo e seus graus de liberdade interno, vamos precisar somar a esta hamiltoniana a energia cinética do centro de massa e obtemos

$$H_I^{tot}(t) \equiv \frac{\mathbf{P}_{CM}^2}{2M} + H_I^{RM}(t),$$

onde  $\mathbf{P}_{CM}$  é o operador momentum do centro de massa do átomo. A generalização da equação

$$W(z, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp' |p - p'/2\rangle \langle p + p'/2| \exp(izp'/\hbar), \tag{6}$$

que define o operador de Wigner para uma só coordenada espacial, é dada, em três dimensões espaciais, por

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{V_\infty} d^3s \left| \mathbf{r} - \frac{1}{2}\mathbf{s} \right\rangle \left\langle \mathbf{r} + \frac{1}{2}\mathbf{s} \right| \exp\left(-i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}}{\hbar}\right).$$

Onde estamos aqui, implicitamente, supondo que  $\mathbf{r}$  e  $\mathbf{p}$  referem-se aos auto-valores dos operadores  $\mathbf{R}_{CM}$  e  $\mathbf{P}_{CM}$ , respectivamente. Agora é fácil demonstrar que

$$\frac{\mathbf{P}_{CM}^2}{2M} = \int d^3r' \int d^3p' \frac{\mathbf{P}'^2}{2M} f(\mathbf{r}', \mathbf{p}').$$

Também não é difícil obter o resultado seguinte:

$$\begin{aligned}
H_I^{RM}(t) = & -\frac{\hbar}{2} \int d^3r' \int d^3p' \Omega_L(\mathbf{r}') f(\mathbf{r}', \mathbf{p}') |0\rangle \langle 1| \exp[i(\omega_L - \omega_{at})t] \\
& -\frac{\hbar}{2} \int d^3r' \int d^3p' \Omega_L^*(\mathbf{r}') f(\mathbf{r}', \mathbf{p}') |1\rangle \langle 0| \exp[-i(\omega_L - \omega_{at})t] \\
& -\hbar \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left\{ i g_{\mathbf{k}, \lambda} |1\rangle \langle 0| a_{\mathbf{k}, \lambda} \int d^3r' \int d^3p' f(\mathbf{r}', \mathbf{p}') \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' - i(\omega_{\mathbf{k}, \lambda} - \omega_{at})t] \right. \\
& \left. - i g_{\mathbf{k}, \lambda}^* |0\rangle \langle 1| a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger \int d^3r' \int d^3p' f(\mathbf{r}', \mathbf{p}') \exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' + i(\omega_{\mathbf{k}, \lambda} - \omega_{at})t] \right\}.
\end{aligned}$$

Vamos definir agora os operadores

$$\begin{aligned}
K & \equiv \frac{\mathbf{P}_{CM}^2}{2M} \\
& = \int d^3r' \int d^3p' \frac{\mathbf{P}'^2}{2M} f(\mathbf{r}', \mathbf{p}'),
\end{aligned}$$

$$\Omega_{op} \equiv \int d^3 r' \int d^3 p' \Omega_L(\mathbf{r}') f(\mathbf{r}', \mathbf{p}'),$$

$$G_{\mathbf{k},\lambda} \equiv g_{\mathbf{k},\lambda} \int d^3 r' \int d^3 p' f(\mathbf{r}', \mathbf{p}') \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}')$$

e

$$G_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger \equiv g_{\mathbf{k},\lambda}^* \int d^3 r' \int d^3 p' f(\mathbf{r}', \mathbf{p}') \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}').$$

