

**SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO QUASE-CLÁSSICA PARA A
FUNÇÃO DE WIGNER MATRICIAL DE DOIS ÁTOMOS FRIOS
COLIDINDO À PRESENÇA DE UM FEIXE LASER**

USP/IFSC/SBI

OK



8-2-001438

Clodoaldo Cordeiro Rulli

Dissertação apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de mestre em Ciências: "Física Básica".

Orientador: Prof. Dr. Reginaldo de Jesus Napolitano

São Carlos
2002

Rulli, Clodoaldo Cordeiro

“Solução numérica da equação quase-clássica para a função de Wigner matricial de dois átomos frios colidindo à presença de um feixe laser”/ Clodoaldo Cordeiro Rulli – São Carlos, 2002

Dissertação (Mestrado) – Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2002 – páginas: 106

Área: Física Básica

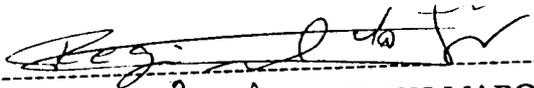
Prof. Dr. Reginaldo de Jesus Napolitano

1. Formalismo de Wigner- Weyl, 2. Colisões atômicas, 3. Colisões frias

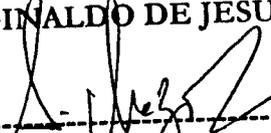
I. Título

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE CLODOALDO CORDEIRO RULLI, APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA, ÁREA DE CONCENTRAÇÃO FÍSICA BÁSICA, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 08/03/2002.

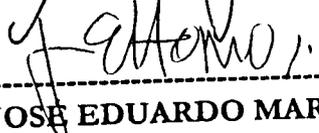
COMISSÃO JULGADORA:



Prof. Dr. REGINALDO DE JESUS NAPOLITANO (Orientador) – IFSC/USP



Prof. Dr. SALOMON SYLVAIN MIZRAHI – UFSCar



Prof. Dr. JOSE EDUARDO MARTINHO HORNOS – IFSC/USP

À minha mãe, Maria Aparecida e
ao meu pai, Valdir,
porque me deram a vida,
porque me incentivaram e
por tudo que me ensinaram.

“Foi Ele (o Senhor) que me deu a verdadeira ciência das coisas que existem, para que eu conheça a constituição do universo, e as propriedades dos elementos, o princípio, o fim e o meio dos tempos, as mudanças dos solstícios e as vicissitudes das estações, os cursos do ano, e as disposições das estrelas, a natureza dos animais, e os instintos dos brutos, a força dos ventos, e o pensamento dos homens, a variedade das plantas, e as virtudes das raízes. Aprendi tudo que há escondido e não descoberto, porque a sabedoria que tudo criou me ensinou”.

Sab. 7, 17-21

Agradecimentos

- Agradeço a CAPES pelo apoio financeiro deste mestrado.
- Ao Prof. Dr. Reginaldo de Jesus Napolitano pela orientação.
- Ao Dr. Marcelo Marchioli pelas contribuições para o desenvolvimento deste mestrado.
- Às secretárias Isabel e Wladerez pela atenção e paciência.
- À Helena, Matheus, Yuri, Silvio e Wander pelo companheirismo e pelas muitas vezes que me auxiliaram.
- Aos amigos da república Alexandre Colato, Fábio Gatti, Flávio Isaac (Ovo), Cassius, Paulo (Nerd), Rogério Cardoso, Tércio, Anderson (Pô), Carlos (Mineiro), Silmar, Sandro, Marcão, Ricardo (Prancha), Vanderlei, Ângelo (Bixo) e tantos outros que foram minha família nesta cidade.
- À Cláudia pelas excelentes tardes de café.
- Aos funcionários da Biblioteca do Instituto de Física de São Carlos pelo excelente atendimento.
- Ao Alessandro (Sandrão Baiano) e aos irmãos da república da Vila Monteiro, que foram os primeiros a me acolher nesta cidade.
- Ao seu Jair e à dona Niége pelo muito que me apoiaram e por acreditarem em mim.
- Aos meus avós Anália, Alberto e Aparecida pelo imenso carinho e pelo exemplo de vida.
- Ao tio Zezé, tia Maria, tio Osmar, tia Nina e tia Altina por todo o apoio e incentivo que me deram.
- À Maiara, Marcelo e Eliezer.
- Aos meus pais, Valdir e “Cidinha” e às minhas irmãs, Anália e Ana Carolina. A vocês eu agradeço especialmente, pois foram meu estímulo no início e uma ajuda constante e incansável ao longo deste trabalho.
- Especialmente à minha namorada Maira que é uma pessoa maravilhosa. Por todo seu carinho, toda sua atenção e seus cuidados.

Resumo

Neste trabalho implementamos um programa computacional capaz de descrever passo-a-passo o processo de colisão entre dois átomos confinados numa armadilha magneto-óptica em regime frio. Para isso utilizamos o formalismo de Wigner, que é uma formulação equivalente à mecânica quântica, para encontrarmos uma aproximação quase-clássica para as equações que descrevem o sistema. Este formalismo permite-nos separar os graus de liberdade externos dos átomos colidentes, que podem ser tratados de maneira quase-clássica, dos graus internos de liberdade, os quais não tem contraparte clássica e, portanto, são tratados quanticamente.

Abstract

In this work we implement a computer program that describes, step by step, the collision process between two atoms confined in a magneto-optical trap in the cold regime. Here we utilize the Wigner-function theory, which is a formulation of quantum mechanics in terms of a phase space, to find a quasi-classical approximation of the dynamical equations that govern the time evolution of the system. This approach allows us to describe the dynamics in terms of external and internal degrees of freedom. The former degrees of freedom are treated quasi-classically, while the latter, because they do not have a classical counterpart, are treated quantum mechanically.

Sumário

| | |
|--|-----------|
| Capítulo 1: Introdução | 1 |
| Capítulo 2: Colisões frias - função de Wigner e teoria de Landau-Zener | 5 |
| 2.1 A teoria de Landau-Zener | 5 |
| 2.1.1 A teoria de Landau-Zener para processos de colisão | 5 |
| 2.2 O formalismo de Wigner | 11 |
| 2.2.1 A transformada de Weyl | 13 |
| 2.2.2 A função de Wigner | 14 |
| 2.3 Função de Wigner para sistemas de dois estados | 15 |
| 2.3.1 Hamiltoniano para um sistema de dois estados | 15 |
| 2.3.2 A função de Wigner na formulação de Heisenberg | 17 |
| Capítulo 3: O método do operador partido e o algoritmo utilizado | 21 |
| 3.1 O método do operador partido | 21 |
| 3.1.1 Aplicação do método do operador partido na resolução da função de Wigner | 25 |
| 3.1.2 Considerações para a obtenção do algoritmo | 30 |
| 3.1.3 O algoritmo | 34 |
| Capítulo 4: Comparação dos resultados | 36 |

| | | |
|------------------------------------|--|-----------|
| 4.1 | O erro do <i>método do operador partido com trajetórias</i> | 36 |
| 4.2 | Sistema de unidades | 37 |
| 4.3 | Potenciais constantes | 38 |
| 4.4 | Potencial linear e a solução por meio de série perturbativa | 45 |
| 4.5 | A teoria de Landau-Zener | 47 |
| 4.6 | Dinâmica de populações e distribuição final de momento para átomos de césio colidentes | 52 |
| 4.7 | Colisão vista passo-a-passo | 59 |
| Capítulo 5: Conclusão | | 78 |
| Referências | | 80 |
| Apêndice A | | 81 |
| 6.1 | Sistema quântico com energias variáveis | 81 |
| Apêndice B | | 83 |
| 7.1 | O formalismo de Wigner | 83 |
| 7.1.1 | A transformada de Weyl | 83 |
| 7.1.2 | Propriedades matriciais de $\hat{\Delta}(x, p)$ | 84 |
| 7.1.3 | Traço de operadores a partir de suas respectivas transformadas .. | 85 |
| 7.1.4 | A função de Wigner | 86 |
| 7.2 | Função de Wigner para sistemas de dois estados | 89 |
| 7.2.1 | Representação de Heisenberg | 90 |
| 7.2.2 | O operador $\hat{\Delta}(x, p)$ na representação de Heisenberg | 92 |

| | |
|---|-----------|
| Apêndice C | 94 |
| 8.1 Sistema de dois níveis com decaimento: expansão em série perturbativa | 94 |
| 8.1.1 Subsídio matemático | 94 |
| 8.1.2 Sistema de dois níveis | 94 |
| 8.1.3 Termos referentes a λ^0 | 97 |
| 8.1.4 Termos referentes a λ^2 | 103 |

Lista de Figuras

| | | |
|----|--|----|
| 1. | Gaussiana utilizada como condição inicial para a componente da função de Wigner matricial | 40 |
| 2. | Resultado analítico da componente $\rho_{11}(x, p, t)$ para $t = 100 t_u$ para um potencial chato | 41 |
| 3. | Resultados obtidos através de cálculo numérico utilizando o método do operador desde o tempo $t = 0$ até $t = 100 t_u$ partido com a condição inicial $\rho_{11}(x, p, 0) = \frac{1}{\pi} \exp[-(x - x_0)^2 - (p + \sqrt{\pi})]$ para um potencial chato . . | 42 |
| 4. | População de cada um dos estados para potenciais chatos | 44 |
| 5. | Evolução da função de Wigner matricial para potenciais lineares pelo método do operador partido | 46 |
| 6. | Evolução da solução semi-analítica da função de Wigner obtida pela expansão em série perturbativa de potências de Ω | 48 |
| 7. | Condição inicial da função de Wigner que será evoluída numericamente num potencial. Esta função inicial é uma gaussiana normalizada centrada em $x = 10 x_u$ e $p = -\sqrt{\pi} p_u$ | 51 |

8. Evolução da condição inicial desta $t = 0$ até $t = 55 t_u$. Neste instante a função se aproxima da barreira potencial em $x = 0$. Já é possível perceber uma pequena porção da função refletida na região do espaço de fase onde a coordenada de momento p tem valor positivo 52
9. Configuração da função de Wigner no momento em que o pico da função atinge a barreira potencial em $x = 0$ e é refletida de volta. Isso ocorre em $t \approx 112 t_u$ 53
10. Função de Wigner após a reflexão na barreira potencial em $x = 0$ 54
11. Superfície da função de Wigner relativa ao estado excitado no momento em que esta choca-se contra uma barreira potencial posicionada em $x = 8 x_u$. 55
12. Superfície da função de Wigner relativa ao estado excitado no momento em que esta choca-se contra uma barreira potencial posicionada em $x = 6 x_u$. 56
13. Superfície da função de Wigner relativa ao estado excitado no momento em que esta choca-se contra uma barreira potencial posicionada em $x = 10 x_u$. 57
14. Dinâmica da população dos estados fundamental e excitado para o caso em que $\Omega = \gamma_{at}$ 58
15. Distribuição de probabilidade na coordenada de momento ao final de uma colisão para o caso em que $\Omega = \gamma_{at}$ 59

16. Dinâmica da população dos estados fundamental e excitado para o caso em que $\Omega = 4\gamma_{at}$ 60
17. Distribuição de probabilidade na coordenada de momento ao final de uma colisão para o caso em que $\Omega = 4\gamma_{at}$ 60
18. Função de Wigner do estado fundamental para átomos de césio colidentes no instante inicial 62
19. Parte real da coerência no instante inicial para átomos de césio 63
20. Parte imaginária da coerência no instante inicial para átomos de césio 64
21. Função de Wigner do estado excitado no instante inicial para átomos de césio 65
22. Função de Wigner do estado fundamental ao passar pelo cruzamento em $t = 50 t_u$ 66
23. Parte real da coerência da função de Wigner ao passar pelo cruzamento em $t = 50 t_u$ 67
24. Parte imaginária da coerência da função de Wigner ao passar pelo cruzamento em $t = 50 t_u$ 68

25. Função de Wigner do estado excitado ao passar pelo cruzamento em $t = 50 t_u$
 69

26. Função de Wigner do estado excitado no instante ($t = 340 t_u$) em que atinge a
 barreira potencial em $x = 8 x_u$ 70

27. Parte real da coerência da função de Wigner no instante ($t = 340 t_u$) em que
 atinge a barreira potencial em $x = 8 x_u$ 71

28. Parte imaginária da coerência da função de Wigner no instante ($t = 340 t_u$) em
 que atinge a barreira potencial em $x = 8 x_u$ 72

29. Função de Wigner do estado excitado no instante ($t = 340 t_u$) em que atinge a
 barreira potencial em $x = 8 x_u$ 73

30. Função de Wigner do estado fundamental refletida dirigindo-se para o
 cruzamento 74

31. Parte real da coerência da função de Wigner refletida 75

32. Parte imaginária da coerência da função de Wigner refletida 76

33. Função de Wigner do estado excitado refletida dirigindo-se para o cruzamento
 77

Capítulo 1: Introdução

Desde o início a mecânica quântica vem-se buscando compreender como a dinâmica dos graus de liberdade internos - que não possuem análogo clássico - afetam a dinâmica dos graus de liberdade externos. Como um modelo para entendermos este processo, estudamos a colisão de dois átomos alcalinos aprisionados numa armadilha magneto-óptica.

O Instituto de Física de São Carlos tem feito experiências na área de aprisionamento de nuvens de átomos alcalinos confinados em tais armadilhas pela utilização do laser. A descrição, ainda que sucinta de tal aparato nos facilitará o entendimento dos processos envolvidos, bem como das motivações deste trabalho. Para tal devemos considerar uma região do espaço, em que três pares ortogonais de feixes laser contrapropagantes dois a dois se cruzem, onde existam, ainda, duas espiras circulares, idênticas com simetria no eixo z , em configuração anti-Helmholtz. Desta maneira é possível, tomando-se os devidos cuidados com os demais parâmetros envolvidos, confinar uma nuvem de átomos, que pode chegar a temperaturas da ordem de apenas alguns microkelvins. O resfriamento e o aprisionamento de átomos e suas aplicações renderam o prêmio Nobel de física em 1997 a Chu[1], Cohen-Tannoudji[2] e Phillips[3]. Uma descrição mais completa sobre o assunto pode ser vista em [4].

Uma importante motivação para o estudo dos processos colisionais, envolvendo átomos confinados, são os mecanismos de perda causados por tais processos. Estes processos

colisionais são dissipativos e podem restringir o tempo e a densidade de átomos confinados em uma armadilha magneto-óptica.

Podemos descrever o escape radiativo da seguinte maneira: consideremos um átomo em seu estado excitado de simetria P acelerado em direção a outro átomo em seu estado fundamental de simetria S. Após ganharem uma certa quantidade de energia cinética relativa, devido à aceleração sofrida por estarem sob ação do potencial excitado, pode haver emissão espontânea de fótons pela “quase-molécula”. Esta transição radiativa não afeta, essencialmente, o movimento relativo dos átomos e tem como efeito produzir dois átomos em seus estados fundamentais com energia cinética relativa maior do que quando se aproximaram pela primeira vez. Se este acréscimo de energia cinética relativa for maior do que a profundidade em energia potencial da armadilha magneto-óptica, o par de átomos escapa da armadilha.

A emissão espontânea pode deixar de ocorrer, quando isto acontece para um par atômico em colisão, sob a ação de um potencial atrativo, então durante um período suficientemente longo, o par atômico pode se aproximar o suficiente para que haja a mudança de estrutura fina. Cada um dos átomos idênticos recebe o mesmo acréscimo de energia cinética. Este aumento é, em geral, suficiente para que o par atômico escape da nuvem confinada, no fenômeno conhecido como colisão de mudança de estrutura fina.

Especificamente neste mestrado, abordamos apenas os processos relacionados ao escape radiativo (os processos envolvendo mudança de estrutura fina já estão sendo desenvolvidos, também em nosso instituto). Fizemos, para tal, uso de um sistema de dois níveis, e tratamos especificamente o caso de átomos de césio confinado.

Foram duas as principais abordagens estudadas por nós durante o desenrolar deste mestrado. A primeira abordagem para sistemas de dois níveis se fez através da teoria de Landau-Zerner[5], onde, devido às baixas velocidades, os graus de liberdade externos dos dois átomos são tratados classicamente, sendo apenas os graus de liberdades internos tratados quanticamente.

A segunda abordagem e parte principal deste trabalho foi feita utilizando a formulação de Wigner [6][7] e Weyl [8], inédita nesta área para o tratamento de átomos colidentes. A descrição em termos do operador de Wigner nos permite tratar a dinâmica translacional da quase-molécula de maneira puramente clássica, sem, no entanto, alterar a dinâmica interna do sistema, que continua puramente quântica. A utilização deste formalismo, foi feita sob o ponto de vista de Heisenberg seguindo um procedimento análogo ao descrito por Cook[9], mas para um sistema de dois níveis acoplados via laser de prova, o que resultou em um sistema de equações diferenciais acopladas.

A apresentação detalhada das duas abordagens para um sistema de dois níveis, descritas anteriormente, é feita no Capítulo 2. Em seguida, no Capítulo 3, segue a apresentação dos métodos para resolução das equações diferenciais encontradas com a utilização do formalismo de Wigner. O Capítulo 4 se dedica aos resultados obtidos.

O método principal para resolução de tais equações é o método do operador partido, uma variante do método de Euler, que devido ao fato de podermos separar os graus internos e externos do sistema foi apelidado por nós de *método do operador partido com trajetórias*, uma vez que a dinâmica externa do problema obedece uma equação clássica de trajetórias, a equação de Liouville.

Os resultados obtidos com a resolução das equações diferenciais são apresentados, também no capítulo 4, como pacotes de onda no espaço de fase, em tempos de colisão distintos. Esta é outra grande vantagem deste método pois é possível acompanhar a dinâmica dos pacotes de onda durante todo o processo colisional e não apenas nos instantes inicial e final.

Capítulo 2: Colisões frias - função de Wigner e teoria de Landau-Zener

2.1 A teoria de Landau-Zener

A teoria de Landau-Zener é um importante instrumento para análise de sistemas onde ocorrem colisões frias mediadas por fótons. A principal vantagem dessa abordagem, no tratamento de colisões frias, é que nela o movimento translacional dos átomos é substituído por um sistema quântico de dois níveis com energia potencial dependente do tempo, como mostrado no Apêndice A.

2.1.1 A teoria de Landau-Zener para processos de colisão

Suponhamos que dois átomos, aprisionados numa armadilha magneto-óptica, estão em processo de colisão. Suponhamos também que ambos se encontrem no estado fundamental e que a colisão ocorra na presença de fótons e que, devido à baixa temperatura, a energia cinética dos dois possa ser desprezada em relação à energia potencial. Assim, inicialmente temos N fótons na armadilha no mesmo modo e os dois átomos no estado fundamental. Denotaremos este estado atômico por $|g\rangle$. O estado do sistema todo será denotado por $|g, N\rangle$, indicando que o sistema todo encontra-se no estado fundamental com N fótons. A energia deste estado será dada por $E_g + (N + \frac{1}{2}) \hbar\omega_L$ sendo E_g a energia de interação dos átomos no estado fundamental, e $(N + \frac{1}{2}) \hbar\omega_L$ a energia dos fótons presentes, ω_L é a frequência de cada um deles.

Consideremos também que durante o processo de colisão um fóton seja absorvido por um dos átomos presentes, fazendo com que este seja levado a um estado excitado $|e\rangle$. Denotaremos este estado por $|e, N - 1\rangle$. A energia deste estado será então $E_e + (N - \frac{1}{2}) \hbar\omega_L$, sendo E_e a energia de interação entre os dois átomos neste estado eletrônico. Vale lembrar que apenas um dos átomos se encontra no estado excitado, permanecendo o outro no estado fundamental; porém, a este estado do sistema composto pelos dois átomos conjuntamente chamaremos excitado.

Devido ao fato da distribuição de cargas do átomo alterar-se após a absorção, a forma como os dois átomos se atraem também se altera. Uma vez que a velocidade dos dois átomos são desprezíveis, podemos considerar que as energias E_g e E_e se devam apenas à interação átomo-átomo, desprezando assim a energia cinética do sistema. Desta forma, podemos escrever

$$\begin{cases} E_g = V_g(x) \\ E_e = V_e(x) \end{cases},$$

já que esta energia potencial de interação depende da distância x entre os dois átomos considerados pontuais. Devemos deixar claro que em nosso estudo estamos considerando o centro de um dos átomos como origem do sistema de coordenadas, portanto x representa a distância interatômica.

As componentes do hamiltoniano do sistema podem ser obtidas através das energias de cada estado

$$\begin{aligned} \hat{H} |g, N\rangle &= \left[V_g(x) + \left(N + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_L \right] |g, N\rangle, \\ \hat{H} |e, N - 1\rangle &= \left[V_e(x) + \left(N - \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_L \right] |e, N - 1\rangle. \end{aligned}$$

Por simplicidade de notação faremos

$$|g, N\rangle \equiv |1\rangle,$$

$$|e, N - 1\rangle \equiv |2\rangle,$$

$$V_g(x) \equiv V_1(x),$$

$$V_e(x) \equiv V_2(x).$$

Adicionando um acoplamento (pela aproximação de *onda girante*) entre os dois estados, podemos escrever o hamiltoniano em sua forma matricial

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} V_1(x) + (N + \frac{1}{2}) \hbar\omega_L & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega & V_2(x) + (N - \frac{1}{2}) \hbar\omega_L \end{bmatrix}.$$

Para simplificar a obtenção do resultado analítico podemos fazer

$$\hat{H} = \hat{H}_V + \hat{H}_N,$$

$$\hat{H}_V = \begin{bmatrix} V_1(x) & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega & V_2(x) - \hbar\omega_L \end{bmatrix},$$

$$\hat{H}_N = \begin{bmatrix} (N + \frac{1}{2}) \hbar\omega_L & 0 \\ 0 & (N + \frac{1}{2}) \hbar\omega_L \end{bmatrix}.$$

A equação de Schrödinger do sistema será

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = (\hat{H}_V + \hat{H}_N) |\psi(t)\rangle \quad (2.1)$$

cuja solução formal é,

$$|\psi(t)\rangle = \exp \left[-\frac{i(t-t_0)}{\hbar} (\hat{H}_V + \hat{H}_N) \right] |\psi(t_0)\rangle.$$

Dado que

$$[\hat{H}_V, \hat{H}_N] = 0,$$

$$|\psi(t)\rangle = \exp \left[-\frac{i(t-t_0)}{\hbar} (\hat{H}_V + \hat{H}_N) \right] |\psi(t_0)\rangle =$$

$$= \exp \left[-\frac{i(t-t_0)\hat{H}_N}{\hbar} \right] \left\{ \exp \left[-\frac{i(t-t_0)\hat{H}_V}{\hbar} \right] |\psi(t_0)\rangle \right\}.$$

O termo entre chaves dessa expressão é a solução da equação

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}_V |\psi(t)\rangle = \begin{bmatrix} V_1(x) & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega & V_2(x) - \hbar\omega_L \end{bmatrix} |\psi(t)\rangle. \quad (2.2)$$

Portanto, para obtermos a solução de (2.1), dada uma condição inicial $|\psi(t_0)\rangle$, basta encontrarmos a solução de (2.2) e em seguida aplicarmos sobre este o operador $\exp \left[-\frac{i(t-t_0)\hat{H}_N}{\hbar} \right]$. Devido a isto, de agora em diante concentrar-nos-emos apenas na solução desta última equação.

Outra consideração importante a ser feita é que apenas a estrutura interna dos átomos será tratada quanticamente, sendo a distância interatômica x tratada como uma grandeza clássica bem definida, ou seja, x não mais é um operador, mas um parâmetro do sistema com seu valor bem definido no tempo $x(t)$. Desta maneira temos

$$\begin{cases} V_1(x) = V_1(x(t)) \equiv \tilde{V}_1(t), \\ V_2(x) = V_2(x(t)) \equiv \tilde{V}_2(t), \\ \psi(x,t) = \psi(x(t), t) \equiv \psi(t) \end{cases}$$

e a equação do sistema será dada por

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \begin{bmatrix} \tilde{V}_1(t) & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega & \tilde{V}_2(t) - \hbar\omega_L \end{bmatrix} |\psi(t)\rangle, \quad (2.3)$$

que é similar à equação ver Apendice A com

$$\begin{cases} \hbar\omega_1(t) = \tilde{V}_1(t), \\ \hbar\omega_2(t) = \tilde{V}_2(t) - \hbar\omega_L \end{cases}$$

e, da mesma forma, podemos fazer

$$\hat{H}_0(t) = \begin{bmatrix} \tilde{V}_1(t) & 0 \\ 0 & \tilde{V}_2(t) - \hbar\omega_L \end{bmatrix},$$

$$\hat{H}_\Omega = \begin{bmatrix} 0 & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega & 0 \end{bmatrix},$$

e a transformada

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_0(\tau) d\tau\right] |\phi(t)\rangle, \quad (2.4)$$

que levar-nos-á a

$$i\hbar \frac{\partial |\phi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{V}(t) |\phi(t)\rangle,$$

com

$$\hat{V}(t) = \hbar\Omega \begin{bmatrix} 0 & \exp[-i\eta(t)] \\ \exp[i\eta(t)] & 0 \end{bmatrix},$$

$$\eta(t) = \theta_2(t) - \theta_1(t),$$

$$\begin{cases} \theta_1(t) = \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t \tilde{V}_1(\tau) d\tau, \\ \theta_2(t) = \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t \tilde{V}_2(\tau) d\tau - \omega_L(t - t_0). \end{cases}$$

A solução pode ser obtida pela série de Dyson que é escrita como ver Apêndice A

$$|\phi(t)\rangle = \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \sum_{n=1}^{\infty} (-i\Omega)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \times \right.$$

$$\left. \times \prod_{m=1}^n \begin{bmatrix} 0 & \exp[-i\eta(t_m)] \\ \exp[i\eta(t_m)] & 0 \end{bmatrix} \right\} |\phi(t_0)\rangle.$$

Sabendo que inicialmente o sistema encontra-se no estado fundamental, através de

(2.4),

$$|\psi(t_0)\rangle = |1\rangle = |\phi(t_0)\rangle,$$

o que nos permite calcular a amplitude de probabilidade de transição do sistema no instante

t :

$$\langle 1 | \phi(t) \rangle = 1 + \sum_{n=par} (-i\Omega)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \times$$

$$\times \exp[-i\eta(t_1) + i\eta(t_2) - \dots + i\eta(t_n)], \quad (2.5)$$

$$\langle 2 | \phi(t) \rangle = \sum_{n=impar} (-i\Omega)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \times$$

$$\times \exp[i\eta(t_1) - i\eta(t_2) + \dots + i\eta(t_n)]. \quad (2.6)$$

Uma vez que os átomos estão a velocidades baixíssimas, podemos desprezar a aceleração sofrida por eles ao passarem pelo ponto de Condon e supor que $\tilde{V}_1(t)$ e $\tilde{V}_2(t)$ variem aproximadamente como

$$\tilde{V}_2(t) - \hbar\omega_L - \tilde{V}_1(t) = -\hbar\alpha t. \quad (2.7)$$

Assim

$$\begin{aligned} \theta_2(t) - \theta_1(t) &= \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t [\tilde{V}_2(\tau) - \hbar\omega_L - \tilde{V}_1(\tau)] d\tau \Rightarrow \\ &\Rightarrow \eta(t) = -\frac{\alpha(t^2 - t_0^2)}{2}. \end{aligned}$$

Para calcularmos α façamos

$$\tilde{V}_1(t) \approx V_1(x_c) + V_1'(x_c)[x(t) - x_c],$$

$$\tilde{V}_2(t) \approx V_2(x_c) + V_2'(x_c)[x(t) - x_c],$$

e substituamos em (2.7)

$$\alpha = -\frac{p_0 [V_2'(x_c) - V_1'(x_c)]}{\mu\hbar}, \quad (2.8)$$

sendo μ a massa reduzida dos dois átomos.