Notemos que

$$\begin{aligned} [|0\rangle \langle 0|, f(\mathbf{r}', \mathbf{p}')] &= [|0\rangle \langle 1|, f(\mathbf{r}', \mathbf{p}')] \\ &= [|1\rangle \langle 0|, f(\mathbf{r}', \mathbf{p}')] \\ &= [|1\rangle \langle 1|, f(\mathbf{r}', \mathbf{p}')] \\ &= 0, \end{aligned}$$

mas, no entanto,  $K$ ,  $\Omega_{op}$ ,  $G_{\mathbf{k},\lambda}$  e  $G_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger$  não comutam entre si. Podemos agora escrever

$$\begin{aligned} H_I^{RM}(t) &= -\hbar \frac{\Omega_{op}}{2} |0\rangle \langle 1| \exp[i(\omega_L - \omega_{at})t] \\ &\quad -\hbar \frac{\Omega_{op}^\dagger}{2} |1\rangle \langle 0| \exp[-i(\omega_L - \omega_{at})t] \\ &\quad -\hbar \sum_{\mathbf{k},\lambda} \{iG_{\mathbf{k},\lambda} |1\rangle \langle 0| a_{\mathbf{k},\lambda} \exp[-i(\omega_{\mathbf{k},\lambda} - \omega_{at})t] \\ &\quad -iG_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger |0\rangle \langle 1| a_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger \exp[i(\omega_{\mathbf{k},\lambda} - \omega_{at})t]\}. \end{aligned}$$

Como muda nossa equação mestra neste caso? Nas aulas 13 e 16 começamos com a equação de Liouville & von Neumann para a matriz densidade na representação de interação, isto é,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \rho_I(t) &= [H_I^{RM}(t), \rho_I(t)] \\ &= [H_L(t), \rho_I(t)] + [H_I(t), \rho_I(t)]. \end{aligned}$$

Mas agora não é só isso: precisamos generalizar nossas definições, redefinindo

$$\begin{aligned} H_L(t) &\rightarrow -\hbar \frac{\Omega_{op}}{2} |0\rangle \langle 1| \exp[i(\omega_L - \omega_{at})t] \\ &\quad -\hbar \frac{\Omega_{op}^\dagger}{2} |1\rangle \langle 0| \exp[-i(\omega_L - \omega_{at})t], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_I(t) &\rightarrow -\hbar \sum_{\mathbf{k},\lambda} \{iG_{\mathbf{k},\lambda} |1\rangle \langle 0| a_{\mathbf{k},\lambda} \exp[-i(\omega_{\mathbf{k},\lambda} - \omega_{at})t] \\ &\quad -iG_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger |0\rangle \langle 1| a_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger \exp[i(\omega_{\mathbf{k},\lambda} - \omega_{at})t]\}, \end{aligned}$$

$$H_I^{RM}(t) = H_L(t) + H_I(t)$$

e

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \rho_I(t) &= [K + H_I^{RM}(t), \rho_I(t)] \\ &= [H_S(t) + H_I(t), \rho_I(t)], \end{aligned}$$

onde

$$H_S(t) \equiv K + H_L(t)$$

só atua no sistema atômico, incluindo seu centro de massa. O truque de trocar  $-\frac{i}{\hbar} \text{Tr}_B \{[H_I(t), \rho_I(t)]\}$  por  $-\frac{1}{\hbar^2} \text{Tr}_B \left\{ \int_0^t dt' [H_I(t), [H_I(t'), \rho_I(t)]] \right\}$  foi propriamente justificado na aula 16. Porém, continuar usando esse formalismo não é muito conveniente quando queremos incluir também a translação, pois para isso teremos que fazer mais mudanças para adaptar o que desenvolvemos até agora.

Ao invés de continuar usando a representação de interação, vamos usar a representação de Heisenberg e já considerar as auto-energias do átomo como as observáveis, tendo já discutido a teoria de renormalização necessária. Desse modo, podemos, no momento oportuno, desprezar o termo imaginário que diverge e que iria corrigir a energia atômica, mas que, como já estamos supondo renormalizada, então esse termo não deve ser levado em conta. Os operadores que consideraremos são os chamados operadores de Heisenberg e que descrevem os graus de liberdade internos do átomo. Além desses operadores, também vamos considerar o operador de Wigner que descreve o movimento translacional do centro de massa atômico. Para simplificar a análise, vamos considerar que o estado do campo quântico é o vácuo eletromagnético e, portanto, ao invés de tomarmos o traço sobre os fótons, basta que tomemos o valor esperado no vácuo de todos os operadores. Mas, antes de prosseguir, vamos discutir um resultado que ainda não mencionamos e que estabelece os limites para os valores da função de Wigner.

## Digressão: limites da função de Wigner

A desigualdade de Cauchy & Schwarz é que, para dois estados quaisquer,  $|\psi\rangle$  e  $|\varphi\rangle$ , sempre vale a desigualdade:

$$|\langle \varphi | \psi \rangle|^2 \leq \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \psi | \psi \rangle.$$

### Prova:

Para ver que isso é verdade, basta considerar o ket

$$|\xi\rangle \equiv \langle \varphi | \varphi \rangle |\psi\rangle - \langle \psi | \varphi \rangle |\varphi\rangle.$$

Quando calculamos  $\langle \xi | \xi \rangle$  obtemos

$$\begin{aligned} \langle \xi | \xi \rangle &= [\langle \varphi | \varphi \rangle \langle \psi | - \langle \psi | \varphi \rangle \langle \varphi |] [\langle \varphi | \varphi \rangle |\psi\rangle - \langle \psi | \varphi \rangle |\varphi\rangle] \\ &= \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \psi | [\langle \varphi | \varphi \rangle |\psi\rangle - \langle \psi | \varphi \rangle |\varphi\rangle] - \langle \psi | \varphi \rangle \langle \varphi | [\langle \varphi | \varphi \rangle |\psi\rangle - \langle \psi | \varphi \rangle |\varphi\rangle] \\ &= \langle \varphi | \varphi \rangle [\langle \varphi | \varphi \rangle \langle \psi | \psi \rangle - \langle \psi | \varphi \rangle \langle \psi | \varphi \rangle] - \langle \psi | \varphi \rangle [\langle \varphi | \varphi \rangle \langle \varphi | \psi \rangle - \langle \psi | \varphi \rangle \langle \varphi | \varphi \rangle] \\ &= \langle \varphi | \varphi \rangle^2 \langle \psi | \psi \rangle - \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \psi | \varphi \rangle^2 - \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \psi | \varphi \rangle \langle \varphi | \psi \rangle + \langle \psi | \varphi \rangle^2 \langle \varphi | \varphi \rangle \\ &= \langle \varphi | \varphi \rangle^2 \langle \psi | \psi \rangle - \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \psi | \varphi \rangle \langle \varphi | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Mas como

$$\langle \xi | \xi \rangle \geq 0,$$

segue que

$$\langle \varphi | \varphi \rangle^2 \langle \psi | \psi \rangle - \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \psi | \varphi \rangle \langle \varphi | \psi \rangle \geq 0,$$

isto é,

$$\langle \psi | \varphi \rangle \langle \varphi | \psi \rangle \leq \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \psi | \psi \rangle. \quad \blacksquare$$

O operador de Wigner, como vimos, é definido como

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{V_\infty} d^3s \left| \mathbf{r} - \frac{1}{2}\mathbf{s} \right\rangle \left\langle \mathbf{r} + \frac{1}{2}\mathbf{s} \right| \exp\left(-i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}}{\hbar}\right).$$

A função de Wigner é dada como o valor esperado no estado normalizado  $|\psi\rangle$ , digamos. Então,

$$\begin{aligned} w(\mathbf{r}, \mathbf{p}) &= \langle \psi | f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{V_\infty} d^3s \langle \psi | \mathbf{r} - \mathbf{s}/2 \rangle \langle \mathbf{r} + \mathbf{s}/2 | \psi \rangle \exp\left(-i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}}{\hbar}\right). \end{aligned}$$

Sejam

$$\varphi^*(\mathbf{s}) \equiv \frac{1}{2^{3/2}} \langle \psi | \mathbf{r} - \mathbf{s}/2 \rangle$$

e

$$\chi(\mathbf{s}) \equiv \frac{1}{2^{3/2}} \langle \mathbf{r} + \mathbf{s}/2 | \psi \rangle \exp\left(-i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}}{\hbar}\right).$$