Assim, dada (2.8), podemos calcular o quadrado do módulo de (2.5) para $t_0 = -\infty$ e $t = \infty$, o que nos dará

$$|\langle 1 | \phi(\infty) \rangle|^2 = \exp \left[-\frac{2\pi\mu\hbar\Omega^2}{|p_0| |V_2'(x_c) - V_1'(x_c)|} \right].$$

Sabendo que, pela condição de normalização

$$|\langle 1 | \phi(\infty) \rangle|^2 + |\langle 2 | \phi(\infty) \rangle|^2 = 1,$$

então,

$$|\langle 2 | \phi(\infty) \rangle|^2 = 1 - \exp \left[-\frac{2\pi\mu\hbar\Omega^2}{|p_0| |V_2'(x_c) - V_1'(x_c)|} \right],$$

Encontramos assim as probabilidades de transição de estado para colisões frias pela teoria de Landau-Zener[5].

2.2 O formalismo de Wigner

Desde o advento da mecânica quântica vem-se buscando uma maneira de se representar um sistema quântico através de funções de distribuição simples, análogas às da mecânica estatística clássica, ou seja, sem a utilização de operadores quânticos, utilizando ao invés disso, funções dependentes somente das variáveis de estado x e p . Classicamente, um sistema - neste caso trataremos apenas uma partícula, porém os resultados podem ser estendidos a sistemas de muitas partículas - pode ser descrito por uma função de distribuição de probabilidade $P_{cl}(x, p, t)$ dependente somente das variáveis x de coordenada, p de momento e do tempo t . O valor médio de uma função qualquer $A(x, p)$, associada a um observável físico A , será dado por

$$\langle A \rangle_{cl} = \int dx \int dp A(x, p) P_{cl}(x, p, t).$$

Quanticamente o valor médio, ou esperado de um operador $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$, associado a um observável A é dado por

$$\langle A \rangle_Q = Tr [\hat{\rho}(t) \hat{A}],$$

sendo que $\hat{\rho}(t)$ é o operador densidade que descreve o sistema quântico em questão e que é definido como

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|,$$

sendo $|\psi(t)\rangle$ a função de estado do sistema.

Seria interessante que, para um sistema quântico, houvesse uma expressão $A(x, p)$ associada ao operador \hat{A} e uma função de distribuição de probabilidade $P_Q(x, p, t)$ associada a $\hat{\rho}(t)$ - veja que $A(x, p)$ e $P_Q(x, p, t)$ não são operadores, pois dependem somente dos valores clássicos de x e p , servindo o índice Q apenas para indicar a procedência da distribuição - tal que

$$A(x, p) \rightleftharpoons \hat{A},$$

$$P_Q(x, p, t) \rightleftharpoons \hat{\rho}(t),$$

$$\langle A \rangle_Q = \int dx \int dp A(x, p) P_Q(x, p, t).$$

Devido ao princípio de incerteza de Heisenberg, não se pode determinar uma função $P_Q(x, p, t)$, pois é impossível determinarmos simultaneamente a posição e o momento da partícula. Mesmo assim, várias propostas foram feitas para se determinar funções com propriedades semelhantes às esperadas para $P_Q(x, p, t)$. Estas funções são conhecidas como funções quase-probabilísticas. A primeira delas foi introduzida por E. P. Wigner em 1932 [6] com a intenção de estudar correções quânticas para a estatística clássica. A relação entre o operador $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$ e sua função correspondente $A(x, p)$ é dada pela transformada de Weyl, que será estudada adiante.

A função de Wigner é não-relativística, uma vez que não é invariante sob transformações de Lorentz, porém, tem se mostrado de grande utilidade em química quântica e óptica quântica. Para nosso caso essa função será ideal, pois estaremos tratando somente sistemas com velocidades muito baixas, próximas de zero, o que torna os efeitos relativísticos totalmente desprezíveis. Outras funções quasi-probabilísticas foram propostas, as quais são invariantes sob transformações de Lorentz, porém algumas são de utilidade limitada e

outras apresentam certa complexidade ao serem utilizadas, o que não é interessante em nosso trabalho.

2.2.1 A transformada de Weyl

A transformada de Weyl [8] é o recurso que nos permitirá associar funções clássicas a operadores quânticos para o formalismo de Wigner.

Princípios:

A descrição de um sistema quântico mapeado no espaço de fase é possível se e somente se a cada operador \hat{A} qualquer, existir uma correspondente função $A(x, p)$. Tal correspondência é feita via transformada de Weyl.

Dado um operador \hat{A} podemos escrevê-lo como

$$\hat{A} = \int dx \int dp A(x, p) \hat{\Delta}(x, p), \quad (2.9)$$

sendo

$$A(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int du \langle x+u | \hat{A} | x-u \rangle \exp\left(-\frac{2ipu}{\hbar}\right), \quad (2.10)$$

$$\hat{\Delta}(x, p) = 2 \int du \exp\left(\frac{2ipu}{\hbar}\right) |x+u\rangle \langle x-u|. \quad (2.11)$$

As expressões (2.10) e (2.11) são, respectivamente, a transformada de Weyl e uma base de operadores.

De uma forma totalmente equivalente podemos fazer

$$A(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int dv \langle p+v | \hat{A} | p-v \rangle \exp\left(\frac{2ivx}{\hbar}\right), \quad (2.12)$$

$$\hat{\Delta}(x, p) = 2 \int dv \exp\left(-\frac{2ivx}{\hbar}\right) |p+v\rangle \langle p-v|.$$

A base de operadores (2.11) ainda pode ser escrita como

$$\hat{\Delta}(x, p) = 2\pi\hbar \exp\left[\left(\frac{\hbar}{2i}\right) \frac{\partial^2}{\partial x \partial p}\right] \delta(x - \hat{x}) \delta(p - \hat{p}). \quad (2.13)$$

Essa forma, substituída em (2.9) nos dá

$$\hat{A} = 2\pi\hbar \int dx \int dp \delta(x - \hat{x}) \delta(p - \hat{p}) \left\{ \exp \left[\left(\frac{\hbar}{2i} \right) \frac{\partial^2}{\partial x \partial p} \right] A(x, p) \right\}.$$

Esta expressão mostra que, para encontrarmos o operador \hat{A} a partir de sua transformada de Weyl $A(x, p)$, devemos inicialmente calcular $\exp \left[\left(\frac{\hbar}{2i} \right) \frac{\partial^2}{\partial x \partial p} \right] A(x, p)$ e depois substituir as variáveis x e p pelos operadores \hat{x} e \hat{p} , respectivamente, com a ressalva de se escrever os operadores de coordenada à esquerda dos operadores de momento.

2.2.2 A função de Wigner

A função de Wigner nos é dada quando tomamos a transformada de Weyl do operador densidade. Através de (2.10) ou (2.12) temos

$$W(x, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \int du \langle x + u | \hat{\rho}(t) | x - u \rangle \exp \left(-\frac{2ipu}{\hbar} \right) \quad (2.14)$$

$$= \frac{1}{\pi\hbar} \int dv \langle p + v | \hat{\rho}(t) | p - v \rangle \exp \left(\frac{2ivx}{\hbar} \right). \quad (2.15)$$

Ou ainda, por ver Apêndice B

$$W(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \text{Tr} \left[\hat{\rho}(t) \hat{\Delta}(x, p) \right]. \quad (2.16)$$

Das formas (2.14) e (2.15) temos (estas formas foram escolhidas por ser mais fácil observar as propriedades a seguir, porém todas são equivalentes)

$$\int dp W(x, p, t) = |\psi(x, t)|^2,$$

$$\int dx W(x, p, t) = |\phi(p, t)|^2,$$

sendo $\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$ (função de amplitude de probabilidade na coordenada de posição)

e $\phi(p, t) = \langle p | \phi(t) \rangle$ (função de amplitude de probabilidade na coordenada de momento).

Integrando a função de Wigner nas duas variáveis temos

$$\int dx \int dp W(x, p, t) = \int dx |\psi(x, t)|^2 = \int dp |\phi(p, t)|^2 = 1.$$

Para obtermos o valor médio de um operador \hat{A} num sistema quântico descrito pela função de estado $|\psi(t)\rangle$,

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \text{Tr} [\hat{\rho}(t) \hat{A}].$$

Pelo formalismo da transformada de Weyl temos, vide Apêndice B, que o valor médio de \hat{A} pode ser obtido fazendo

$$\langle \hat{A} \rangle = \int dx \int dp A(x, p) W(x, p, t),$$

sendo $A(x, p)$ a transformada de Weyl do operador \hat{A} .

2.3 Função de Wigner para sistemas de dois estados

2.3.1 Hamiltoniano para um sistema de dois estados

Mostraremos nesta seção um modelo para átomos alcalinos idênticos confinados numa armadilha magneto-óptica. Calcularemos para o caso típico de átomos de césio à temperatura de $300 \mu K$ aprisionados na região central da armadilha, ou seja, em torno da região do mínimo do campo magnético quadrupolar introduzido pelas bobinas em configuração anti-Helmholtz. Desta maneira podemos desprezar a existência de campo magnético. Os átomos estão longe do regime de degenerescência quântica, de forma que a maioria das col-

isões são binárias, podendo-se dizer então que esta nuvem de átomos confinados obedece à estatística de Maxwell-Boltzmann.

Consideraremos também que os dois estados estão acoplados através da interação com laser de prova. Isto faz com que haja um bombeamento óptico entre os dois níveis do sistema. Desta maneira, a colisão se inicia com a população do nível excitado diferente de zero. Estas interações estão escritas no hamiltoniano a seguir.

O hamiltoniano de um sistema de dois estados pode ser escrito, na representação de Schrödinger, em termos das coordenadas relativa ao centro de massa como

$$\hat{H}_S = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} \left(\hat{S}\hat{S}^\dagger + \hat{S}^\dagger\hat{S} \right) + V_1(\hat{x}) \hat{S}\hat{S}^\dagger + V_2(\hat{x}) \hat{S}^\dagger\hat{S} + \hbar\Omega \left(\hat{S} + \hat{S}^\dagger \right), \quad (2.17)$$

sendo Ω a frequência de Rabi e os operadores \hat{S} e \hat{S}^\dagger são, respectivamente, os operadores de decaimento e excitação do sistema:

$$\hat{S} = |1\rangle \langle 2|,$$

$$\hat{S}^\dagger = |2\rangle \langle 1|.$$

Assim o operador \hat{S}^\dagger leva o sistema do estado fundamental ($|1\rangle$) para o estado excitado ($|2\rangle$), ao passo que \hat{S} leva o sistema do estado excitado para o estado fundamental. Estes operadores satisfazem as seguintes relações de comutação

$$\left[\hat{S}^\dagger, \hat{S} \right] = \hat{S}^\dagger\hat{S} - \hat{S}\hat{S}^\dagger = \hat{S}_3,$$

$$\left[\hat{S}, \hat{S}^\dagger\hat{S} \right] = \hat{S},$$

$$\left[\hat{S}^\dagger, \hat{S}^\dagger\hat{S} \right] = -\hat{S}^\dagger,$$

$$\left[\hat{S}_3, \hat{S}^\dagger\hat{S} \right] = 0.$$

Os operadores \hat{S} , \hat{S}^\dagger comutam com $\hat{\Delta}_S(x, p)$.

2.3.2 A função de Wigner na formulação de Heisenberg

De posse dessas relações de comutação dos operadores \hat{S} , \hat{S}^\dagger e $\hat{\Delta}_S(x, p)$ podemos determinar uma expressão para a variação temporal de $\hat{\Delta}_H(x, p, t)$ para o hamiltoniano apresentado em (2.17). Conforme é mostrado no Apêndice B,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{\Delta}_H(x, p, t)}{\partial t} &= U^\dagger(t, 0) \left[\hat{\Delta}_S(x, p), \hat{H}_S \right] U(t, 0) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{\partial \hat{\Delta}_H(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \hat{\Delta}_H(x, p, t)}{\partial x} = \\ &= \frac{1}{(i\hbar)\pi\hbar} \int dp' \hat{\Delta}_H(x, p', t) \hat{S}(t) \hat{S}^\dagger(t) \int ds \{V_1(x+s) - V_1(x-s)\} \exp\left[-\frac{2i(p-p')s}{\hbar}\right] + \\ &+ \frac{1}{(i\hbar)\pi\hbar} \int dp' \hat{\Delta}_H(x, p', t) \hat{S}^\dagger(t) \hat{S}(t) \int ds \{V_2(x+s) - V_2(x-s)\} \exp\left[-\frac{2i(p-p')s}{\hbar}\right]. \end{aligned}$$

Como vemos, a variação temporal de $\hat{\Delta}_H(x, p, t)$ depende dos valores assumidos por $\hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}(t) \hat{S}^\dagger(t)$ e $\hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}^\dagger(t) \hat{S}(t)$ no decorrer do tempo. Portanto, é necessário calcular expressões para as suas variações temporais, bem como de $\hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}(t)$ e $\hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}^\dagger(t)$, pois estes aparecerão na equação da variação temporal daqueles.

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \left[\hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}(t) \hat{S}^\dagger(t) \right]}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \left[\hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}(t) \hat{S}^\dagger(t) \right]}{\partial x} = \\ &= \frac{1}{(i\hbar)\pi\hbar} \int dp' \left[\hat{\Delta}_H(x, p', t) \hat{S}(t) \hat{S}^\dagger(t) \right] \int ds [V_1(x+s) - V_1(x-s)] \exp\left[-\frac{2i(p-p')s}{\hbar}\right] + \\ &\quad -i\Omega \hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}(t) + \Omega \hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}^\dagger(t), \\ &\frac{\partial \left[\hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}^\dagger(t) \hat{S}(t) \right]}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \left[\hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}^\dagger(t) \hat{S}(t) \right]}{\partial x} = \\ &= \frac{1}{(i\hbar)\pi\hbar} \int dp' \left[\hat{\Delta}_H(x, p', t) \hat{S}^\dagger(t) \hat{S}(t) \right] \int ds [V_2(x+s) - V_2(x-s)] \exp\left[-\frac{2i(p-p')s}{\hbar}\right] + \\ &\quad +i\Omega \hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}(t) - i\Omega \hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}^\dagger(t), \\ &\frac{\partial \left[\hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}(t) \right]}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \left[\hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}(t) \right]}{\partial x} = \\ &= \frac{1}{(i\hbar)\pi\hbar} \int dp' \left[\hat{\Delta}_H(x, p', t) \hat{S}(t) \right] \int ds [V_2(x+s) - V_1(x-s)] \exp\left[-\frac{2i(p-p')s}{\hbar}\right] + \\ &\quad -i\Omega \hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}(t) \hat{S}^\dagger(t) + i\Omega \hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}^\dagger(t) \hat{S}(t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial \left[\hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}^\dagger(t) \right]}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \left[\hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}^\dagger(t) \right]}{\partial x} = \\
 = & \frac{1}{(i\hbar)\pi\hbar} \int dp' \left[\hat{\Delta}_H(x, p', t) \hat{S}^\dagger(t) \right] \int ds [V_1(x+s) - V_2(x-s)] \exp \left[-\frac{2i(p-p')s}{\hbar} \right] + \\
 & -i\Omega \hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}^\dagger(t) \hat{S}(t) + i\Omega \hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}(t) \hat{S}^\dagger(t).
 \end{aligned}$$

Tomando o valor médio das equações acima, e definindo

$$\begin{aligned}
 W(x, p, t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \left\langle \hat{\Delta}_H(x, p, t) \right\rangle, \\
 \rho_{11}(x, p, t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \left\langle \hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}(t) \hat{S}^\dagger(t) \right\rangle, \\
 \rho_{12}(x, p, t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \left\langle \hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}^\dagger(t) \right\rangle, \\
 \rho_{21}(x, p, t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \left\langle \hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}(t) \right\rangle, \\
 \rho_{22}(x, p, t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \left\langle \hat{\Delta}_H(x, p, t) \hat{S}^\dagger(t) \hat{S}(t) \right\rangle, \\
 J_{mn}(x, p) &= \frac{1}{(i\hbar)\pi\hbar} \int du [V_m(x+u) - V_n(x-u)] \exp \left[-\frac{2ipu}{\hbar} \right], \quad (2.18)
 \end{aligned}$$

temos

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial W(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial W(x, p, t)}{\partial x} &= \int dp' \rho_{11}(x, p', t) J_{11}(x, p-p') + \\
 & \int dp' \rho_{22}(x, p', t) J_{22}(x, p-p'), \\
 \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial x} &= \int dp' \rho_{11}(x, p', t) J_{11}(x, p-p') + \\
 & + i\Omega \rho_{12}(x, p, t) - i\Omega \rho_{21}(x, p, t), \quad (2.19)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial x} &= \int dp' \rho_{12}(x, p', t) J_{12}(x, p-p') + \\
 & + i\Omega \rho_{11}(x, p, t) - i\Omega \rho_{22}(x, p, t), \quad (2.20)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial x} &= \int dp' \rho_{21}(x, p', t) J_{21}(x, p-p') - \\
 & - i\Omega \rho_{11}(x, p, t) + i\Omega \rho_{22}(x, p, t), \quad (2.21)
 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial x} = \int dp' \rho_{22}(x, p', t) J_{22}(x, p - p') - i\Omega \rho_{12}(x, p, t) + i\Omega \rho_{21}(x, p, t). \quad (2.22)$$

As funções $J_{mn}(x, p)$ ainda podem ser escritas como

$$J_{mn}(x, p) = \frac{\sqrt{2\pi\hbar}}{(i\hbar)\pi\hbar} \left[U_m(2p) \exp\left(\frac{2ipx}{\hbar}\right) - U_n(-2p) \exp\left(-\frac{2ipx}{\hbar}\right) \right], \quad (2.23)$$

sendo

$$U_j(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx V_j(x) \exp\left(-\frac{ikx}{\hbar}\right).$$

Expandindo (2.18) em série de potências de u e efetuando as integrações em u e p' podemos separar os termos de acordo com sua ordem em \hbar :

$$\int dp' \rho_{mn}(x, p', t) J_{mn}(x, p - p') = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\hbar i)^{k-1}}{2^k k!} \left[\frac{d^k V_m(x)}{dx^k} - (-1)^k \frac{d^k V_n(x)}{dx^k} \right] \frac{\partial^k \rho_{mn}(x, p, t)}{\partial p^k}.$$

Tomando os termos referentes a $k = 0$ e $k = 1$ temos

$$\int dp' \rho_{mn}(x, p', t) J_{mn}(x, p - p') \approx (\hbar i)^{-1} [V_m(x) - V_n(x)] \rho_{mn}(x, p, t) + \frac{1}{2} \left[\frac{dV_m(x)}{dx} + \frac{dV_n(x)}{dx} \right] \frac{\partial \rho_{mn}(x, p, t)}{\partial p}.$$

Esta é chamada aproximação quase-clássica.

Dessa maneira as equações (2.19), (2.20), (2.21) e (2.22) tomarão a seguinte forma

$$\frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{dV_1(x)}{dx} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial p} = i\Omega \rho_{12}(x, p, t) - i\Omega \rho_{21}(x, p, t), \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{1}{2} \left[\frac{dV_1(x)}{dx} + \frac{dV_2(x)}{dx} \right] \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial p} = \\ = i\Theta(x) \rho_{12}(x, p, t) + i\Omega \rho_{11}(x, p, t) - i\Omega \rho_{22}(x, p, t), \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{1}{2} \left[\frac{dV_1(x)}{dx} + \frac{dV_2(x)}{dx} \right] \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial p} =$$

$$= -i\Theta(x)\rho_{21}(x,p,t) - i\Omega\rho_{11}(x,p,t) + i\Omega\rho_{22}(x,p,t), \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial\rho_{22}(x,p,t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu}\frac{\partial\rho_{22}(x,p,t)}{\partial x} - \frac{dV_2(x)}{dx}\frac{\partial\rho_{22}(x,p,t)}{\partial p} = -i\Omega\rho_{12}(x,p,t) + i\Omega\rho_{21}(x,p,t), \quad (2.27)$$

sendo

$$\Theta(x) = \frac{V_2(x) - V_1(x)}{\hbar}.$$

As equações diferenciais (2.24), (2.25) (2.26) e (2.27) acima serão um importante objeto de estudos a seguir, uma vez que o cerne deste trabalho será a resolução numérica das mesmas.

Capítulo 3: O método do operador partido e o algoritmo utilizado

No presente capítulo explicitaremos os métodos numéricos utilizados na resolução do sistema de equações diferenciais acopladas obtidas a partir do formalismo de Wigner. Em especial, falaremos aqui do método do operador partido, renomeado por nós como *método do operador partido com trajetórias*, uma vez que a evolução externa de nosso sistema obedece a uma equação clássica de trajetória. Em seguida, daremos ênfase aos principais pontos do algoritmo desenvolvido por nós.

3.1 O método do operador partido

Um método bastante interessante para a resolução do sistema de equações diferenciais acopladas é o método do operador partido. Suponhamos um sistema de equações diferenciais do tipo

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = (\hat{L} + \hat{M}) f(\mathbf{x}, t), \quad (3.28)$$

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n),$$

sendo que os operadores \hat{L} e \hat{M} independem de t , atuando somente no conjunto de variáveis \mathbf{x} . A solução deste sistema pode ser escrita como

$$f(\mathbf{x}, t) = \exp \left[(\hat{L} + \hat{M})(t - t_0) \right] f(\mathbf{x}, t_0). \quad (3.29)$$

Apesar de simples, nem sempre o operador $\exp \left[(\hat{L} + \hat{M})(t - t_0) \right]$, que faz com que a função f evolua desde um tempo t_0 até um tempo t , possui uma forma trivial capaz

de conduzir-nos a uma forma analítica simples para $f(\mathbf{x}, t)$, dificultando assim a obtenção dos valores de f para os diferentes valores de t .

Expandindo a solução acima em série de potências de $(t - t_0)$ até segunda ordem temos

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}, t) &= \left[1 + (\hat{L} + \hat{M})(t - t_0) + \frac{1}{2!} (\hat{L} + \hat{M})^2 (t - t_0)^2 + \mathcal{O}((t - t_0)^3) \right] f(\mathbf{x}, t_0) \Rightarrow \\ \Rightarrow f(\mathbf{x}, t) &= \left[1 + (\hat{L} + \hat{M})(t - t_0) + \frac{1}{2} (\hat{L}^2 + \hat{L}\hat{M} + \hat{M}\hat{L} + \hat{M}^2) (t - t_0)^2 + \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{O}((t - t_0)^3) \right] f(\mathbf{x}, t_0). \end{aligned}$$

Por outro lado, suponhamos que seja possível encontrar soluções analíticas para as funções geradas por cada um dos dois operadores que atuam em (3.28), ou seja, que as equações

$$\frac{\partial f_L(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{L} f_L(\mathbf{x}, t), \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial f_M(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{M} f_M(\mathbf{x}, t), \quad (3.31)$$

possuam soluções, as quais seriam, respectivamente,

$$f_L(\mathbf{x}, t) = \exp \left[\hat{L} (t - t_0) \right] f_L(\mathbf{x}, t_0), \quad (3.32)$$

$$f_M(\mathbf{x}, t) = \exp \left[\hat{M} (t - t_0) \right] f_M(\mathbf{x}, t_0), \quad (3.33)$$

e que estas sejam simples em suas formas. De posse destas soluções é possível encontrarmos uma aproximação para o valor da equação (3.28) num determinado instante de tempo t .

Para obtermos tal resultado devemos proceder da seguinte maneira:

Dados os operadores \hat{L} e \hat{M} e o valor inicial $f(\mathbf{x}, t_0)$, este deverá ser evoluído no tempo, desde t_0 até t , apenas com o operador \hat{M} (ou seja, como se a função dependesse apenas de \hat{M}):

$$f(\mathbf{x}, t_0) \xrightarrow{\hat{M}} \exp[\hat{M}(t - t_0)] f(\mathbf{x}, t_0).$$

Logo em seguida esse valor deverá ser usado como condição inicial em uma evolução que utilizará apenas o operador \hat{L} desde o tempo t_0 até t (desta vez como se a função dependesse apenas de \hat{L} , porém com $\exp[\hat{M}(t - t_0)] f(\mathbf{x}, t_0)$ como valor inicial):

$$\exp[\hat{M}(t - t_0)] f(\mathbf{x}, t_0) \xrightarrow{\hat{L}} \exp[\hat{L}(t - t_0)] \exp[\hat{M}(t - t_0)] f(\mathbf{x}, t_0).$$

Conseguimos assim um valor aproximado para a função $f(\mathbf{x}, t)$, o qual será denotado por $f_A(\mathbf{x}, t)$, sendo que o índice A indica tratar-se de uma aproximação.

Expandindo $f_A(\mathbf{x}, t)$ em uma série de potências de $(t - t_0)$ até segunda ordem, temos

$$\begin{aligned} f_A(\mathbf{x}, t) &= \exp[\hat{L}(t - t_0)] \exp[\hat{M}(t - t_0)] f(\mathbf{x}, t_0) \Rightarrow \\ \Rightarrow f_A(\mathbf{x}, t) &= \left[1 + (\hat{L} + \hat{M})(t - t_0) + \frac{1}{2} (\hat{L}^2 + 2\hat{L}\hat{M} + \hat{M}^2)(t - t_0)^2 + \right. \\ &\quad \left. \mathcal{O}((t - t_0)^3) \right] f(\mathbf{x}, t_0) \Rightarrow \\ f(\mathbf{x}, t) - f_A(\mathbf{x}, t) &= -\frac{1}{2} [\hat{L}, \hat{M}] (t - t_0)^2 f(\mathbf{x}, t_0) + \dots \end{aligned}$$

Desta maneira, para encontrarmos o valor aproximado de $f(\mathbf{x}, t_0 + \Delta t)$ a partir de $f(\mathbf{x}, t_0)$ basta seguirmos os seguintes passos:

$$f(\mathbf{x}, t_0) \xrightarrow{\hat{M}} \exp[\hat{M}\Delta t] f(\mathbf{x}, t_0) \xrightarrow{\hat{L}} \exp[\hat{L}\cdot t] \exp[\hat{M}\cdot t] f(\mathbf{x}, t_0). \quad (3.34)$$

O erro de aproximação será

$$E(\Delta t) \sim \frac{1}{2} [\hat{L}, \hat{M}] (\Delta t)^2 f(\mathbf{x}, t_0) + \dots$$

Pode-se ainda expandir essa idéia para operadores que possam ser divididos em mais de duas partes. Supondo um operador que possa ser dividido em três partes

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = (\hat{L} + \hat{M} + \hat{N}) f(\mathbf{x}, t), \quad (3.35)$$

para encontrarmos o valor da função num instante de tempo t dado seu valor em t_0 basta seguirmos os mesmos passos seguidos em (3.34) simplesmente adicionando a evolução com o operador \hat{N} àquela seqüência. Isso nos dará a seqüência

$$f(\mathbf{x}, t_0) \xrightarrow{\hat{N}} \exp[\hat{N}\Delta t] f(\mathbf{x}, t_0) \xrightarrow{\hat{M}} \exp[\hat{M}\Delta t] \exp[\hat{N}\Delta t] f(\mathbf{x}, t_0),$$

e logo em seguida

$$\exp[\hat{M}\Delta t] \exp[\hat{N}\Delta t] f(\mathbf{x}, t_0) \xrightarrow{\hat{L}} \exp[\hat{L}\cdot t] \exp[\hat{M}\cdot t] \exp[\hat{N}\Delta t] f(\mathbf{x}, t_0).$$

O erro neste caso será

$$E(\Delta t) \sim \frac{1}{2} \left([\hat{L}, \hat{M}] + [\hat{L}, \hat{N}] + [\hat{N}, \hat{M}] \right) (\Delta t)^2 f(\mathbf{x}, t_0) + \dots$$

Esse método é útil, pois as equações que descrevem a evolução temporal da função de Wigner podem ser ajustadas à equação (3.28) ou (3.35), uma vez que estas também são equações de primeira ordem em t e possuem outras operações (independentes do tempo) que podem ser agrupadas na forma de operadores matriciais, os quais podem ser separados em duas classes, análogos a \hat{L} e \hat{M} .

3.1.1 Aplicação do método do operador partido na resolução da função de Wigner

O sistema de equações diferenciais que descrevem a evolução temporal de cada uma das componentes da função de Wigner é

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{mn}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{mn}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{1}{2} \left[\frac{dV_m(x)}{dx} + \frac{dV_n(x)}{dx} \right] \frac{\partial \rho_{mn}(x, p, t)}{\partial p} = \\ = - (m - n) i\Theta(x) \rho_{mn}(x, p, t) + i\Omega [\rho_{m,3-n}(x, p, t) - \rho_{3-m,n}(x, p, t)], \end{aligned}$$

sendo

$$m, n = 1, 2.$$

Substituindo os valores dos índices m e n e adicionando um termo de decaimento em cada uma das equações temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{dV_1(x)}{dx} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial p} = \\ = i\Omega [\rho_{12}(x, p, t) - \rho_{21}(x, p, t)] + \Gamma \rho_{22}(x, p, t), \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{1}{2} \left[\frac{dV_1(x)}{dx} + \frac{dV_2(x)}{dx} \right] \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial p} = \\ = i\Omega [\rho_{11}(x, p, t) - \rho_{22}(x, p, t)] + \left[i\Theta(x) - \frac{\Gamma}{2} \right] \rho_{12}(x, p, t), \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{1}{2} \left[\frac{dV_1(x)}{dx} + \frac{dV_2(x)}{dx} \right] \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial p} = \\ = -i\Omega [\rho_{11}(x, p, t) - \rho_{22}(x, p, t)] - \left[i\Theta(x) + \frac{\Gamma}{2} \right] \rho_{21}(x, p, t), \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{dV_1(x)}{dx} \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial p} = \\ = -i\Omega [\rho_{12}(x, p, t) - \rho_{21}(x, p, t)] - \Gamma \rho_{22}(x, p, t), \end{aligned} \quad (3.39)$$

com $V_1(x)$, $V_2(x)$ e $\Theta(x)$ já definidos anteriormente e os termos dependentes de Γ simulam o decaimento do sistema para o estado fundamental. O tempo de decaimento é da ordem de $\frac{2\pi}{\Gamma}$.

Tal sistema de equações não possui uma solução analítica. Por causa disso, para encontrarmos uma solução aproximada para a evolução de cada uma das componentes do sistema acima podemos definir

$$\tilde{u}(x, p, t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(x, p, t) \\ \rho_{12}(x, p, t) \\ \rho_{21}(x, p, t) \\ \rho_{22}(x, p, t) \end{pmatrix},$$

$$\hat{L} = -\hat{U} + \hat{V},$$

sendo

$$\hat{U} = \frac{p}{\mu} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} V_1'(x) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}[V_1'(x) + V_2'(x)] & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}[V_1'(x) + V_2'(x)] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_2'(x) \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial p},$$

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} 0 & i\Omega & -i\Omega & 0 \\ i\Omega & i\Theta(x) & 0 & -i\Omega \\ -i\Omega & 0 & -i\Theta(x) & i\Omega \\ 0 & -i\Omega & i\Omega & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \Gamma \\ 0 & -\frac{\Gamma}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\Gamma}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Gamma \end{pmatrix}.$$

Desta forma o conjunto de equações acima (equações de (3.36) a (3.39)) pode ser escrito como

$$\frac{\partial \tilde{u}(x, p, t)}{\partial t} = (\hat{L} + \hat{M} + \hat{N}) \tilde{u}(x, p, t),$$

que é uma forma análoga à equação (3.35) e que simplifica bastante a visualização do sistema.

A vantagem de se observar o sistema dessa forma é que as equações

$$\frac{\partial \tilde{u}_L(x, p, t)}{\partial t} = \hat{L} \tilde{u}_L(x, p, t), \quad (3.40)$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_M(x, p, t)}{\partial t} = \hat{M} \tilde{u}_M(x, p, t), \quad (3.41)$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_N(x, p, t)}{\partial t} = \hat{N} \tilde{u}_N(x, p, t) \quad (3.42)$$

possuem soluções analíticas bem simples.

Resolveremos primeiramente a equação (3.41) devido à sua simplicidade em relação a (3.40).

Temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho_{11}(x, p, t) \\ \rho_{12}(x, p, t) \\ \rho_{21}(x, p, t) \\ \rho_{22}(x, p, t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 & i\Omega & -i\Omega & 0 \\ i\Omega & i\Theta(x) & 0 & -i\Omega \\ -i\Omega & 0 & -i\Theta(x) & i\Omega \\ 0 & -i\Omega & i\Omega & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11}(x, p, t) \\ \rho_{12}(x, p, t) \\ \rho_{21}(x, p, t) \\ \rho_{22}(x, p, t) \end{pmatrix} \Rightarrow \\ \Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial t} = i\Omega [\rho_{12}(x, p, t) - \rho_{21}(x, p, t)], \\ \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial t} = i\Omega [\rho_{11}(x, p, t) - \rho_{22}(x, p, t)] + i\Theta(x) \rho_{12}(x, p, t), \\ \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial t} = -i\Omega [\rho_{11}(x, p, t) - \rho_{22}(x, p, t)] - i\Theta(x) \rho_{21}(x, p, t), \\ \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial t} = -i\Omega [\rho_{12}(x, p, t) - \rho_{21}(x, p, t)], \end{cases} \quad (3.43) \end{aligned}$$

cuja solução é

$$\rho_{11}(x, p, t) = \rho_{11}(x, p, 0) - \frac{\Omega A}{\omega(x)} \sin[2\omega(x)t] + \frac{\Omega B}{\omega(x)} \{\cos[2\omega(x)t] - 1\}, \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned} \rho_{12}(x, p, t) &= \left(\operatorname{Re}[\rho_{12}(x, p, 0)] - \frac{\Theta(x)A}{2\omega(x)} \sin[2\omega(x)t] + \frac{\Theta(x)B}{2\omega(x)} \{\cos[2\omega(x)t] - 1\} \right) + \\ &+ i \{A \cos[2\omega(x)t] + B \sin[2\omega(x)t]\}, \quad (3.45) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_{21}(x, p, t) &= \left(\operatorname{Re}[\rho_{21}(x, p, 0)] - \frac{\Theta(x)A}{2\omega(x)} \sin[2\omega(x)t] + \frac{\Theta(x)B}{2\omega(x)} \{\cos[2\omega(x)t] - 1\} \right) - \\ &- i \{A \cos[2\omega(x)t] + B \sin[2\omega(x)t]\}, \quad (3.46) \end{aligned}$$

$$\rho_{22}(x, p, t) = \rho_{22}(x, p, 0) + \frac{\Omega A}{\omega(x)} \sin[2\omega(x)t] - \frac{\Omega B}{\omega(x)} \{\cos[2\omega(x)t] - 1\}, \quad (3.47)$$

sendo

$$\begin{cases} A = \operatorname{Im}[\rho_{12}(x, p, 0)], \\ B = \frac{1}{2\omega(x)} \{\Omega [\rho_{11}(x, p, 0) - \rho_{22}(x, p, 0)] + \Theta(x) \operatorname{Re}[\rho_{12}(x, p, 0)]\}, \\ \omega(x) = \sqrt{\frac{\Theta^2(x)}{4} + \Omega^2}. \end{cases}$$

É interessante notar que o sistema (3.43) é idêntico ao sistema de equações que seria obtido para a evolução temporal do valor médio do operador densidade de estado $\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ para um sistema quântico de dois níveis descrito pelo hamiltoniano

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega & \hbar\Theta(x) \end{pmatrix},$$

sendo que neste caso x não é um operador, mas um parâmetro. Assim sendo, o operador \hat{M} descreve a conexão entre os dois níveis quânticos do sistema, ou a evolução temporal da parte quântica da função de Wigner.

Quanto ao operador \hat{L} , temos de (3.40)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{u}(x, p, t)}{\partial t} &= \hat{L} \tilde{u}(x, p, t) \Rightarrow \\ \Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial t} = -\frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial x} + \frac{dV_1(x)}{dx} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial p} \\ \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial t} = -\frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \left[\frac{dV_1(x)}{dx} + \frac{dV_2(x)}{dx} \right] \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial p} \\ \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial t} = -\frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \left[\frac{dV_1(x)}{dx} + \frac{dV_2(x)}{dx} \right] \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial p} \\ \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial t} = -\frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial x} + \frac{dV_2(x)}{dx} \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial p} \end{cases}, \end{aligned} \quad (3.48)$$

ou

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial x} - \left[\frac{dV_1(x)}{dx} \right] \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial p} = 0 \\ \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{1}{2} \left[\frac{dV_1(x)}{dx} + \frac{dV_2(x)}{dx} \right] \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial p} = 0 \\ \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{1}{2} \left[\frac{dV_1(x)}{dx} + \frac{dV_2(x)}{dx} \right] \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial p} = 0 \\ \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial x} - \left[\frac{dV_2(x)}{dx} \right] \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial p} = 0 \end{cases}.$$

De uma forma geral, cada uma das equações do sistema (3.48) pode ser escrita na

forma

$$\frac{\partial \phi(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \phi(x, p, t)}{\partial x} + F(x) \frac{\partial \phi(x, p, t)}{\partial p} = 0$$

que é a equação de Liouville.

A equação de Liouville descreve como se dá o fluxo de informações no espaço de fase (x, p) . Segundo a mesma, a informação (ou valor da função) de cada um dos pontos do

espaço de fase viaja através deste seguindo trajetórias clássicas. Para tanto, consideramos que a informação que se encontra no ponto (x, p) no instante t chegará até o mesmo através de uma trajetória clássica,

$$(x, p) \equiv (x_{cl}(t), p_{cl}(t)),$$

$$\begin{cases} x_{cl}(t) = x_{cl}(t_0) + \frac{1}{m} \int_{t_0}^t p_{cl}(t') dt', \\ p_{cl}(t) = p_{cl}(t_0) + \int_{t_0}^t F(x_{cl}(t')) dt'. \end{cases}$$

Desta forma é fácil conhecer o valor da função para cada ponto do espaço de fase em cada instante de tempo, desde que conheçamos o valor da mesma em cada ponto no instante inicial:

$$\phi(x, p, t) \equiv \phi(x_{cl}(t), p_{cl}(t), t) = \phi(x_{cl}(0), p_{cl}(0), 0) = cte. \quad (3.49)$$

Temos assim que o operador \hat{L} descreve a evolução clássica do sistema.

Quanto à equação (3.42), a mais simples de todas

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial t} = \Gamma \rho_{22}(x, p, t), \\ \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial t} = -\frac{\Gamma}{2} \rho_{12}(x, p, t), \\ \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial t} = -\frac{\Gamma}{2} \rho_{21}(x, p, t), \\ \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial t} = -\Gamma \rho_{22}(x, p, t), \end{cases} \quad (3.50)$$

tem como solução

$$\begin{cases} \rho_{11}(x, p, t) = \rho_{11}(x, p, 0) + [1 - \exp(-\Gamma t)] \rho_{22}(x, p, 0), \\ \rho_{12}(x, p, t) = \exp\left(-\frac{\Gamma t}{2}\right) \rho_{12}(x, p, 0), \\ \rho_{21}(x, p, t) = \exp\left(-\frac{\Gamma t}{2}\right) \rho_{21}(x, p, 0), \\ \rho_{22}(x, p, t) = \exp(-\Gamma t) \rho_{22}(x, p, 0), \end{cases} \quad (3.51)$$

Como podemos ver, através do método do operador partido, podemos separar a equação que descreve a evolução temporal das componentes da função de Wigner em duas partes, uma clássica e outra quântica, cujas soluções são analíticas e bem simples. Será possível, assim obtermos o valor de cada componente da função (equações de (3.36) a (3.39)) para todo o espaço de fase em cada instante de tempo se evoluirmos alternadamente a parte

clássica e a parte quântica do sistema através das soluções analíticas das funções (3.40), (3.41) e (3.42).

3.1.2 Considerações para a obtenção do algoritmo

Tendo em mãos um método para solucionarmos as equações das componentes das funções de Wigner, devemos agora criar um algoritmo para o cálculo numérico das mesmas. Antes de criarmos tal algoritmo é necessário definirmos uma malha de pontos no espaço de fase (x, p) . Neste procedimento devemos ter o cuidado de escolhermos um número de pontos capaz de descrever a função de Wigner do sistema como uma superfície suave, mas que não seja demasiadamente grande de modo a tornar demorado ou inviável o cálculo. Esta escolha depende da capacidade de memória do computador que será utilizado para efetuar os cálculos. O domínio e o número de pontos da malha serão determinados mais adiante.

Utilizaremos uma malha retangular que será determinada pelos valores inicial e final de x , pelos valores inicial e final de p e pelos valores N_x e N_p que determinam o número de divisões que cada uma das coordenadas sofrerá, respectivamente. Quanto ao tempo e ao tamanho do passo a ser adotado, estes serão determinados pelos instantes t_i e t_f e pelo número de divisões N_t que este intervalo sofrerá. Assim, dados os valores x_i e x_f (valores limites de x) e os valores p_i e p_f (valores limites de p), t_i e t_f (valores limites de t) e os valores N_x , N_p e N_t determinamos,

$$\begin{aligned}\Delta x &= \frac{x_f - x_i}{N_x}, \\ \Delta p &= \frac{p_f - p_i}{N_p}, \\ \Delta t &= \frac{t_f - t_i}{N_t}.\end{aligned}$$

Cada ponto da malha, denotaremos por

$$P_{jk} = (x_j, p_k),$$

sendo

$$\begin{cases} x_j = x_i + \left(j - \frac{1}{2}\right) \Delta x, \\ p_k = p_i + \left(k - \frac{1}{2}\right) \Delta p, \\ j = 1, 2, 3, \dots, N_x, \\ k = 1, 2, 3, \dots, N_p. \end{cases}$$

Quanto ao tempo fazemos

$$t_n = t_i + n\Delta t,$$

com

$$n = 0, 2, 3, \dots, N_t.$$

Como valores iniciais das funções de onda, para calcularmos o valor inicial da função de Wigner, podemos supor

$$\begin{cases} \psi_1(x, 0) = \left(\frac{1}{\sigma^2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} + \frac{ip_0x}{\hbar}\right], \\ \psi_2(x, 0) = 0, \end{cases}$$

sendo que $\psi_1(x, 0)$ representa a função de onda do estado fundamental e $\psi_2(x, 0)$ representa a função de onda do estado excitado. A preferência por esta função como função inicial advém do fato dela descrever uma partícula que encontra-se inicialmente distribuída em torno do ponto x_0 e com distribuição de momento em torno de p_0 , além disso, estas funções descrevem uma partícula que se encontra totalmente no estado fundamental. Calculando as componentes iniciais da função de Wigner através das funções acima, temos

$$\rho_{11}(x, p, 0) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2} - \frac{\sigma^2(p-p_0)^2}{\hbar^2}\right],$$

$$\rho_{12}(x, p, 0) = \rho_{21}(x, p, 0) = \rho_{22}(x, p, 0) = 0.$$

Definidos os pontos da malha e o valor inicial das funções $\rho_{\mu\nu}(x, p, 0)$ o primeiro passo no cálculo é a evolução temporal dessas funções através do operador \hat{M} , ou seja, evoluir somente levando em consideração a parte quântica sem o decaimento, conforme (3.41). Para tal, utilizamos as funções de (3.44) a (3.47). Esta etapa é um tanto simples, uma vez que estas equações utilizam apenas valores das funções $\rho_{mn}(x, p, 0)$ localizados sobre a malha de pontos. Desta maneira, basta determinarmos $\rho_{mn}(x_j, p_k, 0)$ e substituí-los em (3.44), (3.45), (3.46) e (3.47) e evoluirmos um passo de tempo Δt . Procedendo desta forma obteremos toda uma nova distribuição para os valores de ρ_{mn} , à qual chamaremos $\rho_{mn}^{\hat{M}}(x_j, p_k, \Delta t)$. O sobrescrito \hat{M} indica que a função foi evoluída somente com este operador. Estes novos valores serão utilizados como valores iniciais para a evolução com o operador \hat{L} :

$$\rho_{mn}^{\hat{M}}(x_j, p_k, \Delta t) \rightarrow \rho_{mn}(x_j, p_k, 0).$$

Esta substituição indica apenas que $\rho_{mn}^{\hat{M}}$ servirá como valor inicial para nossa próxima evolução.

Segundo o resultado (3.49), dado $\rho_{mn}(x_j, p_k, 0)$, o valor de $\rho_{mn}(x_j, p_k, \Delta t)$ será obtido supondo que o sistema tenha chegado ao ponto (x_j, p_k) através de uma trajetória clássica no espaço de fase:

$$\rho_{mn}(x_j, p_k, \Delta t) = \rho_{mn}(\bar{x}_j(\Delta t), \bar{p}_k(\Delta t), \Delta t) = \rho_{mn}(\bar{x}_j(0), \bar{p}_k(0), 0).$$

Para encontrarmos $\bar{x}_j(0)$ e $\bar{p}_k(0)$ basta regredirmos $\bar{x}_j(\Delta t)$ e $\bar{p}_k(\Delta t)$ através das equações

$$\begin{cases} \frac{d\bar{x}_j(t)}{dt} = \frac{\bar{p}_k(t)}{\mu}, \\ \frac{d\bar{p}_k(t)}{dt} = -\frac{1}{2} [V'_\mu(\bar{x}_j(t)) + V'_\nu(\bar{x}_j(t))]. \end{cases}$$

Os pontos $\bar{x}_j(0)$ e $\bar{p}_k(0)$ não necessariamente são pontos pertencentes à malha, sendo os índices j e k apenas uma referência para que se saiba a qual ponto (x_j, p_k) da malha $\bar{x}_j(0)$ e $\bar{p}_k(0)$ estão relacionados. A regressão é feita com o método de Runge-Kutta[10] de quarta ordem .

Uma vez definido o ponto $(\bar{x}_j(0), \bar{p}_k(0))$, devemos verificar qual o valor de ρ_{mn} neste ponto no instante inicial. Já que, como dissemos, não necessariamente este ponto coincidirá com algum ponto da malha, deveremos fazer uma interpolação para sabermos qual o valor de $\rho_{mn}(\bar{x}_j(0), \bar{p}_k(0), 0)$. Supondo que

$$x_n \leq \bar{x}_j(0) \leq x_{n+1},$$

$$p_m \leq \bar{p}_k(0) \leq p_{m+1},$$

sendo $x_n, x_{n+1}, p_m, p_{m+1}$ coordenadas de pontos que pertençam à malha, temos que o valor aproximado de $\rho_{mn}(\bar{x}_j(0), \bar{p}_k(0), 0)$ será dado por

$$\begin{aligned} \rho_{mn}(\bar{x}_j(0), \bar{p}_k(0), 0) \approx & \rho_{mn}(x_n, p_m, 0) + \\ & \frac{(\bar{x}_j(0) - x_n)}{(x_{n+1} - x_n)} [\rho_{mn}(x_{n+1}, p_m, 0) - \rho_{mn}(x_n, p_m, 0)] + \\ & \frac{(\bar{p}_k(0) - p_m)}{(p_{m+1} - p_m)} [\rho_{mn}(x_n, p_m, 0) - \rho_{mn}(x_n, p_{m+1}, 0)] + \\ & \frac{(\bar{x}_j(0) - x_n)(\bar{p}_k(0) - p_m)}{(x_{n+1} - x_n)(p_{m+1} - p_m)} [\rho_{mn}(x_{n+1}, p_{m+1}, 0) - \\ & \rho_{mn}(x_n, p_{m+1}, 0) - \rho_{mn}(x_{n+1}, p_m, 0) + \rho_{mn}(x_n, p_m, 0)] \end{aligned}$$

Assim, dado o valor de $\rho_{mn}(\bar{x}_j(0), \bar{p}_k(0), 0)$ basta substituir este valor em $\rho_{mn}(x_j, p_k, \Delta t)$ que denotaremos por $\rho_{mn}^{\hat{L}\hat{M}}(x_j, p_k, \Delta t)$ e utilizá-lo como condição inicial para o próximo passo

$$\rho_{mn}^{\hat{L}\hat{M}}(x_j, p_k, \Delta t) \rightarrow \rho_{mn}^{\hat{L}\hat{M}}(x_j, p_k, 0).$$

O próximo passo é a evolução com o operador \hat{N} . Assim como em \hat{M} , neste passo da evolução somente utilizaremos valores das funções $\rho_{mn}(x_j, p_k, 0)$ localizados sobre a malha. Através das equações (3.51) temos

$$\begin{cases} \rho_{11}(x_j, p_k, \Delta t) = \rho_{11}(x_j, p_k, 0) + [1 - \exp(-\Gamma\Delta t)] \rho_{22}(x_j, p_k, 0), \\ \rho_{12}(x_j, p_k, \Delta t) = \exp\left(-\frac{\Gamma\Delta t}{2}\right) \rho_{12}(x_j, p_k, 0), \\ \rho_{21}(x_j, p_k, \Delta t) = \exp\left(-\frac{\Gamma\Delta t}{2}\right) \rho_{21}(x_j, p_k, 0), \\ \rho_{22}(x_j, p_k, \Delta t) = \exp(-\Gamma\Delta t) \rho_{22}(x_j, p_k, 0). \end{cases}$$

Ao final desse passo fazemos $\rho_{mn}^{\hat{N}\hat{L}\hat{M}}(x_j, p_k, \Delta t) \rightarrow \rho_{mn}(x_j, p_k, 0)$ e então repetimos o processo sucessivamente N_t vezes para calcular $\rho_{mn}\left(x_j, p_k, \underbrace{N_t\Delta t}_{t_f}\right)$.