Notemos que estas duas funções estão normalizadas, pois

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \varphi \rangle &= \frac{1}{2^3} \int_{V_\infty} d^3s \langle \psi | \mathbf{r} - \mathbf{s}/2 \rangle \langle \mathbf{r} - \mathbf{s}/2 | \psi \rangle \\ &= \int_{V_\infty} d^3s' \langle \psi | \mathbf{s}' \rangle \langle \mathbf{s}' | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \psi \rangle \\ &= 1 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \langle \chi | \chi \rangle &= \frac{1}{2^3} \int_{V_\infty} d^3s \langle \psi | \mathbf{r} + \mathbf{s}/2 \rangle \langle \mathbf{r} + \mathbf{s}/2 | \psi \rangle \\ &= \int_{V_\infty} d^3s' \langle \psi | \mathbf{s}' \rangle \langle \mathbf{s}' | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \psi \rangle \\ &= 1. \end{aligned}$$

Pela desigualdade de Cauchy & Schwarz, então, segue que

$$|\langle \varphi | \chi \rangle|^2 \leq \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi \rangle,$$

isto é,

$$\left| \int_{V_\infty} d^3s \langle \varphi | \mathbf{s} \rangle \langle \mathbf{s} | \chi \rangle \right|^2 \leq 1,$$

ou seja,

$$\left| \int_{V_\infty} d^3s \frac{1}{2^{3/2}} \langle \psi | \mathbf{r} - \mathbf{s}/2 \rangle \frac{1}{2^{3/2}} \langle \mathbf{r} + \mathbf{s}/2 | \psi \rangle \exp\left(-i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}}{\hbar}\right) \right|^2 \leq 1,$$

ou ainda,

$$\left| \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{V_\infty} d^3s \langle \psi | \mathbf{r} - \mathbf{s}/2 \rangle \langle \mathbf{r} + \mathbf{s}/2 | \psi \rangle \exp\left(-i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}}{\hbar}\right) \right| \leq \frac{2^3}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Assim, vemos que

$$|w(\mathbf{r}, \mathbf{p})| \leq \frac{2^3}{(2\pi\hbar)^3}$$

e, como a função de Wigner é real, como já vimos, segue que

$$-\left(\frac{2}{\hbar}\right)^3 \leq w(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \leq \left(\frac{2}{\hbar}\right)^3.$$

## De volta com a equação mestra

A formulação começa com a equação de Schrödinger para o sistema total:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = [H_{at}(t) + H_B + H_{int}] |\Psi(t)\rangle,$$

na representação de Schrödinger, se quisermos usar as convenções. O único ponto a ressaltar aqui é que nós vamos usar o campo clássico como dependente do tempo, pois já vamos começar na representação de dipolo elétrico de Power e Zienau. Neste caso,

$$H_{at}(t) = K + \hbar\omega_{at}\sigma_{11}(0) - \hbar\frac{\Omega_{op}}{2}\sigma_{01}(0)\exp(i\omega_L t) - \hbar\frac{\Omega_{op}^\dagger}{2}\sigma_{10}(0)\exp(-i\omega_L t),$$

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

e

$$H_{int} = -\hbar \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left\{ iG_{\mathbf{k}, \lambda} \sigma_{10}(0) a_{\mathbf{k}, \lambda} - iG_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger \sigma_{01}(0) a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger \right\},$$

onde definimos os operadores de Heisenberg como

$$\sigma_{00}(0) \equiv |0\rangle\langle 0|,$$

$$\sigma_{01}(0) \equiv |0\rangle\langle 1|,$$

$$\sigma_{10}(0) \equiv |1\rangle\langle 0|$$

e

$$\sigma_{11}(0) \equiv |1\rangle\langle 1|.$$

Definimos o operador evolução usando a hamiltoniana total:

$$\begin{aligned} U(0) &= \mathbb{I} \\ &= \mathbb{I}_{CM} \otimes \mathbb{I}_{at} \otimes \mathbb{I}_B \end{aligned}$$

e

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t) = [H_{at}(t) + H_B + H_{int}] U(t).$$

Então, sabemos que

$$|\Psi(t)\rangle = U(t) |\Psi(0)\rangle.$$

## Relação com a abordagem em termos da matriz densidade

Vamos ver como podemos passar dos resultados usando a representação de Heisenberg para os da matriz densidade. Primeiro vamos ver como fica a relação com a matriz densidade na representação de Schrödinger, mas já feita a transformação unitária de Power & Zienau na aproximação de dipolo elétrico, como anteriormente.