3.1.3 O algoritmo

Colocadas todas as considerações a respeito das precauções sobre o algoritmo vamos agora escrever em seqüência cada um dos passos do mesmo:

- Determinar os valores dos parâmetros de determinação dos passos: N_x, N_p, N_t ;
- Determinar os valores dos dados físicos: $x_0, p_0, \sigma, \hbar, \Delta$ e Ω ;
- Determinar os valores dos limites espaciais e temporais: $x_i, x_f; p_i, p_f; t_i, t_f$;
- Calcular o valor dos passos de coordenadas e temporal: $\Delta x = \frac{x_f - x_i}{N_x}$; $\Delta p = \frac{p_f - p_i}{N_p}$;
 $\Delta t = \frac{t_f - t_i}{N_t}$;
- Determinação da malha: $x_i + (j - \frac{1}{2}) \Delta x$; $p_k = p_i + (k - \frac{1}{2}) \Delta p$;
- Determinação do valor inicial das funções $\rho_{\mu\nu}(x, p, 0)$;
- Repetir os passos de (*) até (**), 8, 9, 10, 11 e 12 N_t vezes;

- (*)Evolução de $\rho_{mn}(x, p, 0)$ através do operador \hat{M} (evolução quântica):

$$\rho_{mn}(x, p, 0) \xrightarrow{\hat{M}} \rho_{mn}(x, p, \Delta t);$$

- Substituição do valor de $\rho_{mn}(x, p, \Delta t)$ como condição inicial:

$$\rho_{mn}(x, p, 0) \leftarrow \rho_{mn}(x, p, \Delta t);$$

- Evolução de $\rho_{mn}(x, p, 0)$ através do operador \hat{L} (evolução clássica):

$$\rho_{mn}(x, p, 0) \xrightarrow{\hat{L}} \rho_{mn}(x, p, \Delta t);$$

Substituição do valor de $\rho_{mn}(x, p, \Delta t)$ como condição inicial:

$$\rho_{mn}(x, p, 0) \leftarrow \rho_{mn}(x, p, \Delta t);$$

- Evolução de $\rho_{mn}(x, p, 0)$ através do operador \hat{N} (evolução clássica):

$$\rho_{mn}(x, p, 0) \xrightarrow{\hat{N}} \rho_{mn}(x, p, \Delta t);$$

- Substituição do valor de $\rho_{mn}(x, p, \Delta t)$ como condição inicial:

$$\rho_{mn}(x, p, 0) \leftarrow \rho_{mn}(x, p, \Delta t);$$

- (**)Voltar ao passo (*);
- Escrever $\rho_{mn}(x, p, 0)$ nos arquivos de saída.

Ao final do passo 14 estará armazenado em $\rho_{mn}(x, p, 0)$ o valor de $\rho_{mn}(x, p, t_f)$. A saída de dados é feita de maneira a obtermos também valores intermediários de ρ_{mn} , por exemplo, a cada $n\Delta t$ transcorridos. Desta maneira, podemos acompanhar a evolução de ρ_{mn} durante todo o processo colisional.

Capítulo 4: Comparação dos resultados

Neste capítulo faremos a comparação entre os resultados numéricos obtidos através do *método do operador partido com trajetórias* e resultados esperados pela teoria de Landau-Zener para regiões de cruzamento entre potenciais, pela aproximação por meio de expansão em série perturbativa também para cruzamento entre potenciais e pela solução analítica obtida para o caso de dois potenciais constantes.

4.1 O erro do *método do operador partido com trajetórias*

Conforme foi mostrado no capítulo anterior, o erro do *método do operador partido com trajetórias* para um operador que pode ser dividido em três partes (\hat{L} , \hat{M} e \hat{N}) é dado por

$$E(\Delta t) \sim \frac{(\Delta t)^2}{2} \left([\hat{L}, \hat{M}] + [\hat{L}, \hat{N}] + [\hat{M}, \hat{N}] \right) f(\mathbf{x}, t_0) + \dots \quad (4.52)$$

No caso de um sistema de dois níveis com decaimento temos

$$\hat{L} = -\hat{U} + \hat{V},$$

sendo

$$\hat{U} = \frac{p}{\mu} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} V_1'(x) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}[V_1'(x) + V_2'(x)] & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}[V_1'(x) + V_2'(x)] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_2'(x) \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial p},$$

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} 0 & i\Omega & -i\Omega & 0 \\ i\Omega & i\Theta(x) & 0 & -i\Omega \\ -i\Omega & 0 & -i\Theta(x) & i\Omega \\ 0 & -i\Omega & i\Omega & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \Gamma \\ 0 & -\frac{\Gamma}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\Gamma}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Gamma \end{pmatrix}.$$

De acordo com (4.52), para este caso temos

$$\hat{E}(x, p, t, \Delta t) = \frac{(\Delta t)^2}{4} \left\{ \hbar\Theta'(x) \begin{pmatrix} i\Omega \left[\frac{\partial \rho_{12}(x,p,t)}{\partial p} - \frac{\partial \rho_{21}(x,p,t)}{\partial p} \right] + \Gamma \frac{\partial \rho_{22}(x,p,t)}{\partial p} \\ -i\Omega \left[\frac{\partial \rho_{11}(x,p,t)}{\partial p} + \frac{\partial \rho_{22}(x,p,t)}{\partial p} \right] \\ i\Omega \left[\frac{\partial \rho_{11}(x,p,t)}{\partial p} + \frac{\partial \rho_{22}(x,p,t)}{\partial p} \right] \\ i\Omega \left[\frac{\partial \rho_{12}(x,p,t)}{\partial p} - \frac{\partial \rho_{21}(x,p,t)}{\partial p} \right] \end{pmatrix} - \right.$$

$$\left. i\Gamma\Omega \begin{pmatrix} \rho_{12}(x,p,t) - \rho_{21}(x,p,t) \\ \rho_{11}(xp,t) + 3\rho_{22}(x,p,t) \\ -[\rho_{11}(xp,t) + 3\rho_{22}(x,p,t)] \\ -[\rho_{12}(x,p,t) - \rho_{21}(x,p,t)] \end{pmatrix} \right\}. \quad (4.53)$$

4.2 Sistema de unidades

Todos os resultados foram obtidos considerando um sistema de unidades onde

$$\begin{cases} |\hbar| = 1 \\ |\lambda_T| = 2 \end{cases} \quad (4.54)$$

sendo λ_T o comprimento de onda térmico de de Broglie

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi MK_B T}}.$$

Utilizando a massa reduzida de dois átomos de césio, ou seja $1.103474204 \times 10^{-25}$

kg , a uma temperatura de $300 \mu K$, teremos um novo sistema de unidades onde

$$\begin{cases} x_u = 6.182325380 \times 10^{-9} m, \\ \mu_u = 2.759133987 \times 10^{-27} kg, \\ t_u = 10^{-9} s, \\ p_u = \mu_u \frac{x_u}{t_u} \end{cases}$$

É interessante utilizarmos 1 *ns* como unidade de tempo, pois o tempo de colisão entre os dois átomos é da ordem de 100 *ns*.

Devido à condição (4.54), definindo

$$\begin{aligned} \frac{p_0^2}{2\mu} &= k_B T \Rightarrow \\ \Rightarrow p_0 &= \sqrt{2\mu k_B T} \end{aligned}$$

no sistema internacional, então, no novo sistema:

$$|p_0| = \sqrt{\pi} p_u$$

4.3 Potenciais constantes

Inicialmente trataremos o caso de potenciais constantes, por serem mais simples e por possuírem solução analítica. Vejamos inicialmente o caso em que

$$\begin{cases} V_1(x) = 0, \\ V_2(x) = \Delta, \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Theta(x) = \Delta.$$

Substituindo estes potenciais nas equações das componentes da função matricial de

Wigner temos

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho_{11}(x,p,t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{11}(x,p,t)}{\partial x} = i\Omega [\rho_{12}(x,p,t) - \rho_{21}(x,p,t)] + \Gamma \rho_{22}(x,p,t), \\ \frac{\partial \rho_{12}(x,p,t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{12}(x,p,t)}{\partial x} = i\Omega [\rho_{11}(x,p,t) - \rho_{22}(x,p,t)] + i \left(\Delta - \frac{\Gamma}{2} \right) \rho_{12}(x,p,t), \\ \frac{\partial \rho_{21}(x,p,t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{21}(x,p,t)}{\partial x} = -i\Omega [\rho_{11}(x,p,t) - \rho_{22}(x,p,t)] - i \left(\Delta + \frac{\Gamma}{2} \right) \rho_{21}(x,p,t), \\ \frac{\partial \rho_{22}(x,p,t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{22}(x,p,t)}{\partial x} = -i\Omega [\rho_{12}(x,p,t) - \rho_{21}(x,p,t)] - \Gamma \rho_{22}(x,p,t). \end{cases} \quad (4.55)$$

Vejamos inicialmente o caso em que $\Omega = 0$ e $\Gamma = 0$. Teremos

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho_{11}(x,p,t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{11}(x,p,t)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho_{12}(x,p,t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{12}(x,p,t)}{\partial x} = i\Delta \rho_{12}(x,p,t), \\ \frac{\partial \rho_{21}(x,p,t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{21}(x,p,t)}{\partial x} = -i\Delta \rho_{21}(x,p,t), \\ \frac{\partial \rho_{22}(x,p,t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{22}(x,p,t)}{\partial x} = 0, \end{cases}$$

cujas soluções são

$$\begin{aligned} \rho_{11}(x,p,t) &= \phi_{11}\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right), \\ \rho_{12}(x,p,t) &= e^{i\Delta t} \phi_{12}\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right), \\ \rho_{21}(x,p,t) &= e^{-i\Delta t} \phi_{21}\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right), \\ \rho_{22}(x,p,t) &= \phi_{22}\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right). \end{aligned}$$

Escolhamos um estado inicial

$$\tilde{\psi}(0) = \begin{pmatrix} \psi_1(x,0) \\ \psi_2(x,0) \end{pmatrix},$$

tal que

$$\begin{cases} \psi_1(x,0) = \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2} - i\sqrt{\pi}x\right], \\ \psi_2(x,0) = 0. \end{cases} \quad (4.56)$$

Estas funções descrevem uma partícula inicialmente no estado fundamental, distribuída em torno de $x = x_0$ e $p = \sqrt{\pi}$. As componentes da função de Wigner matricial serão

$$\begin{cases} \rho_{11}(x,p,t) = \frac{1}{\pi} \exp\left\{-\left[\left(x - \frac{pt}{\mu}\right) - x_0\right]^2 - (p + \sqrt{\pi})^2\right\}, \\ \rho_{12}(x,p,t) = \rho_{21}(x,p,t) = \rho_{22}(x,p,t) = 0. \end{cases}$$

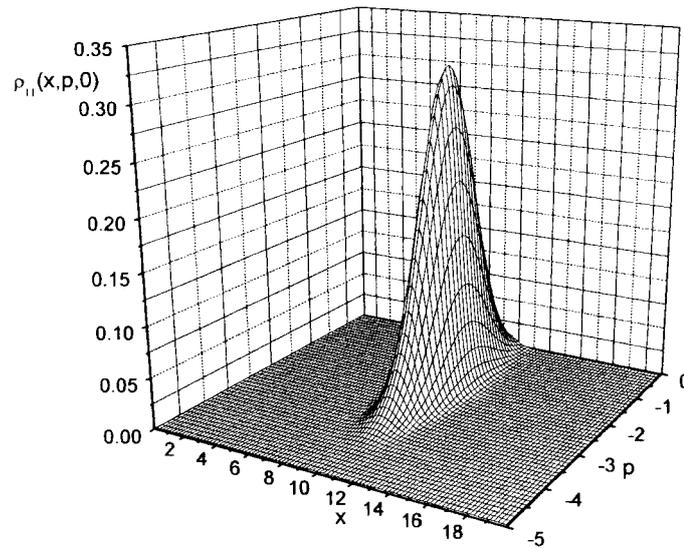
A condição inicial (4.56) será utilizada de agora em diante para todos os casos e apenas x_0 terá seu valor modificado, salvo em alguns casos especiais. Inicialmente faremos $x_0 = 10$

x_u .

A condição inicial para este caso é

$$\rho_{11}(x, p, 0) = \frac{1}{\pi} \exp \left[- (x - 10)^2 - (p + \sqrt{\pi})^2 \right]. \quad (4.57)$$

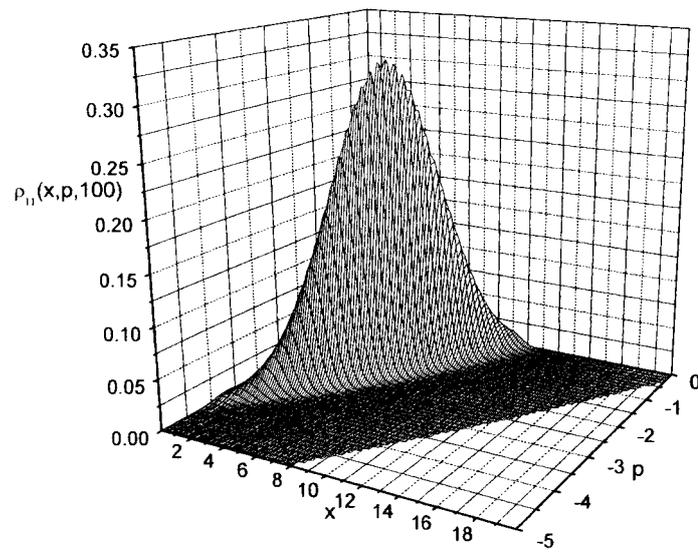
A superfície desta função pode ser vista na figura (1)



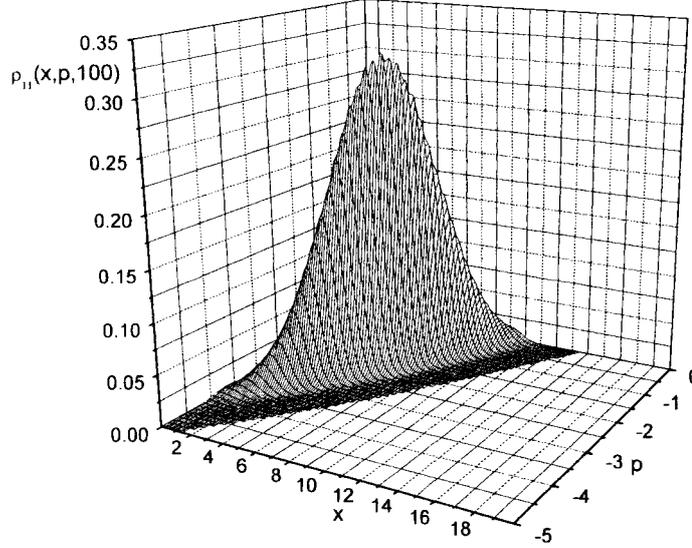
1. Gaussiana utilizada como condição inicial para a componente da função de Wigner matricial.

O gráfico da função $\rho_{11}(x, p, t)$, com $x_0 = 10 x_u$, no tempo $t = 100 t_u$ é mostrado na figura (2).

Propagando numericamente a condição inicial de $\rho(x, p, t)$ desde $t = 0$ até $t = 100 t_u$. Podemos ver que os dados gerados pelo programa são muito exatos neste caso. Estes dados encontram-se na figura (3).



2. Resultado analítico da componente $\rho_{11}(x, p, t)$ para $t = 100 t_u$.



3. Resultados obtidos através de cálculo numérico utilizando o método do operador desde o tempo $t = 0$ até $t = 100 t_u$ partido com a condição inicial $\rho_{11}(x, p, 0) = \frac{1}{\pi} \exp [-(x - x_0)^2 - (p + \sqrt{\pi})]$.

O próximo caso a ser tratado será aquele em que

$$\begin{cases} \Omega \neq 0, \\ \Gamma = 0. \end{cases}$$

Antes de prosseguirmos é interessante destacar que se substituirmos os potenciais chatos na função de Wigner sem aproximações de qualquer ordem de \hbar , ou seja, na forma

$$\frac{\partial \rho_{mn}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{mn}(x, p, t)}{\partial x} = \int dp' J_{mn}(x, p - p') \rho_{mn}(x, p', t) + \quad (4.58)$$

$$+ i\Omega [\rho_{m,3-n}(x, p, t) - \rho_{3-m,n}(x, p, t)],$$

sendo

$$J_{mn}(x, p) = \frac{1}{(i\hbar)\pi\hbar} \int du [V_m(x+u) - V_n(x-u)] \exp \left[-\frac{2ipu}{\hbar} \right],$$

teremos

$$J_{mn}(x, p) = -i(m - n) \Delta \delta(p).$$

Este resultado, quando substituído em (4.58), nos conduz ao conjunto de equações (4.55) com $\Gamma = 0$. Portanto, os resultados analíticos que serão mostrados a seguir para potenciais chatos, bem como o resultado mostrado anteriormente para $\Omega = 0$, tratam-se de soluções exatas e não de aproximações semi-analíticas. De volta ao nosso caso temos

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial x} = i\Omega [\rho_{12}(x, p, t) - \rho_{21}(x, p, t)], \\ \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial x} = i\Omega [\rho_{11}(x, p, t) - \rho_{22}(x, p, t)] + i\Delta \rho_{12}(x, p, t), \\ \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial x} = -i\Omega [\rho_{11}(x, p, t) - \rho_{22}(x, p, t)] - i\Delta \rho_{21}(x, p, t), \\ \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial x} = -i\Omega [\rho_{12}(x, p, t) - \rho_{21}(x, p, t)], \end{cases}$$

cuja solução é, para o caso em que

$$\begin{cases} \rho_{11}(x, p, 0) = f_{11}(x, p) = \frac{1}{\pi} \exp \left[- (x - x_0)^2 - (p + \sqrt{\pi})^2 \right], \\ \rho_{12}(x, p, 0) = \rho_{21}(x, p, 0) = \rho_{22}(x, p, 0), \end{cases}$$

$$\begin{cases} \rho_{11}(x, p, t) = f_{11} \left(x - \frac{pt}{\mu}, p \right) \left\{ 1 + \frac{\Omega^2}{2\omega^2} [\cos(2\omega t) - 1] \right\}, \\ \rho_{12}(x, p, t) = f_{11} \left(x - \frac{pt}{\mu}, p \right) \left\{ \frac{\Delta\Omega}{4\omega^2} [\cos(2\omega t) - 1] + i \frac{\Omega}{2\omega} \sin(2\omega t) \right\}, \\ \rho_{21}(x, p, t) = f_{11} \left(x - \frac{pt}{\mu}, p \right) \left\{ \frac{\Delta\Omega}{4\omega^2} [\cos(2\omega t) - 1] - i \frac{\Omega}{2\omega} \sin(2\omega t) \right\}, \\ \rho_{22}(x, p, t) = f_{11} \left(x - \frac{pt}{\mu}, p \right) \left\{ -\frac{\Omega^2}{2\omega^2} [\cos(2\omega t) - 1] \right\}, \end{cases}$$

$$\omega = \sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \Omega^2}.$$

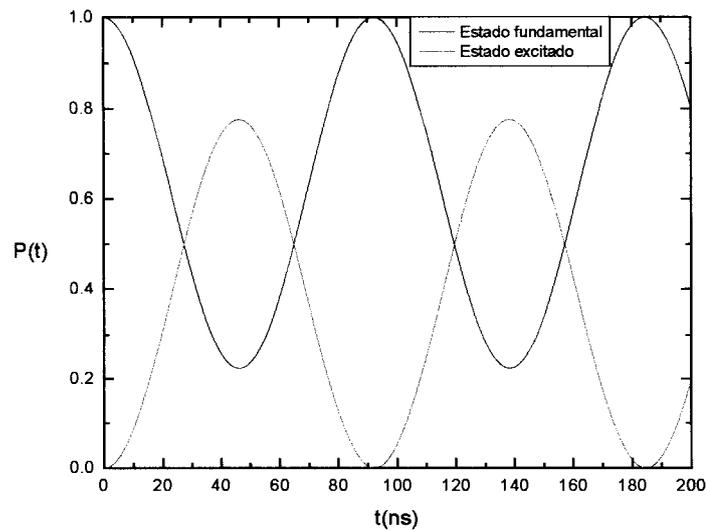
Examinaremos neste caso a dinâmica das populações dos estados fundamental e excitado. Segundo a própria formulação de Wigner,

$$\begin{cases} P_1(t) = \int dx \int dp \rho_{11}(x, p, t), \\ P_2(t) = \int dx \int dp \rho_{22}(x, p, t), \end{cases}$$

sendo $P_1(t)$ e $P_2(t)$ as populações totais dos estados fundamental e excitado no tempo t .

Para este caso teremos

$$\begin{cases} P_1(t) = 1 + \frac{\Omega^2}{2\omega^2} [\cos(2\omega t) - 1], \\ P_2(t) = -\frac{\Omega^2}{2\omega^2} [\cos(2\omega t) - 1], \end{cases} \quad (4.59)$$



4. População de cada um dos estados para potenciais chatos.

com ω dado acima.

Fazendo

$$\begin{cases} \Delta = 3.00 \times 10^{-2}, \\ \Omega = 3.00 \times 10^{-2}, \end{cases}$$

e construindo os gráficos de (4.59) para estes casos, e paralelamente calculando as populações destes estados através do programa computacional, obtemos o resultado mostrado no gráfico da Figura(4), que é exatamente o gráfico das funções (4.59). Estes valores de Δ e Ω são fictícios, servindo apenas para testar a validade do método. Como vemos neste caso a solução numérica concorda satisfatoriamente com o resultado analítico.

4.4 Potencial linear e a solução por meio de série perturbativa

Uma forma de encontrar uma aproximação semi-analítica para as componentes da função de Wigner é a expansão em série perturbativa. Todo o desenvolvimento desta série encontra-se no Apêndice C.

Examinando um caso simples, do tipo proposto na Equação (4.56), em que o sistema encontra-se inicialmente no estado fundamental, a componente $\rho_{22}(x, p, t)$ da função de Wigner, referente à população do estado excitado, para potenciais do tipo

$$\begin{cases} V_1(x) = 0, \\ V_2(x) = ax + b, \end{cases}$$

tem seu valor aproximado dado por

$$\begin{aligned} \rho_{22}(x, p, t) \approx & 2\Omega^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \exp \left[-\Gamma(t-t') - \frac{\Gamma}{2}(t'-t'') \right] \times \\ & \times \cos \left(a \left\{ \frac{p}{2\mu} \left[(t-t'')^2 - (t-t')^2 \right] + \frac{a}{6\mu} \left[(t-t'')^3 - \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. (t-t')^3 - \frac{1}{2}(t'-t'')^3 \right] \right\} - (ax+b)(t'-t'') \right) \times \\ & \times f_{11} \left(x - \frac{pt}{\mu} - \frac{a}{2\mu} \left[(t^2 - t'^2) + \frac{1}{2}(t'^2 - t''^2) \right], p + a \left[(t-t') + \frac{1}{2}(t'-t'') \right] \right) + \mathcal{O}(\Omega^4). \end{aligned} \quad (4.60)$$

Para termos uma idéia da região de validade desta aproximação, podemos comparar seus resultados para potenciais chatos com a solução analítica dada acima. Para tanto, façamos em $V_2(x)$ $a = 0$, $b = \Delta$ e $\Gamma = 0$. Neste caso a equação acima nos dará

$$\rho_{22}(x, p, t) \approx 2 \left(\frac{\Omega}{\Delta} \right)^2 f_{11} \left(x - \frac{pt}{\mu}, p \right) [1 - \cos(\Delta t)]. \quad (4.61)$$

A solução exata para este caso é

$$\rho_{22}(x, p, t) = \frac{2\Omega^2}{\Delta^2 + 4\Omega^2} f_{11} \left(x - \frac{pt}{\mu}, p \right) \left[1 - \cos \left(\sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2} t \right) \right],$$

que expandida em série de potências de Ω e tendo os termos de ordem maior desprezados nos dá exatamente o resultado anterior.

Neste caso, o erro percentual é dado pela expressão

$$E(\Delta, \Omega, t) = \left| 1 - \left[1 + \frac{2\Omega^2}{\Delta^2} \right] \frac{[1 - \cos(\Delta t)]}{[1 - \cos(\sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2 t})]} \right|.$$

É interessante tomarmos o limite quando Δ tende a zero, pois na região em torno do cruzamento o potencial excitado é próximo ou igual a zero e desta maneira tal limite nos fornece o erro esperado, em função de Ω e do tempo t decorrido, para a função de Wigner em torno do ponto de Condon:

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} E(\Delta, \Omega, t) = \left| 1 - \frac{2\Omega^2 t^2}{1 - \cos(2\Omega t)} \right|.$$

De posse desta expressão podemos ver que o erro dado pela (4.60) será menor que 10% se $t < \frac{0.5322}{\Omega}$.

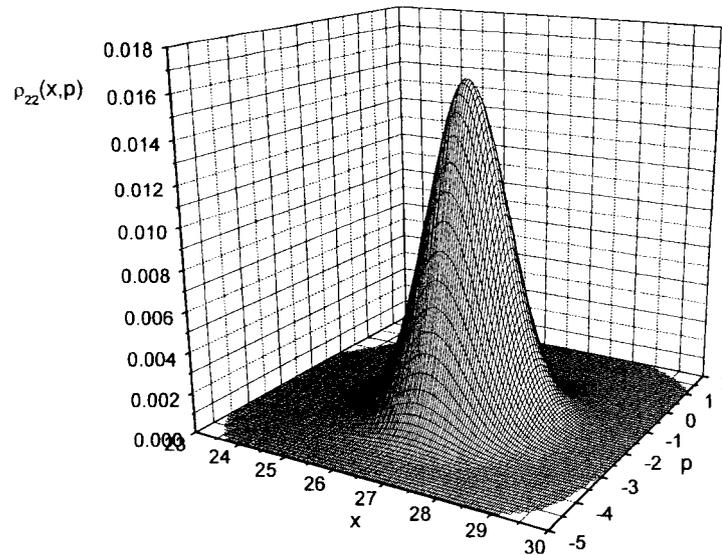
Utilizaremos a equação (4.60) para verificarmos a validade do operador partido com trajetórias para potenciais lineares. Escolheremos como condições para tal teste uma gaussiana que descreve um sistema com

$$\begin{cases} \mu = 39.9935, \\ \Omega = 0.0483, \\ \Gamma = 0.0430, \end{cases}$$

$$\begin{cases} V_1(x) = 0, \\ V_2(x) = -9.6698 \times 10^{-2} + 3.8116 \times 10^{-3}x. \end{cases}$$

Estes dados correspondem, no sistema aqui adotado, aos dados de um par de átomos de césio na região próxima ao cruzamento entre as duas curvas potencial. Segundo o critério de validade de (4.60), nestas condições a mesma somente poderá ser evoluída para tempos não maiores que dez unidades de tempo neste novo sistema. Os resultados podem ser vistos

nas figuras (5) e (6). Como podemos ver na figura (6), que é a superfície correspondente à

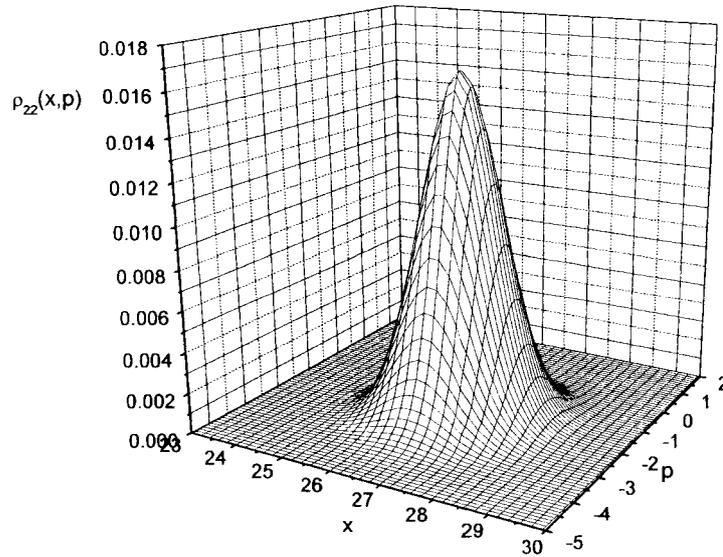


5. Evolução da função de Wigner matricial para potenciais lineares pelo método do operador partido.

solução de (4.60), a altura do pico central é ligeiramente maior que a altura do pico central da figura (5). Isto se deve ao fato de estarmos tratando a equação (4.60) no seu limite de validade, porém os resultados ainda são concordantes neste caso, atestando a validade do método para potenciais lineares.

4.5 A teoria de Landau-Zener

Conforme a teoria de Landau-Zener, quando um átomo de massa μ e momento $p_0 = \sqrt{\pi}$, sujeito a um potencial $V_1(x)$, passa por um ponto x_c (ou ponto de Condon) de cruzamento



6. Evolução da solução semi-analítica da função de Wigner obtida pela expansão em série perturbativa de potências de Ω .

entre este potencial e outro potencial $V_2(x)$, a probabilidade de que este, após passar pelo cruzamento, ainda se encontre sujeito ao potencial $V_1(x)$ é dada por

$$P(1)_{1 \rightarrow 1} = \exp \left[-\frac{2\sqrt{\pi}\mu\Omega^2}{|V_2'(x_c) - V_1'(x_c)|} \right], \quad (4.62)$$

e a probabilidade de que ele, após passar pelo cruzamento, se encontre sujeito ao potencial $V_2(x)$ é dada por

$$P(1)_{1 \rightarrow 2} = 1 - \exp \left[-\frac{2\sqrt{\pi}\mu\Omega^2}{|V_2'(x_c) - V_1'(x_c)|} \right], \quad (4.63)$$

sendo Ω a frequência de Rabi de acoplamento entre os dois estados.

De forma semelhante, se o átomo inicialmente se encontrava sujeito ao potencial $V_2(x)$, ao passar pelo cruzamento, a probabilidade de o encontrarmos sujeito ao potencial $V_1(x)$ é

$$P(1)_{2 \rightarrow 1} = 1 - \exp \left[-\frac{2\sqrt{\pi}\mu\Omega^2}{|V'_2(x_c) - V'_1(x_c)|} \right], \quad (4.64)$$

e a probabilidade de o encontrarmos sujeito ao potencial $V_2(x)$ após o cruzamento será

$$P(1)_{2 \rightarrow 2} = \exp \left[-\frac{2\sqrt{\pi}\mu\Omega^2}{|V'_2(x_c) - V'_1(x_c)|} \right]. \quad (4.65)$$

O número entre parênteses refere-se ao número de vezes que o átomo passa pelo cruzamento.

Uma vez que a teoria de Landau-Zener somente considera uma única passagem pelo cruzamento, teremos que supor uma composição de (4.62), (4.63), (4.64) e (4.65) para termos uma expressão aproximada para $P(2)_{1 \rightarrow 1}$ e $P(2)_{1 \rightarrow 2}$, ou seja, a probabilidade de encontrarmos o átomo sujeito ao potencial $V_1(x)$ e $V_2(x)$, respectivamente, após duas passagens pelo ponto de cruzamento. Podemos fazer

$$P(2)_{1 \rightarrow 1} = P(1)_{1 \rightarrow 2} P(1)_{2 \rightarrow 1} + P(1)_{1 \rightarrow 1} P(1)_{1 \rightarrow 1},$$

$$P(2)_{1 \rightarrow 2} = P(1)_{1 \rightarrow 2} P(1)_{2 \rightarrow 2} + P(1)_{1 \rightarrow 1} P(1)_{1 \rightarrow 2},$$

o que nos dará

$$P(2)_{1 \rightarrow 1} = \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{2\sqrt{\pi}\mu\Omega^2}{|V'_2(x_c) - V'_1(x_c)|} \right] \right\}^2 + \exp \left[-\frac{2\sqrt{\pi}\mu\Omega^2}{|V'_2(x_c) - V'_1(x_c)|} \right],$$

$$P(2)_{1 \rightarrow 2} = 2 \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{2\sqrt{\pi}\mu\Omega^2}{|V'_2(x_c) - V'_1(x_c)|} \right] \right\} \exp \left[-\frac{2\sqrt{\pi}\mu\Omega^2}{|V'_2(x_c) - V'_1(x_c)|} \right].$$

Substituindo os valores utilizados em nosso problema nas expressões acima

$$\begin{cases} \mu = 39.9935, \\ \Omega = 8 \times 10^{-3}, \\ x_c = 25.3694, \\ V'_1(x) = 0, \\ V'_2(x) = 3.8116 \times 10^{-3}, \end{cases}$$

temos

$$P(2)_{1 \rightarrow 1} = 0.8321,$$

$$P(2)_{1 \rightarrow 2} = 0.1679.$$

O método de Landau-Zener apresenta algumas deficiências devido ao modo como é gerado:

Somente é levado em conta uma única passagem pelo cruzamento potencial;

Não se leva em conta o efeito da variação do momento da partícula no processo de transição de níveis;

Não se leva em conta que sob efeito de diferentes potenciais a partícula evolui com diferentes momentos (neste método considera-se que em ambos os potenciais a partícula movimenta-se com a mesma velocidade).

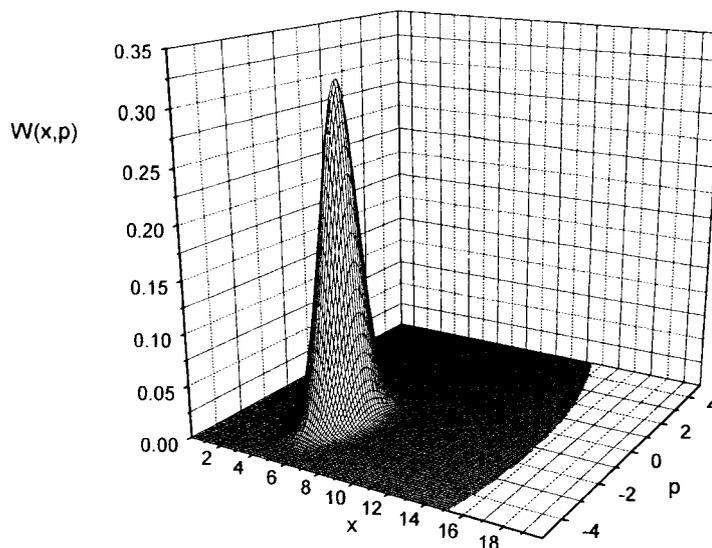
A principal vantagem do método do operador partido com trajetórias é a possibilidade de observarmos a passagem do pacote de ondas que descreve a partícula pelo cruzamento e também observarmos a reflexão do mesmo na barreira potencial próxima à origem. Vejamos a evolução de um pacote de ondas que se choca contra uma barreira potencial. Suponhamos a função (nas novas unidades do sistema)

$$W(x, p, 0) = \frac{1}{\pi} \exp \left[- (x - 5)^2 - (p + \sqrt{\pi})^2 \right],$$

como condição inicial de um sistema de uma partícula de massa $\mu = 39.9935 \mu_u$ movimentando-se sob ação de um potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x > 0 \\ \infty & \text{se } x = 0 \end{cases} .$$

Temos assim um potencial chato com uma barreira potencial em $x = 0$. Vejamos, com nosso método, como a onda se choca e em seguida é refletida pela barreira. Na figura (7) vemos a função de Wigner da partícula no instante $t = 0$. Evoluindo desde $t = 0$ até $t = 55 t_u$, vemos no gráfico da figura (8) que a função de Wigner tem sua parte inferior deslocada

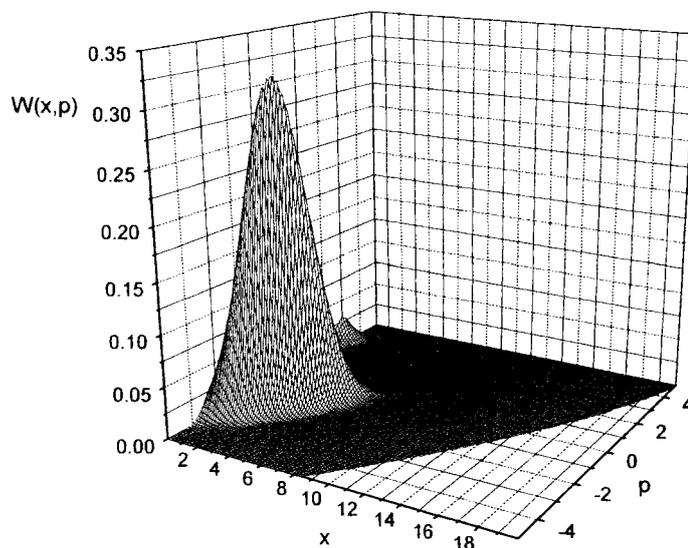


7. Condição inicial da função de Wigner que será evoluída numericamente num potencial. Esta função inicial é uma gaussiana normalizada centrada em $x = 10 x_u$ e $p = -\sqrt{\pi} p_u$.

na direção da barreira em $x = 0$. Uma pequena parte desta função já começa a ser refletida pela barreira como podemos ver.

Na figura (9) vemos o momento em que o pico da função atinge a barreira e é refletida de volta. Na figura (10) podemos ver que uma parte considerável da onda já foi refletida e seu pico agora encontra-se exatamente sobre o ponto inicial ($x = 5 x_u$), porém com momento invertido.

Vemos assim que é possível observar cada passo da colisão, desde o momento em que os dois átomos estão se aproximando, até o momento em que eles se afastam. Particularmente podemos estudar cada uma das passagens do sistema pelo ponto de Condon.



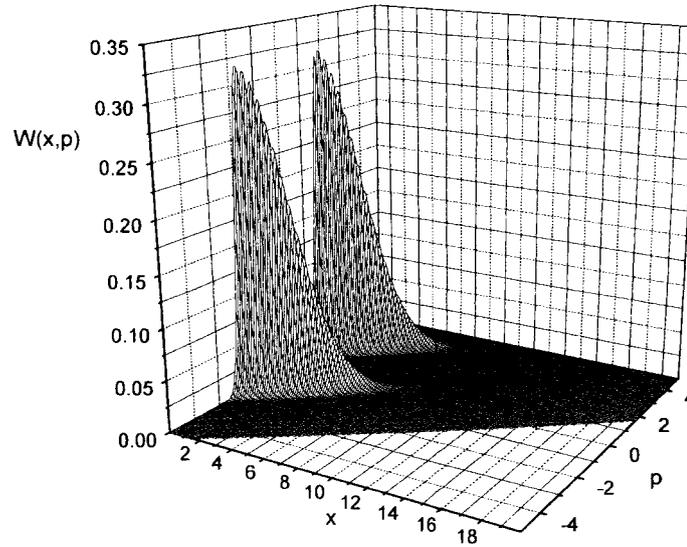
8. Evolução da da condição inicial desta $t = 0$ até $t = 55 t_u$. Neste instante a função se aproxima da barreira potencial em $x = 0$. Já é possível perceber uma pequena porção da função refletida na região do espaço de fase onde a coordenada de momento p tem valor positivo.

4.6 Dinâmica de populações e distribuição final de momento para átomos de césio colidentes

Visto que os resultados obtidos através do programa concordam satisfatoriamente com os resultados analíticos conhecidos, veremos como ilustração a colisão de dois átomos de césio colidindo-se frontalmente a uma temperatura de $300 \mu K$. Desta maneira podemos levar em conta apenas uma das variáveis espaciais, tornando assim o problema unidimensional.

Para átomos de césio colidentes temos[11] (no sistema cgs)

$$\begin{cases} V_1(x) = -\frac{C_6}{x^6}, \\ V_2(x) = -\frac{C_3}{x^3} + \hbar\Delta, \end{cases}$$



9. Configuração da função de Wigner no momento em que o pico da função atinge a barreira potencial em $x = 0$ e é refletida de volta. Isso ocorre em $t \approx 112 t_u$.

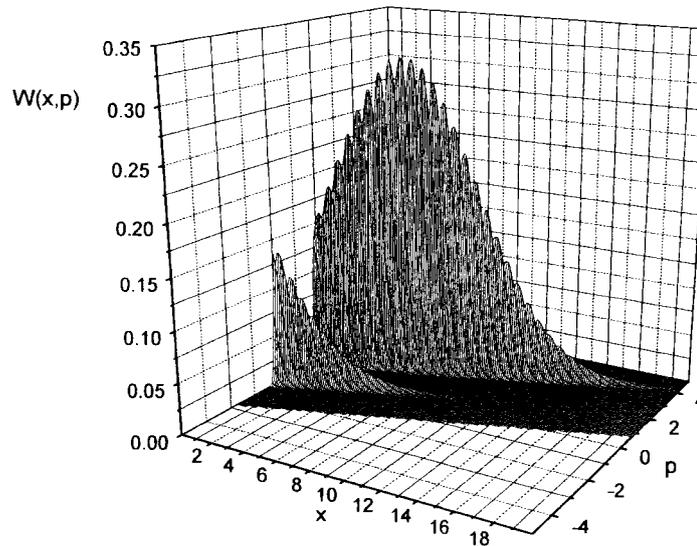
sendo que $C_3 = 20.3e^2a_0^2$, $C_6 = 6.4 \times 10^5 e^2a_0^5$, e é a carga do elétron, $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$,

$\Delta = \gamma_{at}$, $\Gamma = \frac{4}{3}\gamma_{at}$ e $\gamma_{at} = 5.13 \text{ MHz}$. Nas unidades utilizadas neste trabalho temos

$$\begin{cases} V_1(x) = \left(\frac{1.478}{x}\right)^6, \\ V_2(x) = -\left(\frac{8.074}{x}\right)^3 + 3.223 \times 10^{-2}. \end{cases}$$

O valor de Ω de Rabi varia com a intensidade do laser. Trataremos os casos em que Ω varia desde γ_{at} até $4\gamma_{at}$. O ponto de Condon neste caso é $x_c = 25 x_u (2920a_0)$.

Na região em que o valor de x é muito próximo de zero a repulsão nuclear age não permitindo que os átomos se aproximem. É necessário neste caso, para obtermos com a simulação resultados coerentes, colocarmos uma barreira potencial para impedir a aproximação entre os dois átomos. A barreira é colocada para evitar dinâmica na região onde o potencial varia muito rápido [12]. Esta barreira será colocada em $x = 8 x_u$ por conveniê-



10. Vemos aqui a função de Wigner após a reflexão na barreira potencial em $x = 0$.

cia. A variação da posição da barreira potencial em torno de $x = 8 x_u$ não causa variações capazes de invalidar os resultados, visto que o sistema permanece um tempo muito curto nessa região:

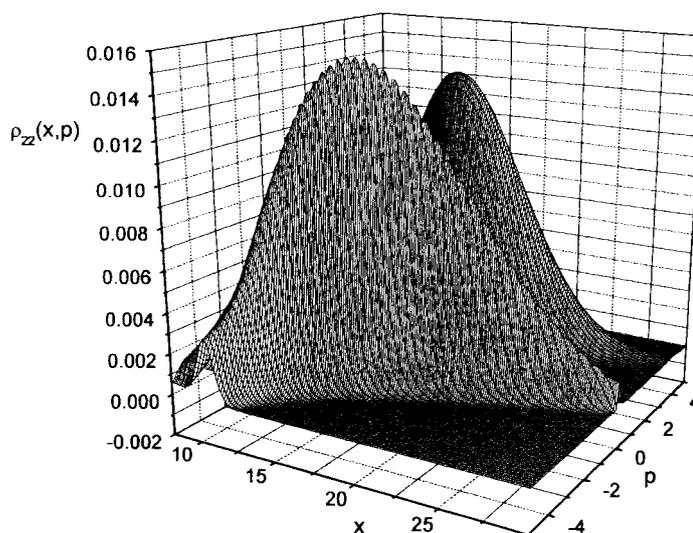
$$\Delta t \sim \frac{\mu \Delta x}{\sqrt{p_0^2 - 2\mu V(x)}}$$

Dado que para x muito pequeno $|V(x)|$ tem um valor muito grande, então o tempo que o sistema permanece próximo da origem é

$$\Delta t \leq 1,$$

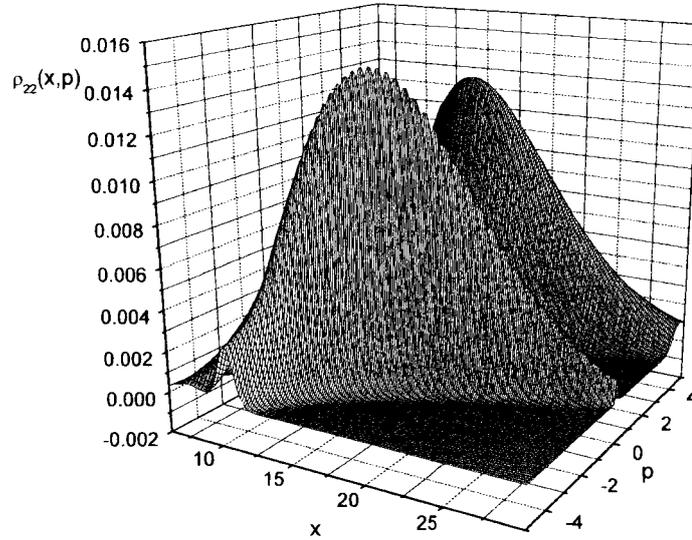
o que pode ser desprezado. Além disso, esta barreira garante que o valor do módulo da derivada do potencial em x não atinja valores muito grandes, o que invalidaria o método segundo a equação (4.53). Nos gráficos das figuras (11), (12) e (13) vemos o choque da

componente $\rho_{22}(x, p, t)$ da função de Wigner contra uma barreira colocada em $x = 8 x_u$, $x = 6 x_u$ e $x = 10 x_u$ respectivamente. Como é possível ver, não ha diferença significativa entre elas. Todas as ondas partiram de $x = 20 x_u$



11. Superfície da função de Wigner relativa ao estado excitado no momento em que esta choca-se contra uma barreira potencial posicionada em $x = 8 x_u$.

Quanto à condição inicial, para o caso que estamos apresentando agora, considera-se que inicialmente os dois átomos encontram-se muito distantes um do outro (consideramos inicialmente que a distância é maior do que $30 x_u$, o que corresponde a $3500 a_0$) e ambos estão no estado fundamental. A esta distância os átomos estão sob ação de potenciais praticamente chatos, como os do caso apresentado nas dquações (4.55). Sob o efeito dos dois potenciais e do laser, o sistema de dois átomos e rapidamente ao estado estacionário,



12. Superfície da função de Wigner relativa ao estado excitado no momento em que esta choca-se contra uma barreira potencial posicionada em $x = 6 x_u$.

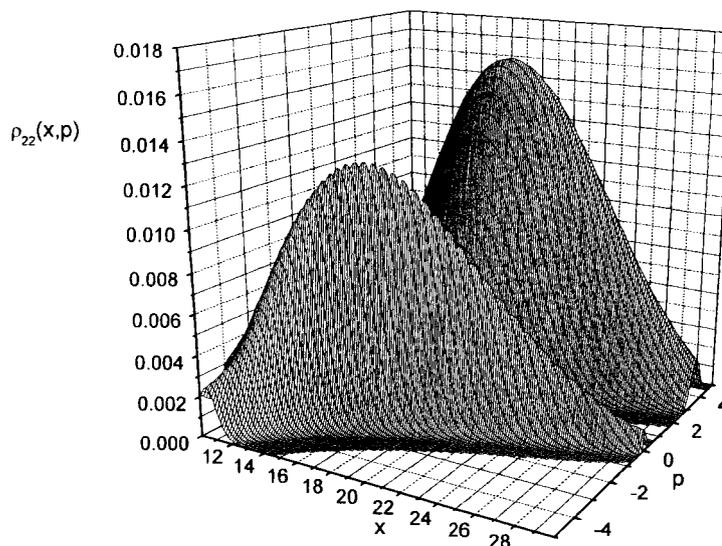
que pelas mesmas equações que citamos será para, $t > \frac{2\pi}{\Gamma}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_{11}(x, p, t) = \left(1 - \frac{4\Omega^2}{4\Delta^2 + \Gamma^2 + 8\Omega^2}\right) f_{11}\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right), \\ \rho_{12}(x, p, t) = -\left(\frac{4\Delta\Omega}{4\Delta^2 + \Gamma^2 + 8\Omega^2} - \frac{2i\Gamma\Omega}{4\Delta^2 + \Gamma^2 + 8\Omega^2}\right) f_{11}\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right), \\ \rho_{21}(x, p, t) = -\left(\frac{4\Delta\Omega}{4\Delta^2 + \Gamma^2 + 8\Omega^2} + \frac{2i\Gamma\Omega}{4\Delta^2 + \Gamma^2 + 8\Omega^2}\right) f_{11}\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right), \\ \rho_{22}(x, p, t) = \left(\frac{4\Omega^2}{4\Delta^2 + \Gamma^2 + 8\Omega^2}\right) f_{11}\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right). \end{array} \right.$$

Dado que $t \sim \frac{1}{\Gamma}$ é muito pequeno se comparado com o tempo total de colisão, podemos desprezá-lo e tomar as equações acima como condição inicial para a função de Wigner.

Fazendo $\Omega = \gamma_{at}$ e o restante dos parâmetros como foram dados acima temos

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_{11}(x, p, t) = \frac{22}{31} f_{11}\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right), \\ \rho_{12}(x, p, t) = -\frac{3}{31} (3 - 2i) f_{11}\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right), \\ \rho_{21}(x, p, t) = -\frac{3}{31} (3 + 2i) f_{11}\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right), \\ \rho_{22}(x, p, t) = \frac{9}{31} f_{11}\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right). \end{array} \right.$$



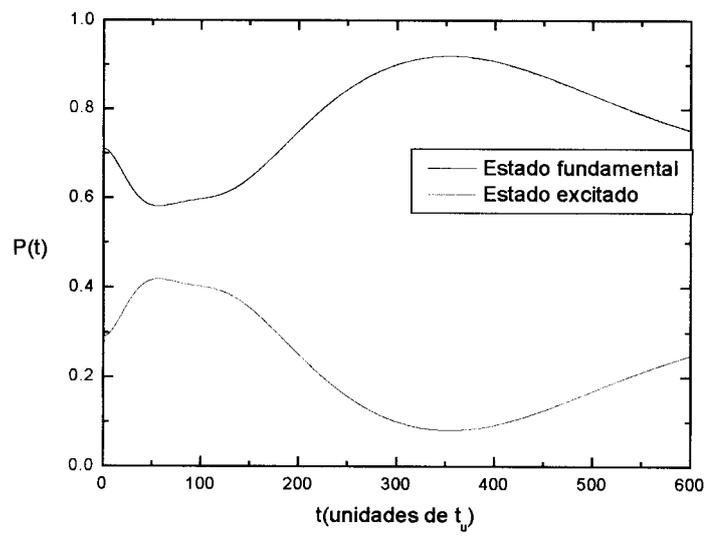
13. Superfície da função de Wigner relativa ao estado excitado no momento em que esta choca-se contra uma barreira potencial posicionada em $x = 10 x_u$.

A evolução da população dos dois estados para este caso encontra-se na figura (14). Outra informação importante que o programa é capaz de nos fornecer é a distribuição final de momento. Através dela podemos calcular qual fração do total de átomos emerge da colisão com energia cinética suficiente para escapar da armadilha. A fração N de escape será dada por

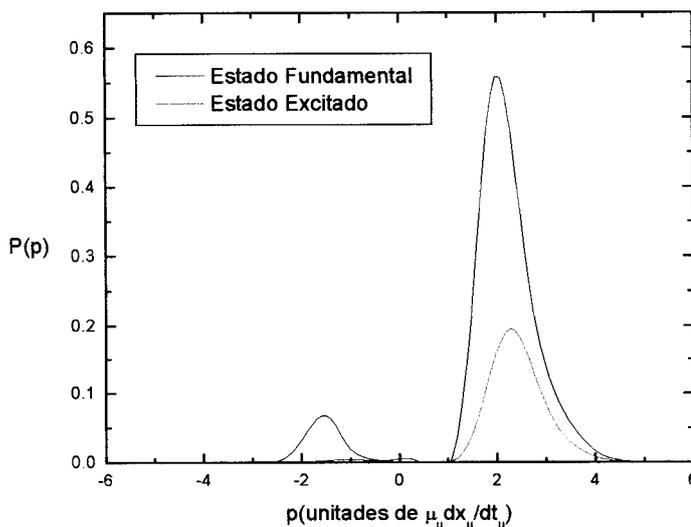
$$N = \int_{p_e}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dx [\rho_{11}(x, p, \infty) + \rho_{22}(x, p, \infty)]$$

A distribuição final de momento para este caso encontra-se na figura (15).