Vamos começar com uma matriz densidade inicial do átomo, geral, que vamos escrever como

$$\rho = \sum_{r=0}^1 \sum_{s=0}^1 \rho_{rs} |r\rangle\langle s|,$$

onde vemos que

$$\rho_{rs} \equiv \langle r | \rho | s \rangle.$$

Só que agora, diferentemente do que fizemos anteriormente, temos também a matriz densidade do centro de massa atômico, dada por

$$\rho_{CM} = \int d^3r \int d^3r' \rho_{CM}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\mathbf{r}\rangle\langle \mathbf{r}'|,$$

onde

$$\rho_{CM}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \langle \mathbf{r} | \rho_{CM} | \mathbf{r}' \rangle.$$

Como anteriormente, o operador densidade inicial do campo eletromagnético é  $\rho_B$  e, portanto, o operador densidade total em  $t = 0$  é dado por

$$\rho_{tot}(0) = \rho_{CM} \otimes \rho \otimes \rho_B.$$

Sendo o operador evolução, como vimos acima, dado por

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t) = [H_{at}(t) + H_B + H_{int}] U(t),$$

com

$$\begin{aligned} U(0) &= \mathbb{I} \\ &= \mathbb{I}_{CM} \otimes \mathbb{I}_{at} \otimes \mathbb{I}_B, \end{aligned}$$

no tempo  $t > 0$  obtemos:

$$\begin{aligned} \rho_{tot}(t) &= U(t) \rho_{tot}(0) U^\dagger(t) \\ &= U(t) \rho_{CM} \otimes \rho \otimes \rho_B U^\dagger(t). \end{aligned}$$

Como fizemos anteriormente, vamos parar agora de usar  $\otimes$  e notar apenas que os operadores que correspondem a graus de liberdade distintos, comutam quando calculados no mesmo instante de tempo (já pensando sempre no contexto da representação de Heisenberg). Vamos sempre tomar o traço sobre os fótons. Aí, para obtermos o operador densidade reduzido dos graus de liberdade internos do átomo, tomamos também o traço sobre o centro de massa. Assim,

$$\rho_{int}(t) = \text{Tr}_{CM} \{ \text{Tr}_B [\rho_{tot}(t)] \}.$$

De nosso interesse também é o operador densidade reduzido do centro de massa, de forma que nesse caso tomamos o traço sobre os graus de liberdade internos do átomo:

$$\rho_{CM}(t) = \text{Tr}_{int} \{ \text{Tr}_B [\rho_{tot}(t)] \}.$$

Nosso átomo de dois níveis e dois estados pode ser escrito, em  $t = 0$ , como

$$\begin{aligned} \rho_{int}(0) &= \rho \\ &= \rho_{00} |0\rangle \langle 0| + \rho_{01} |0\rangle \langle 1| + \rho_{10} |1\rangle \langle 0| + \rho_{11} |1\rangle \langle 1| \\ &= \rho_{00} \sigma_{00}(0) + \rho_{01} \sigma_{01}(0) + \rho_{10} \sigma_{10}(0) + \rho_{11} \sigma_{11}(0). \end{aligned}$$

Vamos considerar que o estado do centro de massa em  $t = 0$  seja localizado e puro, dado por

$$\rho_{CM} = |\psi_{CM}\rangle \langle \psi_{CM}|.$$

Como já observamos anteriormente, como só estamos considerando o campo eletromagnético quantizado do vácuo, no laboratório, mesmo à temperatura ambiente, para excitar ou estimular a emissão na frequência atômica, a temperatura ambiente é muito baixa e podemos, sem realmente qualquer problema, supor

$$\rho_B = |vac\rangle \langle vac|.$$