Outro caso que merece destaque é o de acoplamento forte (Ω muito grande). Neste caso o sistema comporta-se como se estivesse sujeito a um único potencial $V(x) = \frac{1}{2} [V_1(x) + V_2(x)]$. Como um exemplo podemos ver o caso em que $\Omega = 4\gamma_{at}$. Vemos



14. Dinâmica da população dos estados fundamental e excitado para o caso em que $\Omega = \gamma_{at}$.



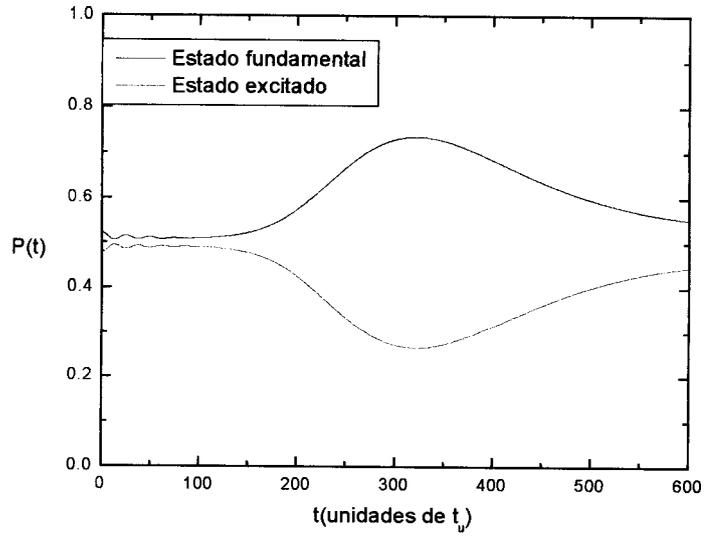
15. Distribuição de probabilidade na coordenada de momento ao final de uma colisão para o caso em que $\Omega = \gamma_{at}$.

que ao final da colisão, a distribuição de probabilidade de momentos possui forma muito parecida para os estados fundamental e excitado, diferindo apenas na amplitude, e não obstante existe uma considerável probabilidade do sistema encontrar-se no estado excitado (~ 0.5).

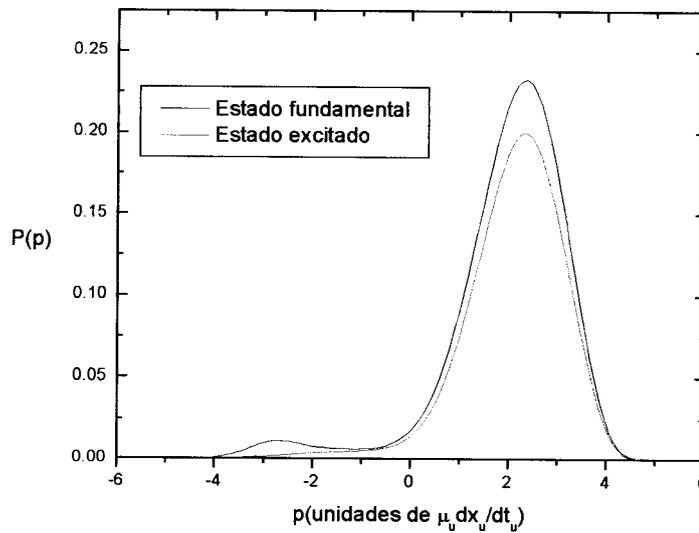
Os gráficos das figuras (16) e (17) são, respectivamente, as populações dos estados fundamental e excitado e a distribuição de momento para um sistema com acoplamento $\Omega = 4\gamma_{at}$.

4.7 Colisão vista passo-a-passo

Como foi dito, a principal vantagem deste método é a possibilidade de observarmos passo-a-passo o processo de colisão entre os dois átomos. Como um exemplo, vejamos como se



16. Dinâmica da população dos estados fundamental e excitado para o caso em que $\Omega = 4\gamma_{at}$.



17. Distribuição de probabilidade na coordenada de momento ao final de uma colisão para o caso em que $\Omega = 4\gamma_{at}$.

dá o choque entre dois átomos de césio nas mesmas condições vistas acima e com $\Omega = \gamma_{at}$. Para tanto construiremos uma malha de pontos que se estende desde $x = 8 x_u$ - onde se encontra a barreira potencial - até $x = 60 x_u$ na coordenada de posição, e de $p = -10 p_u$ até $p = 10 p_u$ na coordenada de momento. O número de divisões que cada uma das coordenadas sofrerá, respectivamente, são $N_x = 520$ e $N_p = 200$. Desta forma a malha será constituída de passos $\Delta x = \Delta p = 0.1$. O tempo total de colisão que observaremos é de $600 t_u$ que será dividido em passos $\Delta t = 0.1$. Inicialmente localizaremos a partícula em $x = 27 x_u$, o que equivale a $3154 a_0$. A condição inicial utilizada será

$$\begin{cases} \rho_{11}(x, p, 0) = \frac{22}{31} f_{11}(x, p), \\ \rho_{12}(x, p, 0) = -\frac{3}{31} (3 - 2i) f_{11}(x, p), \\ \rho_{21}(x, p, 0) = -\frac{3}{31} (3 + 2i) f_{11}(x, p), \\ \rho_{22}(x, p, 0) = \frac{9}{31} f_{11}(x, p), \end{cases}$$

com

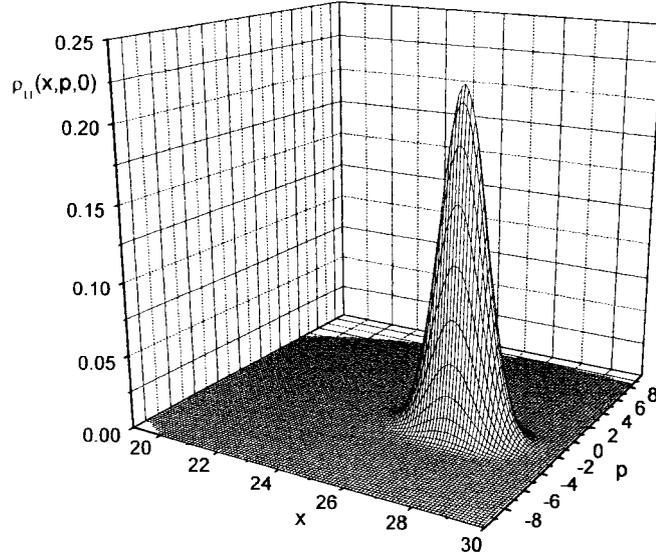
$$f_{11}(x, p) = \frac{1}{\pi} \exp \left[- (x - 27)^2 - (p + \sqrt{\pi})^2 \right].$$

Conforme a expressão do erro (4.53)

$$\begin{aligned} \hat{E}(x, p, t, \Delta t) = & \frac{(\Delta t)^2}{4} \left\{ \gamma_{at} \left[\frac{dV_2(x)}{dx} - \frac{dV_1(x)}{dx} \right] \times \right. \\ & \times \left(\begin{array}{c} i \left[\frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial p} - \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial p} \right] + \frac{4}{3} \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial p} \\ -i \left[\frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial p} + \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial p} \right] \\ i \left[\frac{\partial \rho_{11}(x, p, t)}{\partial p} + \frac{\partial \rho_{22}(x, p, t)}{\partial p} \right] \\ i \left[\frac{\partial \rho_{12}(x, p, t)}{\partial p} - \frac{\partial \rho_{21}(x, p, t)}{\partial p} \right] \end{array} \right) - \\ & \left. i \frac{4}{3} \gamma_{at}^2 \left(\begin{array}{c} \rho_{12}(x, p, t) - \rho_{21}(x, p, t) \\ \rho_{11}(x, p, t) + 3\rho_{22}(x, p, t) \\ -[\rho_{11}(x, p, t) + 3\rho_{22}(x, p, t)] \\ -[\rho_{12}(x, p, t) - \rho_{21}(x, p, t)] \end{array} \right) \right\}. \end{aligned}$$

Neste domínio de x , a expressão $\left[\frac{dV_2(x)}{dx} - \frac{dV_1(x)}{dx} \right]$ tem seu valor máximo em $x = 8 x_u$

$$\left[\frac{dV_2(x)}{dx} - \frac{dV_1(x)}{dx} \right]_{x=8} = 0.3854.$$



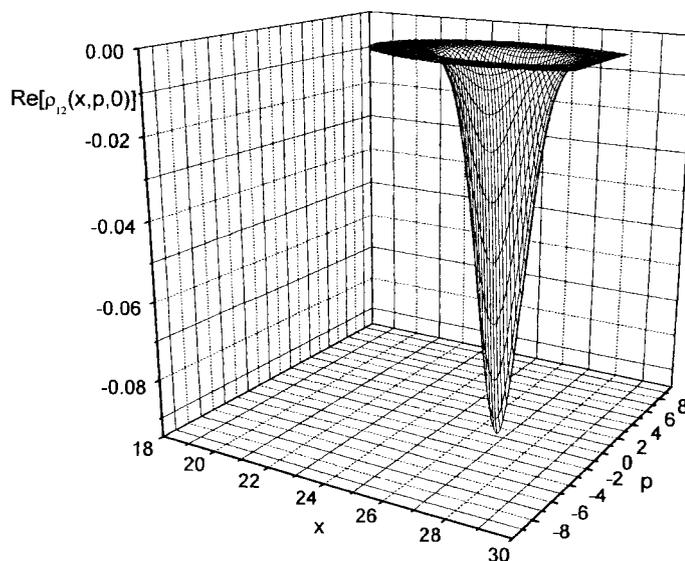
18. Função de Wigner do estado fundamental no instante inicial.

Este valor, juntamente como o valor de γ_{at} , substituídos na expressão do erro nos dão

$$\hat{E}(x, p, t, 0.1) \sim 3 \times 10^{-5} \left\{ \begin{array}{l} \left(i \left[\frac{\partial \rho_{12}(x,p,t)}{\partial p} - \frac{\partial \rho_{21}(x,p,t)}{\partial p} \right] + \frac{4}{3} \frac{\partial \rho_{22}(x,p,t)}{\partial p} \right) \\ - i \left[\frac{\partial \rho_{11}(x,p,t)}{\partial p} + \frac{\partial \rho_{22}(x,p,t)}{\partial p} \right] \\ i \left[\frac{\partial \rho_{11}(x,p,t)}{\partial p} + \frac{\partial \rho_{22}(x,p,t)}{\partial p} \right] \\ i \left[\frac{\partial \rho_{12}(x,p,t)}{\partial p} - \frac{\partial \rho_{21}(x,p,t)}{\partial p} \right] \end{array} \right) - \\ i 10^{-1} \left(\begin{array}{l} \rho_{12}(x, p, t) - \rho_{21}(x, p, t) \\ \rho_{11}(x, p, t) + 3\rho_{22}(x, p, t) \\ - [\rho_{11}(x, p, t) + 3\rho_{22}(x, p, t)] \\ - [\rho_{12}(x, p, t) - \rho_{21}(x, p, t)] \end{array} \right) \Bigg\}.$$

Os gráficos da condição inicial da colisão encontram-se nas figuras (18), (19), (20) e (21).

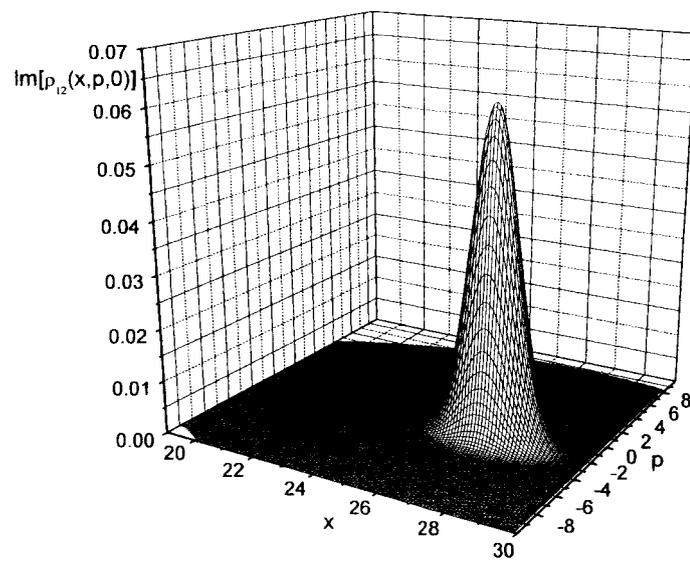
Nos gráficos (22), (23), (24) e (25) vemos a configuração do sistema no instante $t = 50 t_u$. Neste instante o pico da distribuição passa pelo cruzamento entre os potenciais ($x \approx 25 x_u$). Vemos que a altura do pico de $\rho_{22}(x, p, 50)$ é maior que a altura inicial. Isto se deve ao



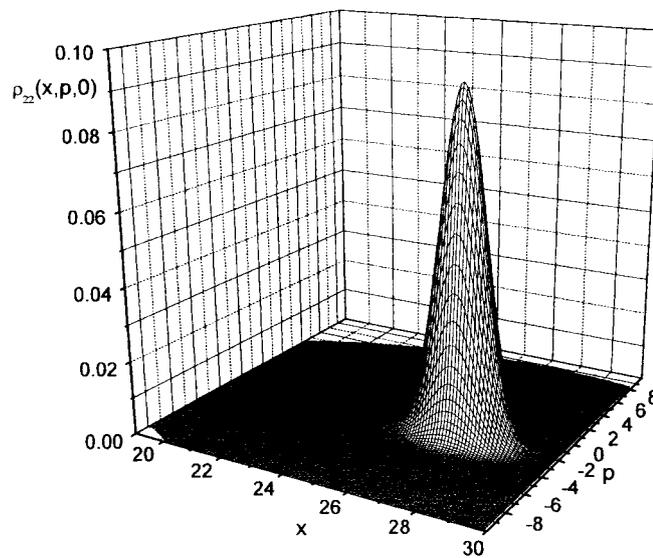
19. Parte real da coerência no instante inicial.

fato de ser maior a probabilidade de haver transição de estado na região do cruzamento. Nas figuras (26), (27), (28) e (29) vemos a configuração do sistema no instante em que as funções atingem a barreira potencial em $x = 8 x_u$ e é refletida de volta. Nas figuras (30), (31), (32) e (33) vemos a onda já refletida dirigindo-se novamente para o cruzamento..

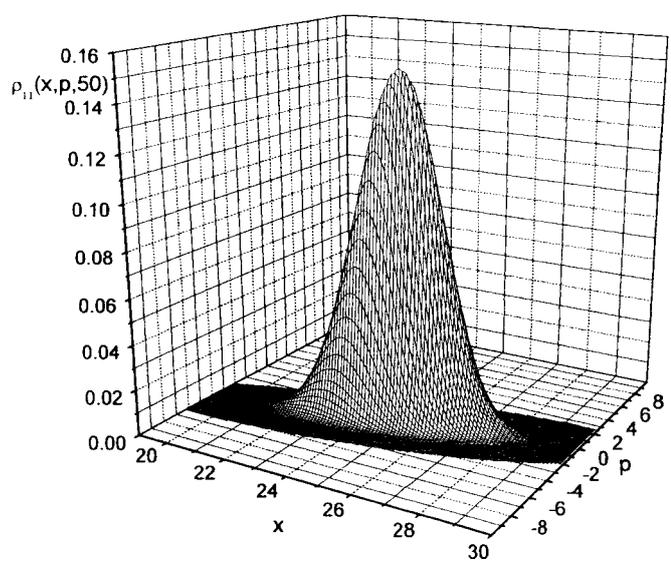
Desta forma vemos que com este formalismo é possível observar cada passo da colisão. As respostas obtidas através da função de Wigner não correspondem àquelas obtidas pelo método de Landau-Zener. Para este mesmo caso, pela teoria de Landau-Zener, a probabilidade de encontrarmos o sistema no estado excitado é nula. Isto se deve ao fato de não ser considerada por esta teoria a extensão do pacote de onda, a variação dos potenciais com a distância nem a variação do momento sob a ação de diferentes potenciais.



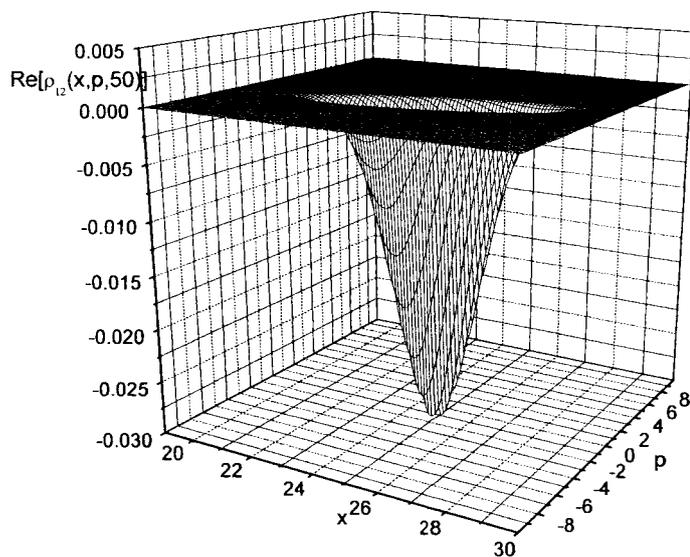
20. Parte imaginária coerência da função de Wigner no instante inicial.



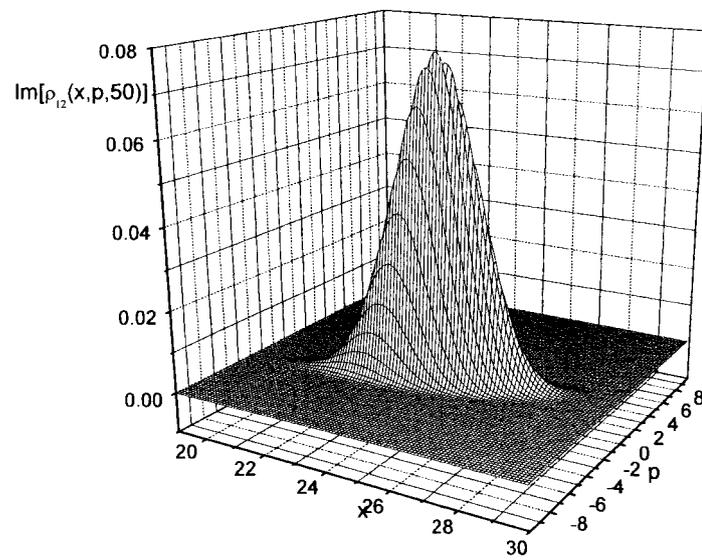
21. Função de Wigner do estado excitado no instante inicial.



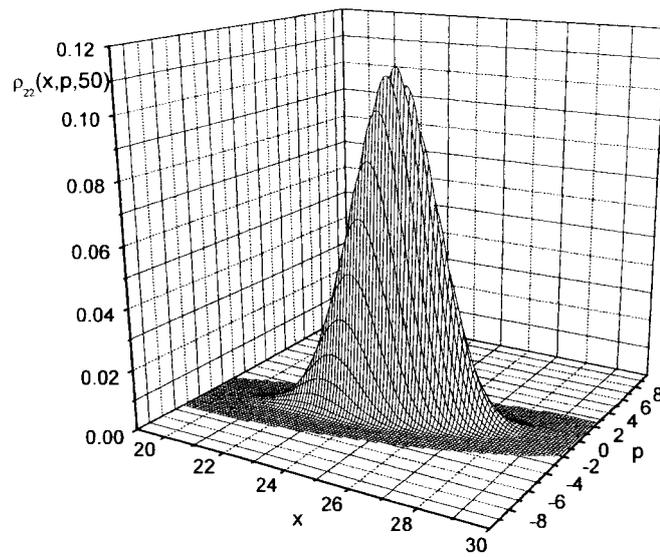
22. Função de Wigner do estado fundamental ao passar pelo cruzamento em $t = 50 t_u$



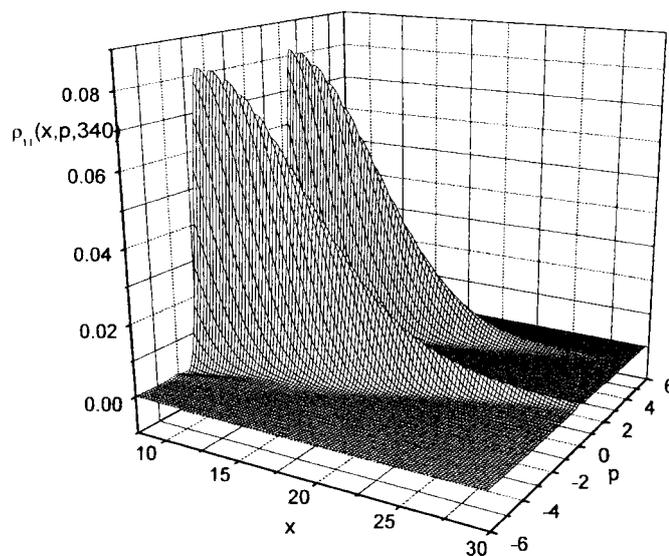
23. Parte real da coerência da função de Wigner ao passar pelo cruzamento em $t = 50 t_u$



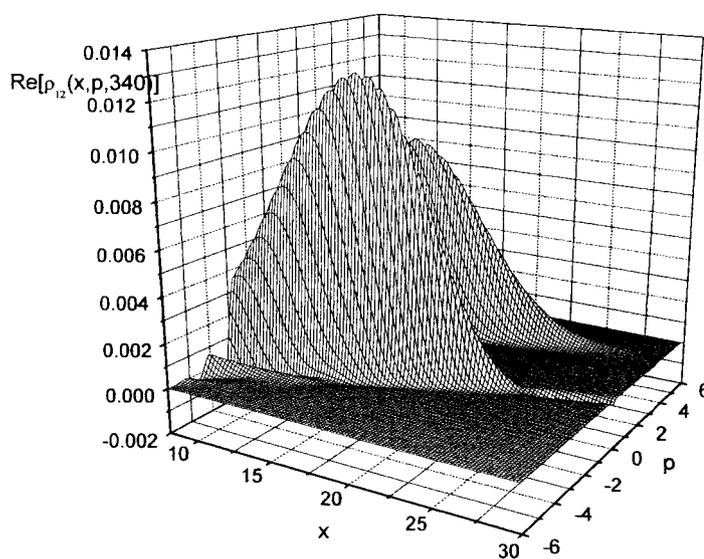
24. Parte imaginária da coerência da função de Wigner ao passar pelo cruzamento em $t = 50 t_u$



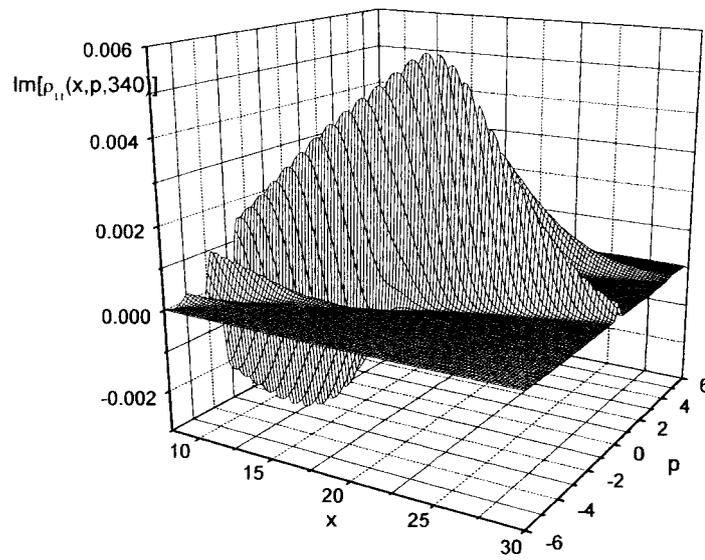
25. Função de Wigner do estado excitado ao passar pelo cruzamento em $t = 50 t_u$



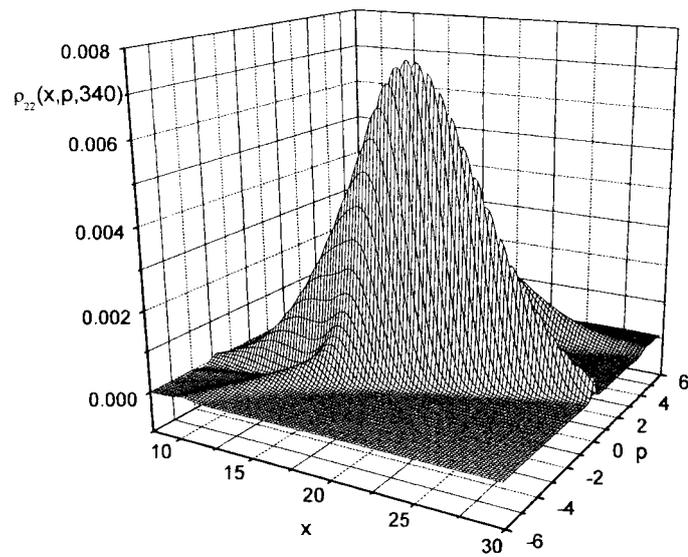
26. Função de Wigner do estado excitado no instante ($t = 340 t_u$) em que atinge a barreira potencial em $x = 8 x_u$.



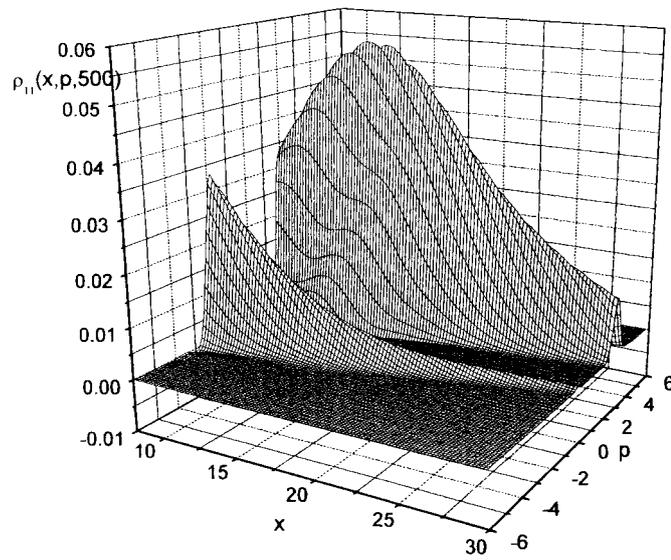
27. Parte real da coerência da função de Wigner no instante ($t = 340 t_u$) em que atinge a barreira potencial em $x = 8 x_u$.



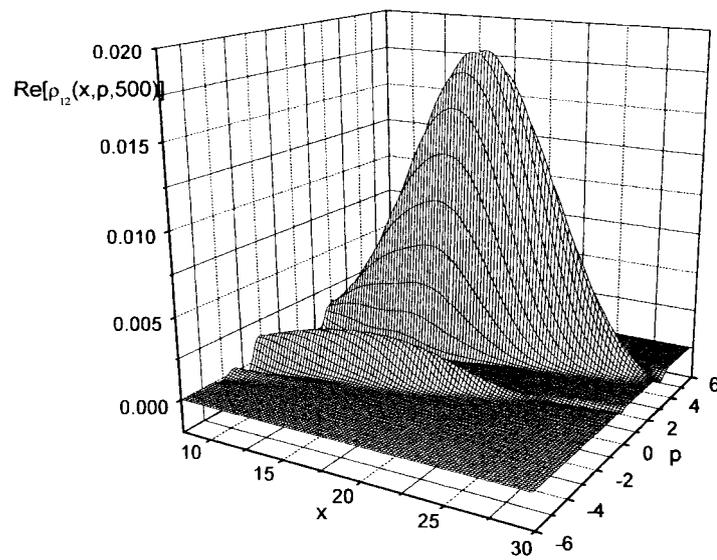
28. Parte imaginária da coerência da função de Wigner no instante ($t = 340 t_u$) em que atinge a barreira potencial em $x = 8 x_u$



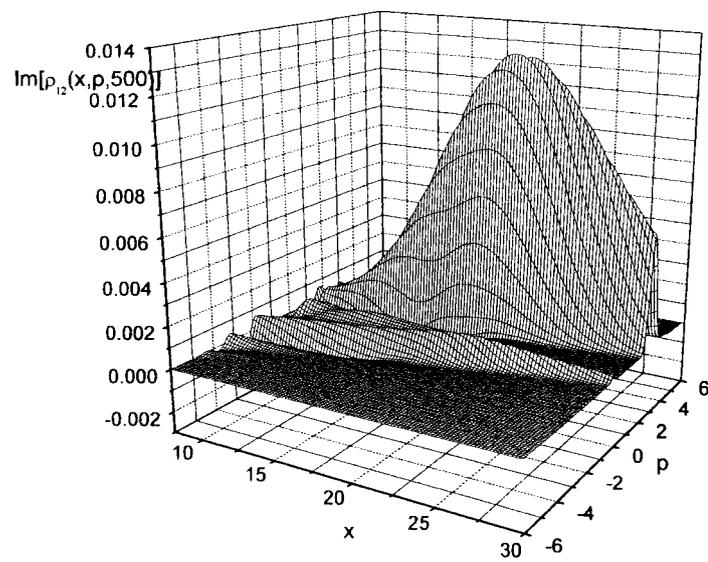
29. Função de Wigner do estado excitado no instante ($t = 340 t_u$) em que atinge a barreira potencial em $x = 8 x_u$.



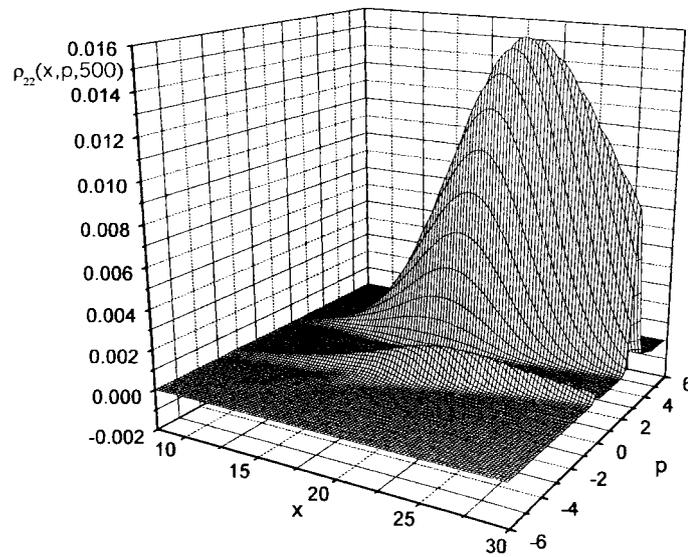
30. Função de Wigner do estado fundamental refletida dirigindo-se para o cruzamento.



31. Parte real da coerência da função de Wigner refletida.



32. Parte imaginária da coerência da função de Wigner refletida.



33. Função de Wigner do estado excitado refletida dirigindo-se para o cruzamento.

Capítulo 5: Conclusão

Neste trabalho de mestrado implementamos um programa computacional para estudarmos colisões binárias de átomos alcalinos confinados em armadilhas magneto-ópticas em regime frio, baseado no formalismo de Wigner. Este formalismo, que é uma formulação equivalente da mecânica quântica, permite-nos expandir as equações que descrevem o sistema colisional em série de \hbar . Assim, é possível tratarmos quanticamente os graus internos do par colidente, enquanto os graus de liberdade externos podem ser tratados de maneira quase-clássica. O programa implementado foi exaustivamente testado para sistemas simples, de comportamento conhecido e apresentou resultados concordantes com as soluções analíticas conhecidas.

Por motivo de comparação, além do formalismo de Wigner também foram utilizadas a teoria de Landau-Zener, que consiste em desprezar o movimento translacional dos átomos - uma vez que o regime estudado é frio e as velocidades são desprezíveis - considerando apenas a energia potencial de interação entre ambos como função do tempo. Também utilizamos a expansão perturbativa, que nos fornece uma aproximação semi-analítica para a solução das equações da função matricial de Wigner para acoplamentos fracos.

De posse de uma solução numérica capaz de fornecer-nos resultados condizentes com os resultados analíticos dos sistemas simples conhecidos, nosso próximo objetivo, para um futuro trabalho, é estudar toda a física envolvida nos processos colisionais, bem como a validade da aproximação quase-clássica. Além disso, podemos estudar a contribuição dos

termos de ordens superiores de \hbar no processo colisional, e ainda o estudo de colisões de átomos de espécies diferentes.

Referências

- [1] Chu, S., Rev. Mod. Phys. 70, No.3, 685 (1998).
- [2] Cohen-Tannoudji, C. N., Rev. Mod. Phys. 70, No.3, 707 (1998).
- [3] Phillips, W. D., Rev. Mod. Phys. 70, No.3, 721 (1998).
- [4] Weiner, J., V. S. Bagnato, S. C. Zilio and P. S. Julienne, 1998, “Experiments and theory in cold and ultracold collisions”.
- [5] Zener, C., Proc. R. Soc. London, Ser. A 137, 696 (1932).
- [6] Wigner, E., Phys. Rev., 40, 749 (1932)
- [7] Hillery, M., R. F. O’Connell, M. O. Scully, E. P. Wigner, Physics Reports, 106, No. 3, 121, (1984)
- [8] de Groot, S., “La transformation de Weyl et la fonction de Wigner: une forme alternative de la mécanique quantique”, Les presses de l’Université de Montréal.
- [9] Cook, J. R., Phys. Rev. A, 22, No. 3, 1078 (1980)
- [10] Press, H. W., S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, “Numerical Recipes: in FORTRAN, The Art of Scientific Computing ”, Second Edition, 1992, Cambridge University Press
- [11] Suominen, K. A., Y.B. Band, I. Tuvi, P. S. Julienne, Phys. Rev. A, 57, No. 5, 3724 (1998).
- [12] Stenholm, S., Phys. Rev. A, 47, No. 4, 2523 (1993).

Apêndice A

6.1 Sistema quântico com energias variáveis

Para compreendermos o formalismo de Landau-Zener, convém verificarmos a solução de um sistema quântico de dois níveis de energia de valores variáveis. Consideremos um sistema quântico de dois níveis, cujas energias variem com o tempo, e que este seja descrito pelo hamiltoniano

$$\hat{H}(t) = \begin{bmatrix} \hbar\omega_1(t) & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega & \hbar\omega_2(t) \end{bmatrix}. \quad (6.66)$$

Desta maneira, a equação de Schrödinger do sistema será dada por

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} &= \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \Rightarrow \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} &= \begin{bmatrix} \hbar\omega_1(t) & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega & \hbar\omega_2(t) \end{bmatrix} |\psi(t)\rangle. \end{aligned}$$

Para simplificar a obtenção da solução analítica, podemos dividir o hamiltoniano do sistema da seguinte maneira

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0(t) + \hat{H}_\Omega,$$

sendo que

$$\begin{aligned} \hat{H}_0(t) &= \begin{bmatrix} \hbar\omega_1(t) & 0 \\ 0 & \hbar\omega_2(t) \end{bmatrix}, \\ \hat{H}_\Omega &= \begin{bmatrix} 0 & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

e fazer a seguinte transformada

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_0(\tau) d\tau\right] |\phi(t)\rangle,$$

que nos levará à equação

$$i\hbar \frac{\partial |\phi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{V}(t) |\phi(t)\rangle,$$

sendo

$$\begin{aligned} \hat{V}(t) &= \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_0(\tau) d\tau\right] \hat{H}_\Omega \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_0(\tau) d\tau\right] \Rightarrow \\ &\Rightarrow \hat{V}(t) = \hbar\Omega \begin{bmatrix} 0 & \exp[-i\eta(t)] \\ \exp[i\eta(t)] & 0 \end{bmatrix}, \\ &\quad \eta(t) = \theta_2(t) - \theta_1(t), \\ &\quad \begin{cases} \theta_1(t) = \int_{t_0}^t \omega_1(\tau) d\tau \\ \theta_2(t) = \int_{t_0}^t \omega_2(\tau) d\tau \end{cases}, \\ i\hbar \frac{\partial |\phi(t)\rangle}{\partial t} &= \hbar\Omega \begin{bmatrix} 0 & \exp[-i\eta(t)] \\ \exp[i\eta(t)] & 0 \end{bmatrix} |\phi(t)\rangle. \end{aligned}$$

Expandindo numa série de Dyson, temos

$$\begin{aligned} |\phi(t)\rangle &= \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \right. \\ &\times \sum_{n=1}^{\infty} (-i\Omega)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \begin{bmatrix} 0 & \exp[-i\eta(t_1)] \\ \exp[i\eta(t_1)] & 0 \end{bmatrix} \times \\ &\times \left. \begin{bmatrix} 0 & \exp[-i\eta(t_2)] \\ \exp[i\eta(t_2)] & 0 \end{bmatrix} \dots \begin{bmatrix} 0 & \exp[-i\eta(t_n)] \\ \exp[i\eta(t_n)] & 0 \end{bmatrix} \right\} |\phi(t_0)\rangle. \end{aligned} \tag{6.67}$$

Sendo

$$|\psi(t_0)\rangle = |\phi(t_0)\rangle,$$

então

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_0(\tau) d\tau\right] \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \right. \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} (-i\Omega)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \begin{bmatrix} 0 & \exp[-i\eta(t_1)] \\ \exp[i\eta(t_1)] & 0 \end{bmatrix} \times \\ &\times \left. \begin{bmatrix} 0 & \exp[-i\eta(t_2)] \\ \exp[i\eta(t_2)] & 0 \end{bmatrix} \dots \begin{bmatrix} 0 & \exp[-i\eta(t_n)] \\ \exp[i\eta(t_n)] & 0 \end{bmatrix} \right\} |\psi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

Esta é a solução de um sistema quântico de dois níveis com energias dependentes do tempo.

Apêndice B

7.1 O formalismo de Wigner

7.1.1 A transformada de Weyl

Princípios:

A descrição de um sistema quântico mapeado no espaço de fase é possível se e somente se a cada operador \hat{A} qualquer, existir uma correspondente função $A(x, p)$. Tal correspondência é feita via transformada de Weyl.

Dado um operador \hat{A} podemos escrevê-lo como

$$\hat{A} = \int dx \int dp A(x, p) \hat{\Delta}(x, p), \quad (7.68)$$

sendo

$$A(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int du \langle x+u | \hat{A} | x-u \rangle \exp\left(-\frac{2ipu}{\hbar}\right), \quad (7.69)$$

$$\hat{\Delta}(x, p) = 2 \int du \exp\left(\frac{2ipu}{\hbar}\right) |x+u\rangle \langle x-u|. \quad (7.70)$$

As expressões (7.69) e (7.70) são respectivamente a transformada de Weyl e uma base de operadores.

De uma forma totalmente equivalente podemos fazer

$$A(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int dv \langle p+v | \hat{A} | p-v \rangle \exp\left(\frac{2ivx}{\hbar}\right), \quad (7.71)$$

$$\hat{\Delta}(x, p) = 2 \int dv \exp\left(-\frac{2ivx}{\hbar}\right) |p+v\rangle \langle p-v|.$$

A base de operadores (7.70) ainda pode ser escrita como

$$\hat{\Delta}(x, p) = 2\pi\hbar \exp\left[\left(\frac{\hbar}{2i}\right) \frac{\partial^2}{\partial x \partial p}\right] \delta(x - \hat{x}) \delta(p - \hat{p}). \quad (7.72)$$

Essa forma, substituída em (7.68) nos dá

$$\hat{A} = 2\pi\hbar \int dx \int dp \delta(x - \hat{x}) \delta(p - \hat{p}) \left\{ \exp \left[\left(\frac{\hbar}{2i} \right) \frac{\partial^2}{\partial x \partial p} \right] A(x, p) \right\}.$$

Esta expressão mostra que, para encontrarmos o operador \hat{A} a partir de sua transformada de Weyl $A(x, p)$, devemos inicialmente calcular $\exp \left[\left(\frac{\hbar}{2i} \right) \frac{\partial^2}{\partial x \partial p} \right] A(x, p)$ e depois substituir as variáveis x e p pelos operadores \hat{x} e \hat{p} respectivamente com a ressalva de se escrever os operadores de coordenada à esquerda dos operadores de momento.

7.1.2 Propriedades matriciais de $\hat{\Delta}(x, p)$

Através da expressão para o operador $\hat{\Delta}(x, p)$ podemos calcular seus elementos matriciais

i)

$$\langle x_1 | \hat{\Delta}(x, p) | x_2 \rangle = \delta \left(x - \left[\frac{x_1 + x_2}{2} \right] \right) \exp \left[\frac{ip(x_1 - x_2)}{\hbar} \right]. \quad (7.73)$$

Caso particular

$$\langle x_1 | \hat{\Delta}(x, p) | x_1 \rangle = \delta(x - x_1);$$

ii)

$$\langle p_1 | \hat{\Delta}(x, p) | p_2 \rangle = \delta \left(p - \left[\frac{p_1 + p_2}{2} \right] \right) \exp \left[-\frac{i(p_1 - p_2)x}{\hbar} \right]. \quad (7.74)$$

Caso particular

$$\langle p_1 | \hat{\Delta}(x, p) | p_1 \rangle = \delta(p - p_1);$$

iii)

$$\langle x_1 | \hat{\Delta}(x, p) | p_1 \rangle = \sqrt{2\pi\hbar} \exp \left(\frac{ix_1 p_1}{\hbar} \right) \exp \left[\frac{\hbar}{2i} \frac{\partial^2}{\partial x \partial p} \right] \delta(x - x_1) \delta(p - p_1) \quad (7.75)$$

iv)

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \hat{\Delta}(x, p) = |x\rangle \langle x|, \quad (7.76)$$

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int dx \hat{\Delta}(x, p) = |p\rangle \langle p|. \quad (7.77)$$

Dessas definições temos

$$Tr \left[\hat{\Delta}(x, p) \right] = 1, \quad (7.78)$$

$$Tr \left[\hat{\Delta}(x_1, p_1) \hat{\Delta}(x_2, p_2) \right] = 2\pi\hbar \delta(x_1 - x_2) \delta(p_1 - p_2), \quad (7.79)$$

$$\begin{aligned} & Tr \left[\hat{\Delta}(x_1, p_1) \hat{\Delta}(x_2, p_2) \hat{\Delta}(x_3, p_3) \right] = \\ & = 4 \exp \left\{ \frac{2i}{\hbar} [(p_2 - p_3)x_1 + (p_3 - p_1)x_2 + (p_1 - p_2)x_3] \right\}. \end{aligned} \quad (7.80)$$

Tais definições serão úteis na definição do traço de operadores a partir de suas transformadas de Weyl.

7.1.3 Traço de operadores a partir de suas respectivas transformadas

Dados operadores \hat{A} e \hat{B} , cujas transformadas de Weyl são respectivamente $A(x, p)$ e $B(x, p)$, temos, conforme os elementos de matriz de $\hat{\Delta}(x, p)$, que

$$Tr \left[\hat{A} \right] = \int dx \int dp A(x, p) Tr \left[\hat{\Delta}(x, p) \right] = \int dx \int dp A(x, p). \quad (7.81)$$

Esta propriedade do traço é obtida ao substituirmos (7.78) na equação acima. Através de (7.79) podemos encontrar o traço do produto dos operadores \hat{A} e \hat{B}

$$\begin{aligned} Tr \left[\hat{A} \hat{B} \right] &= \int dx \int dp \int dx_1 \int dp_1 A(x, p) B(x_1, p_1) Tr \left[\hat{\Delta}(x, p) \hat{\Delta}(x_1, p_1) \right] = \\ &= \int dx \int dp A(x, p) B(x, p). \end{aligned} \quad (7.82)$$

É particularmente interessante para nós calcularmos o traço do produto $\hat{A} \hat{\Delta}(x, p)$

$$\begin{aligned} Tr \left[\hat{A} \hat{\Delta}(x, p) \right] &= \int dx_1 \int dp_1 A(x_1, p_1) Tr \left[\hat{\Delta}(x_1, p_1) \hat{\Delta}(x, p) \right] = 2\pi\hbar A(x, p) \Rightarrow \\ &\Rightarrow A(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} Tr \left[\hat{A} \hat{\Delta}(x, p) \right]. \end{aligned} \quad (7.83)$$

Este resultado, aliado à expressão (7.80) nos possibilita encontrar uma forma simples para

$[\hat{A}, \hat{B}]$ e $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ que ficam como

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 4i\pi\hbar \int dx \int dp \left\{ \sin \left[\frac{\hbar}{2} \left(\frac{\partial^A}{\partial x} \frac{\partial^B}{\partial p} - \frac{\partial^A}{\partial p} \frac{\partial^B}{\partial x} \right) \right] \right\} A(x, p) B(x, p) \hat{\Delta}(x, p), \quad (7.84)$$

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = 4\pi\hbar \int dx \int dp \left\{ \cos \left[\frac{\hbar}{2} \left(\frac{\partial^A}{\partial x} \frac{\partial^B}{\partial p} - \frac{\partial^A}{\partial p} \frac{\partial^B}{\partial x} \right) \right] \right\} A(x, p) B(x, p) \hat{\Delta}(x, p). \quad (7.85)$$

Os índices nos operadores (ex.: $\frac{\partial^A}{\partial x}$) indicam em qual das funções estes atuam.

7.1.4 A função de Wigner

A função de Wigner nos é dada quando tomamos a transformada de Weyl do operador densidade de estado. Através de (7.69) ou (7.71) temos

$$W(x, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \int du \langle x+u | \hat{\rho}(t) | x-u \rangle \exp\left(-\frac{2ipu}{\hbar}\right), \quad (7.86)$$

$$= \frac{1}{\pi\hbar} \int dv \langle p+v | \hat{\rho}(t) | p-v \rangle \exp\left(\frac{2ivx}{\hbar}\right). \quad (7.87)$$

Ou ainda, por (7.83)

$$W(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \text{Tr} \left[\hat{\rho}(t) \hat{\Delta}(x, p) \right]. \quad (7.88)$$

Das formas (7.86) e (7.87) temos respectivamente (essas formas foram escolhidas por serem fáceis observar as propriedades a seguir, porém todas são equivalentes)

$$\int dp W(x, p, t) = |\psi(x, t)|^2,$$

$$\int dx W(x, p, t) = |\phi(p, t)|^2,$$

sendo $\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$ (função de amplitude de probabilidade na coordenada de posição)

e $\phi(p, t) = \langle p | \phi(t) \rangle$ (função de amplitude de probabilidade na coordenada de momento).

Integrando a função de Wigner nas duas variáveis temos

$$\int dx \int dp W(x, p, t) = \int dx |\psi(x, t)|^2 = \int dp |\phi(p, t)|^2.$$

Para obtermos o valor médio de um operador \hat{A} num sistema quântico descrito pela função de estado $|\psi(t)\rangle$

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \text{Tr} [\hat{\rho}(t) \hat{A}].$$

Pelo formalismo da transformada de Weyl temos, segundo (7.82), que o valor médio de \hat{A} pode ser obtido fazendo

$$\langle \hat{A} \rangle = \int dx \int dp A(x, p) W(x, p, t),$$

sendo $A(x, p)$ a transformada de Weyl do operador \hat{A} .

Pela definição (7.88), utilizando a forma do operador $\hat{\Delta}(x, p)$ apresentada em (7.72) e tomando o traço segundo o espaço dos momentos

$$\begin{aligned} W(x, p, t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_1 \langle p_1 | \hat{\rho}(t) \hat{\Delta}(x, p) | p_1 \rangle \Rightarrow \\ \Rightarrow W(x, p, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left[\left(\frac{\hbar}{2i} \right) \frac{\partial^2}{\partial x \partial p} \right] \exp \left(\frac{ixp}{\hbar} \right) \phi(p, t) \psi^*(x, t). \end{aligned} \quad (7.89)$$

Se por outro lado utilizarmos as mesmas expressões, porém tomarmos o traço segundo o espaço das coordenadas teremos

$$\begin{aligned} W(x, p, t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx_1 \langle x_1 | \hat{\rho}(t) \hat{\Delta}(x, p) | x_1 \rangle \Rightarrow \\ \Rightarrow W(x, p, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left[\left(-\frac{\hbar}{2i} \right) \frac{\partial^2}{\partial x \partial p} \right] \exp \left(-\frac{ixp}{\hbar} \right) \phi^*(p, t) \psi(x, t). \end{aligned} \quad (7.90)$$

Podemos ver que o lado direito da expressão (7.89) é exatamente o complexo conjugado do lado direito da expressão (7.90). Isso nos leva a concluir que a função de Wigner é sempre real.

Outra característica da função de Wigner está relacionada ao seu módulo. Através de sua definição temos

$$\begin{aligned} W(x, p, t) &= \frac{1}{\pi\hbar} \int du \langle x+u | \hat{\rho}(t) | x-u \rangle \exp\left(-\frac{2ipu}{\hbar}\right) \Rightarrow \\ \Rightarrow W(x, p, t) &= \frac{1}{\pi\hbar} \int du \psi^*(x-u, t) \psi(x+u, t) \exp\left(-\frac{2ipu}{\hbar}\right) \Rightarrow \\ \Rightarrow |W(x, p, t)|^2 &\leq \left\{ \frac{1}{\pi\hbar} \int du |\psi(x-u, t)|^2 \right\} \left\{ \frac{1}{\pi\hbar} \int du |\psi(x+u, t)|^2 \right\} \Rightarrow \\ &\Rightarrow |W(x, p, t)| \leq \frac{1}{\pi\hbar}. \end{aligned}$$

Outras propriedades da função de Wigner - sistemas ortogonais

Da definição da função de Wigner dada em (7.86) temos

$$W(x, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \int du \langle x+u | \hat{\rho}(t) | x-u \rangle \exp\left(-\frac{2ipu}{\hbar}\right).$$

Supondo que $|\psi(t)\rangle$ possa ser escrita como uma combinação linear dos auto-estados $|n\rangle$ de um hamiltoniano \hat{H} temos

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |n\rangle,$$

o que nos levará a uma expressão $\hat{\rho}(t)$ da seguinte forma

$$\hat{\rho}(t) = \sum_n \sum_m a_n(t) a_m^*(t) |n\rangle \langle m|,$$

que substituída na expressão para a equação de Wigner ficará

$$\begin{aligned} W(x, p, t) &= \sum_n \sum_m a_n(t) a_m^*(t) \frac{1}{\pi\hbar} \int du \langle x+u | n \rangle \langle m | x-u \rangle \exp\left(-\frac{2ipu}{\hbar}\right) \Rightarrow \\ \Rightarrow W(x, p, t) &= \sum_n \sum_m a_n(t) a_m^*(t) \frac{1}{\pi\hbar} \int du \phi_m^*(x-u) \phi_n(x+u) \exp\left(-\frac{2ipu}{\hbar}\right), \end{aligned}$$

sendo $\phi_n(x)$ auto-funções do hamiltoniano do sistema.

Podemos definir

$$\omega_{mn}(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int du \phi_m^*(x-u) \phi_n(x+u) \exp\left(-\frac{2ipu}{\hbar}\right),$$

e a função de Wigner poderá então ser escrita como

$$W(x, p, t) = \sum_n \sum_m a_n(t) a_m^*(t) \omega_{mn}(x, p).$$

As funções $\omega_{mn}(x, p)$ formam um sistema ortogonal completo no espaço de fase (x, p) , com as seguintes propriedades

$$\int dx \int dp \omega_{m',n'}^*(x, p) \omega_{mn}(x, p) = \frac{\delta_{m,m'} \delta_{n,n'}}{2\pi\hbar}, \quad (7.91)$$

$$\sum_m \sum_n \omega_{mn}^*(x', p') \omega_{mn}(x, p) = \frac{\delta(x' - x) \delta(p' - p)}{2\pi\hbar}. \quad (7.92)$$

Utilizando estas propriedades podemos encontrar as amplitudes de ocupação de cada função $\omega_{mn}(x, p)$ de uma dada função de Wigner $W(x, p, t)$

$$a_n(t) a_m^*(t) = 2\pi\hbar \int dx \int dp \omega_{mn}^*(x, p) W(x, p, t).$$

Através dessa fórmula é fácil encontrar a probabilidade de ocupação de um determinado nível de energia de um sistema quântico através de sua função de Wigner. Assim, a probabilidade de que num determinado instante t o sistema se encontre no nível energético k será

$$P_k(t) = |a_k(t)|^2 = 2\pi\hbar \int dx \int dp \omega_{kk}^*(x, p) W(x, p, t).$$

7.2 Função de Wigner para sistemas de dois estados

7.2.1 Representação de Heisenberg

Antes de tratarmos a função de Wigner para sistemas de dois estados convém mudarmos o formalismo adotado para a resolução da função de estado que descreve o sistema. Até agora utilizamos a representação de Schrödinger, porém, de agora em diante utilizaremos a representação de Heisenberg.

Para obtermos a função de estado na representação de Heisenberg, a partir da função dada na representação de Schrödinger, devemos fazer

$$|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_H(t_0)\rangle.$$

Os índices nas funções de estado indicam a representação das quais são provenientes. O operador $\hat{U}(t, t_0)$ é definido de tal forma que

$$\hat{U}(t_1, t_1) = 1,$$

$$\hat{U}^\dagger(t_2, t_1) = \hat{U}^{-1}(t_2, t_1) = \hat{U}(t_1, t_2).$$

A equação temporal para $\hat{U}(t, t_0)$ é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}_S \hat{U}(t, t_0),$$

sendo \hat{H}_S o hamiltoniano segundo o formalismo de Schrödinger. Desta maneira

$$|\psi_S(t_0)\rangle = |\psi_H(t_0)\rangle.$$

Ao contrário da representação de Schrödinger, na representação de Heisenberg a função de estado é constante no tempo, ficando a variação temporal do valor de um observável físico dependente da variação temporal do operador associado a ele. Por conta disso, utilizaremos

$$t_0 = 0$$

$$|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}(t, 0) |\psi_H\rangle.$$

Na representação de Schrödinger um certo observável O , ao qual associamos um operador \hat{O}_S tem seu valor esperado dado por

$$\begin{aligned} O(t) &= \langle \psi_S(t) | \hat{O}_S | \psi_S(t) \rangle = \\ &= \langle \psi_H | \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{O}_S \hat{U}(t, 0) | \psi_H \rangle = \\ &= \langle \psi_H | \hat{O}_H(t) | \psi_H \rangle. \end{aligned}$$

Assim,

$$\hat{O}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{O}_S \hat{U}(t, 0).$$

A variação temporal do operador $\hat{O}_H(t)$ é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \hat{O}_H(t)}{\partial t} = [\hat{O}_H(t), \hat{H}_H(t)] = \hat{U}^\dagger(t, 0) [\hat{O}_S, \hat{H}_S] \hat{U}(t, 0), \quad (7.93)$$

$$\hat{H}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{H}_S \hat{U}(t, 0).$$

Se o operador \hat{O}_S for um produto de outros operadores na representação de Schrödinger, ou seja

$$\hat{O}_S = \hat{A}_S \hat{B}_S \dots \hat{N}_S,$$

então

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{O}_S \hat{U}(t, 0) &= \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{A}_S \hat{B}_S \hat{C}_S \dots \hat{N}_S \hat{U}(t, 0) = \\ &= \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{A}_S \underbrace{\hat{U}(t, 0) \hat{U}^\dagger(t, 0)}_1 \hat{B}_S \hat{U}(t, 0) \dots \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{N}_S \hat{U}(t, 0) = \\ &= \underbrace{\hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{A}_S \hat{U}(t, 0)} \underbrace{\hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{B}_S \hat{U}(t, 0)} \dots \underbrace{\hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{N}_S \hat{U}(t, 0)} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \hat{O}_H(t) = \hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t) \hat{C}_H(t) \dots \hat{N}_H(t). \end{aligned}$$

Portanto, dado um operador, o qual é produto de outros operadores, na representação de Schrödinger, basta substituir cada um dos operadores do produto pelo seu correspondente na representação de Heisenberg para obtermos o correspondente de todo o produto nesta representação.

7.2.2 O operador $\hat{\Delta}(x, p)$ na representação de Heisenberg

Na representação de Heisenberg, o operador $\hat{\Delta}_H(x, p, t)$ é escrito como

$$\hat{\Delta}_H(x, p, t) = \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{\Delta}_S(x, p) \hat{U}(t, 0).$$

Convém agora encontrarmos uma expressão para a variação temporal de $\hat{\Delta}_H(x, p, t)$. Conforme (7.93), dado um hamiltoniano $\hat{H}_H(t)$ ($\equiv \hat{H}_S(t)$)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{\Delta}_H(x, p, t)}{\partial t} &= [\hat{\Delta}_H(x, p, t), \hat{H}_H(t)] = \\ &= U^\dagger(t, 0) [\hat{\Delta}_S(x, p), \hat{H}_S(t)] U(t, 0). \end{aligned} \quad (7.94)$$

Nos concentraremos agora nas características e propriedades de $[\hat{\Delta}_S(x, p), \hat{H}_S(t)]$. Através de transformada de Weyl, podemos escrever

$$\hat{H}_S(t) = \int dx \int dp H_S(x, p, t) \hat{\Delta}_S(x, p).$$

Assim,

$$\begin{aligned} &[\hat{\Delta}_S(x, p), \int dx_1 \int dp_1 H_S(x_1, p_1, t) \hat{\Delta}_S(x_1, p_1)] = \\ &= \int dx_1 \int dp_1 H_S(x_1, p_1, t) [\hat{\Delta}_S(x, p), \hat{\Delta}_S(x_1, p_1)]. \end{aligned}$$

O produto $\hat{\Delta}(x_1, p_1) \hat{\Delta}(x_2, p_2)$, que será útil para a determinação de (7.94) e outras propriedades da função de Wigner é dado por

$$\hat{\Delta}_S(x_1, p_1) \hat{\Delta}_S(x_2, p_2) = \frac{2}{\pi\hbar} \int dx \int dp \hat{\Delta}_S(x, p) \exp \left[\frac{2i\zeta(x-\alpha)}{\hbar} - \frac{2i(p-\xi)\beta}{\hbar} \right],$$

$$\left[\hat{\Delta}_S(x_1, p_1), \hat{\Delta}_S(x_2, p_2) \right] = \frac{4i}{\pi\hbar} \int dx \int dp \hat{\Delta}_S(x, p) \sin \left[\frac{2\zeta(x-\alpha)}{\hbar} - \frac{2(p-\xi)\beta}{\hbar} \right],$$

sendo

$$\begin{cases} 2\alpha = x_1 + x_2 \\ \beta = x_1 - x_2 \\ 2\xi = p_1 + p_2 \\ \zeta = p_1 - p_2 \end{cases}.$$

Outro produto que nos será útil é

$$\left[\hat{\Delta}_S(x, p), \hat{p}^2 \right] = -2i\hbar p \frac{\partial \hat{\Delta}_S(x, p)}{\partial x}.$$

Finalmente, a variação temporal de um operador de Wigner na representação de Heisenberg é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Delta}_H(x, p, t)}{\partial t} = U^\dagger(t, 0) \left[\hat{\Delta}_S(x, p), \hat{H}_S \right] U(t, 0),$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Delta}_H(x, p, t)}{\partial t} = U^\dagger(t, 0) \left[\hat{\Delta}_S(x, p), \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \hat{V} \right] U(t, 0) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \hat{\Delta}_H(x, p, t)}{\partial t} + \frac{i\hbar p}{\mu} \frac{\partial \hat{\Delta}_H(x, p, t)}{\partial x} = U^\dagger(t, 0) \left[\hat{\Delta}_S(x, p), \hat{V}(\hat{x}) \right] U(t, 0).$$

Apêndice C

8.1 Sistema de dois níveis com decaimento: expansão em série perturbativa

8.1.1 Subsídio matemático

A solução de uma equação diferencial linear de primeira ordem do tipo

$$\frac{d\phi(\tau)}{d\tau} = A(\tau)\phi(\tau) + B(\tau), \quad (8.95)$$

é dada por

$$\phi(\tau) = \exp\left[\int_{\tau_0}^{\tau} A(\tau') d\tau'\right] \left\{ \phi(\tau_0) + \int_{\tau_0}^{\tau} \exp\left[-\int_{\tau_0}^{\tau'} A(\tau'') d\tau''\right] B(\tau') d\tau' \right\}. \quad (8.96)$$

Este resultado é interessante pois todas as equações que trataremos a seguir poderão ser reduzidas à forma (8.95).

8.1.2 Sistema de dois níveis

O nosso sistema de dois níveis com decaimento pode ser escrito como

$$\frac{\partial \hat{u}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \hat{u}(x, p, t)}{\partial x} - \hat{F}(x) \frac{\partial \hat{u}(x, p, t)}{\partial p} = \hat{M}(x) \hat{u}(x, p, t), \quad (8.97)$$

sendo

$$\hat{u}(x, p, t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(x, p, t) \\ \rho_{12}(x, p, t) \\ \rho_{21}(x, p, t) \\ \rho_{22}(x, p, t) \end{pmatrix},$$

$$\hat{F}(x) = \begin{pmatrix} V_1'(x) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}[V_1'(x) + V_2'(x)] & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}[V_1'(x) + V_2'(x)] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_2'(x) \end{pmatrix},$$

$$\hat{M}(x) = \begin{pmatrix} 0 & i\Omega & -i\Omega & \Gamma \\ i\Omega & i\Theta(x) - \frac{\Gamma}{2} & 0 & -i\Omega \\ -i\Omega & 0 & -i\Theta(x) - \frac{\Gamma}{2} & i\Omega \\ 0 & -i\Omega & i\Omega & -\Gamma \end{pmatrix},$$

$$\Theta(x) = \frac{V_2(x) - V_1(x)}{\hbar}.$$

Podemos fazer

$$\hat{M}(x) = \Gamma \hat{M}_0(x) + i\Omega \hat{M}_1, \quad (8.98)$$

sendo

$$\hat{M}_0(x) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & i\frac{\Theta(x)}{\Gamma} - \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\frac{\Theta(x)}{\Gamma} - \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (8.99)$$

$$\hat{M}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.100)$$

Substituindo (8.98) em (8.97) e colocando Γ em evidência no segundo membro da equação temos

$$\frac{\partial \hat{u}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \hat{u}(x, p, t)}{\partial x} - \hat{F}(x) \frac{\partial \hat{u}(x, p, t)}{\partial p} = \Gamma \left[\hat{M}_0(x) + i \left(\frac{\Omega}{\Gamma} \right) \hat{M}_1 \right] \hat{u}(x, p, t).$$

Podemos desta maneira definir

$$\frac{\Omega}{\Gamma} = \lambda,$$

e a equação ficará

$$\frac{\partial \hat{u}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \hat{u}(x, p, t)}{\partial x} - \hat{F}(x) \frac{\partial \hat{u}(x, p, t)}{\partial p} = \Gamma \hat{M}_0(x) \hat{u}(x, p, t) + i\lambda \Gamma \hat{M}_1 \hat{u}(x, p, t). \quad (8.101)$$

Isto nos permite supor que uma solução para $\hat{u}(x, p, t)$ pode ser escrita como uma série de potências de λ

$$\hat{u}(x, p, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \hat{u}^{(n)}(x, p, t), \quad (8.102)$$

$$\hat{u}^{(n)}(x, p, t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}^{(n)}(x, p, t) \\ \rho_{12}^{(n)}(x, p, t) \\ \rho_{21}^{(n)}(x, p, t) \\ \rho_{22}^{(n)}(x, p, t) \end{pmatrix}.$$

Substituindo (8.102) em (8.101) temos

$$\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \left[\frac{\partial \hat{u}^{(n)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \hat{u}^{(n)}(x, p, t)}{\partial x} - \hat{F}(x) \frac{\partial \hat{u}^{(n)}(x, p, t)}{\partial p} \right] =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \Gamma \hat{M}_0(x) \hat{u}^{(n)}(x, p, t) + \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^{n+1} i \Gamma \hat{M}_1 \hat{u}^{(n)}(x, p, t),$$

o que nos fornece uma série de equações recorrentes

$$\frac{\partial \hat{u}^{(0)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \hat{u}^{(0)}(x, p, t)}{\partial x} - \hat{F}(x) \frac{\partial \hat{u}^{(0)}(x, p, t)}{\partial p} = \Gamma \hat{M}_0(x) \hat{u}^{(0)}(x, p, t)$$

$$\frac{\partial \hat{u}^{(1)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \hat{u}^{(1)}(x, p, t)}{\partial x} - \hat{F}(x) \frac{\partial \hat{u}^{(1)}(x, p, t)}{\partial p} =$$

$$= \Gamma \hat{M}_0(x) \hat{u}^{(1)}(x, p, t) + i \Gamma \hat{M}_1 \hat{u}^{(0)}(x, p, t)$$

$$\frac{\partial \hat{u}^{(2)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \hat{u}^{(2)}(x, p, t)}{\partial x} - \hat{F}(x) \frac{\partial \hat{u}^{(2)}(x, p, t)}{\partial p} =$$

$$= \Gamma \hat{M}_0(x) \hat{u}^{(2)}(x, p, t) + i \Gamma \hat{M}_1 \hat{u}^{(1)}(x, p, t)$$

$$\vdots$$

$$\frac{\partial \hat{u}^{(n)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \hat{u}^{(n)}(x, p, t)}{\partial x} - \hat{F}(x) \frac{\partial \hat{u}^{(n)}(x, p, t)}{\partial p} =$$

$$= \Gamma \hat{M}_0(x) \hat{u}^{(n)}(x, p, t) + i \Gamma \hat{M}_1 \hat{u}^{(n-1)}(x, p, t) \quad (8.103)$$

Examinaremos agora o caso particular em que

$$\begin{cases} V_1(x) = 0 \\ V_2(x) = ax + b \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Theta(x) = \frac{1}{\hbar} (ax + b),$$

$$\begin{cases} \lambda = 0 & \text{se } t < 0, \\ \lambda \neq 0 & \text{se } t \geq 0. \end{cases}$$

Suporemos também que no instante $t = 0$ o sistema esteja no estado fundamental

$$\rho_{12}(x, p, 0) = \rho_{21}(x, p, 0) = \rho_{22}(x, p, 0) = 0$$

Vejamos agora a forma de cada um dos termos de (8.102):

8.1.3 Termos referentes a λ^0

Segundo (8.99) e (8.103) temos para cada uma das componentes de $\hat{u}^{(0)}(x, p, t)$

$$\hat{u}^{(0)}(x, p, t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}^{(0)}(x, p, t) \\ \rho_{12}^{(0)}(x, p, t) \\ \rho_{21}^{(0)}(x, p, t) \\ \rho_{22}^{(0)}(x, p, t) \end{pmatrix},$$

$$\hat{M}_0(x) \hat{u}^{(0)}(x, p, t) = \begin{pmatrix} \rho_{22}^{(0)}(x, p, t) \\ \left[i \frac{\Theta(x)}{\Gamma} - \frac{1}{2} \right] \rho_{12}^{(0)}(x, p, t) \\ - \left[i \frac{\Theta(x)}{\Gamma} + \frac{1}{2} \right] \rho_{21}^{(0)}(x, p, t) \\ - \rho_{22}^{(0)}(x, p, t) \end{pmatrix},$$

Temos então

$$\frac{\partial \rho_{11}^{(0)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{11}^{(0)}(x, p, t)}{\partial x} = \Gamma \rho_{22}^{(0)}(x, p, t), \quad (8.104)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{12}^{(0)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{12}^{(0)}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{a}{2} \frac{\partial \rho_{12}^{(0)}(x, p, t)}{\partial p} &= \\ &= \left[\frac{i}{\hbar} (ax + b) - \frac{\Gamma}{2} \right] \rho_{12}^{(0)}(x, p, t), \end{aligned} \quad (8.105)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{21}^{(0)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{21}^{(0)}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{a}{2} \frac{\partial \rho_{21}^{(0)}(x, p, t)}{\partial p} &= \\ &= - \left[\frac{i}{\hbar} (ax + b) + \frac{\Gamma}{2} \right] \rho_{21}^{(0)}(x, p, t), \end{aligned} \quad (8.106)$$

$$\frac{\partial \rho_{22}^{(0)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{22}^{(0)}(x, p, t)}{\partial x} - a \frac{\partial \rho_{22}^{(0)}(x, p, t)}{\partial p} = -\Gamma \rho_{22}^{(0)}(x, p, t). \quad (8.107)$$

Fazendo em (8.107) a seguinte substituição

$$\begin{cases} x \rightarrow \bar{x}(\tau), \\ p \rightarrow \bar{p}(\tau), \\ t \rightarrow \bar{t}(\tau), \end{cases}$$

tal que

$$\begin{cases} \frac{d\bar{x}(\tau)}{d\tau} = \frac{\bar{p}(\tau)}{\mu} \\ \frac{d\bar{p}(\tau)}{d\tau} = -a \\ \frac{d\bar{t}(\tau)}{d\tau} = 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \bar{x}(\tau) = \bar{x}(\tau') + \frac{\bar{p}(\tau')}{\mu}(\tau - \tau') - \frac{a}{2\mu}(\tau - \tau')^2 \\ \bar{p}(\tau) = \bar{p}(\tau') - a(\tau - \tau') \\ \bar{t}(\tau) = \tau \end{cases}$$

isto fará com que

$$\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \frac{d}{d\tau},$$

e desta maneira, a equação tomará a forma

$$\frac{d\rho_{22}^{(0)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau))}{d\tau} = -\Gamma \rho_{22}^{(0)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau))$$

Vale destacar que esta forma é análoga a (8.95) com $A(\tau) = -\Gamma$ e $B(\tau) = 0$

$$\begin{aligned} \rho_{22}^{(0)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)) &= \exp(-\Gamma\tau) \rho_{22}^{(0)}(\bar{x}(0), \bar{p}(0), \bar{t}(0)) \\ &= \exp(-\Gamma\tau) \rho_{22}^{(0)}\left(\bar{x}(\tau) - \frac{\bar{p}(\tau)}{\mu}\tau - \frac{a}{2\mu}\tau^2, \bar{p}(\tau) + a\tau, 0\right) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \rho_{22}^{(0)}(x, p, t) = \exp(-\Gamma t) \rho_{22}^{(0)}\left(x - \frac{pt}{\mu} - \frac{at^2}{2\mu}, p + at, 0\right) \end{aligned}$$

Porém, devido à imposição que $\rho_{22}^{(0)}(x, p, 0) = 0$, temos

$$\rho_{22}^{(0)}(x, p, t) = 0$$

Vejamos agora a solução de (8.104). Nela faremos

$$\begin{cases} x \rightarrow \bar{x}(\tau), \\ p \rightarrow \bar{p}(\tau), \\ t \rightarrow \bar{t}(\tau), \end{cases}$$

tal que

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{array}{l} \frac{d\bar{x}(\tau)}{d\tau} = \frac{\bar{p}(\tau)}{\mu} \\ \frac{d\bar{p}(\tau)}{d\tau} = 0 \\ \frac{d\bar{t}(\tau)}{d\tau} = 1 \end{array} \right. \Rightarrow \\ & \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \bar{x}(\tau) = \bar{x}(\tau') + \frac{\bar{p}(\tau')}{\mu} (\tau - \tau') \\ \bar{p}(\tau) = \bar{p}(\tau') \\ \bar{t}(\tau) = \tau \end{array} \right. \\ & \frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \frac{d}{d\tau}, \\ & \frac{d\rho_{11}^{(0)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau))}{d\tau} = \Gamma \rho_{22}^{(0)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)). \end{aligned}$$

Novamente, fazendo uma analogia com (8.95),

$$\left\{ \begin{array}{l} A(\tau) = 0, \\ B(\tau) = \Gamma \rho_{22}^{(0)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)) = 0. \end{array} \right.$$

A solução será então

$$\begin{aligned} \rho_{11}^{(0)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)) &= \rho_{11}^{(0)}(\bar{x}(0), \bar{p}(0), \bar{t}(0)) = \\ &= \rho_{11}^{(0)}\left(\bar{x}(\tau) - \frac{\bar{p}(\tau)}{\mu}\tau, \bar{p}(\tau), 0\right) = \\ &= f\left(\bar{x}(\tau) - \frac{\bar{p}(\tau)}{\mu}\tau, \bar{p}(\tau)\right) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \rho_{11}^{(0)}(x, p, t) = f\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right). \end{aligned}$$

Quanto a (8.105) e (8.106), fazendo

$$\left\{ \begin{array}{l} x \rightarrow \bar{x}(\tau), \\ p \rightarrow \bar{p}(\tau), \\ t \rightarrow \bar{t}(\tau), \end{array} \right.$$

tal que

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{array}{l} \frac{d\bar{x}(\tau)}{d\tau} = \frac{\bar{p}(\tau)}{\mu} \\ \frac{d\bar{p}(\tau)}{d\tau} = -\frac{a}{2} \\ \frac{d\bar{t}(\tau)}{d\tau} = 1 \end{array} \right. \Rightarrow \\ & \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \bar{x}(\tau) = \bar{x}(\tau') + \frac{\bar{p}(\tau')}{\mu} (\tau - \tau') - \frac{a}{4\mu} (\tau - \tau')^2, \\ \bar{p}(\tau) = \bar{p}(\tau') - \frac{a}{2} (\tau - \tau'), \\ \bar{t}(\tau) = \tau, \end{array} \right. \\ & \frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{a}{2} \frac{\partial}{\partial p} \rightarrow \frac{d}{d\tau}, \end{aligned}$$

lembrando que

$$\begin{cases} \rho_{12}(x, p, 0) = 0 \Rightarrow \rho_{12}^{(0)}(x, p, 0) = 0, \\ \rho_{21}(x, p, 0) = 0 \Rightarrow \rho_{21}^{(0)}(x, p, 0) = 0, \end{cases}$$

chegaremos à solução

$$\begin{cases} \rho_{12}^{(0)}(x, p, t) = 0, \\ \rho_{21}^{(0)}(x, p, t) = 0. \end{cases}$$

Podemos assim escrever

$$\hat{u}^{(0)}(x, p, t) = \begin{pmatrix} f\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.108)$$

Vamos agora para o próximo termo da expansão

Termos referentes a λ^1

Conforme (8.99), (8.100), (8.103) e (8.108)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{u}^{(1)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \hat{u}^{(1)}(x, p, t)}{\partial x} - \hat{F}(x) \frac{\partial \hat{u}^{(1)}(x, p, t)}{\partial p} &= \\ &= \Gamma \hat{M}_0(x) \hat{u}^{(1)}(x, p, t) + i\Gamma \hat{M}_1 \hat{u}^{(0)}(x, p, t), \\ \hat{M}_1 \hat{u}^{(0)}(x, p, t) &= \begin{pmatrix} 0 \\ f\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right) \\ -f\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right) \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{M}_0(x) \hat{u}^{(1)}(x, p, t) &= \begin{pmatrix} \rho_{22}^{(1)}(x, p, t) \\ \left[i \frac{\Theta(x)}{\Gamma} - \frac{1}{2} \right] \rho_{12}^{(1)}(x, p, t) \\ - \left[i \frac{\Theta(x)}{\Gamma} + \frac{1}{2} \right] \rho_{21}^{(1)}(x, p, t) \\ -\rho_{22}^{(1)}(x, p, t) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

assim

$$\frac{\partial \rho_{11}^{(1)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{11}^{(1)}(x, p, t)}{\partial x} = \Gamma \rho_{22}^{(1)}(x, p, t), \quad (8.109)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{12}^{(1)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{12}^{(1)}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{a}{2} \frac{\partial \rho_{12}^{(1)}(x, p, t)}{\partial p} &= \\ = \left[\frac{i}{\hbar} (ax + b) - \frac{\Gamma}{2} \right] \rho_{12}^{(1)}(x, p, t) + i\Gamma f\left(x - \frac{pt}{\mu}, p\right), \end{aligned} \quad (8.110)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho_{21}^{(1)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{21}^{(1)}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{a}{2} \frac{\partial \rho_{21}^{(1)}(x, p, t)}{\partial p} = \\ & = - \left[\frac{i}{\hbar} (ax + b) + \frac{\Gamma}{2} \right] \rho_{21}^{(1)}(x, p, t) - i\Gamma f \left(x - \frac{pt}{\mu}, p \right), \end{aligned} \quad (8.111)$$

$$\frac{\partial \rho_{22}^{(1)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{22}^{(1)}(x, p, t)}{\partial x} - a \frac{\partial \rho_{22}^{(1)}(x, p, t)}{\partial p} = -\Gamma \rho_{22}^{(1)}(x, p, t). \quad (8.112)$$

O procedimento para a solução das equações (8.109), (8.110), (8.111) e (8.112) são os mesmos adotados para (8.104), (8.105), (8.106) e (8.107), porém, nos concentraremos na solução de (8.110) e (8.111) apenas, pois as soluções de (8.109) e (8.112) são

$$\begin{cases} \rho_{11}^{(1)}(x, p, t) = 0, \\ \rho_{22}^{(1)}(x, p, t) = 0. \end{cases}$$

Faremos em (8.105)

$$\begin{cases} x \rightarrow \bar{x}(\tau), \\ p \rightarrow \bar{p}(\tau), \\ t \rightarrow \bar{t}(\tau), \end{cases}$$

tal que

$$\begin{aligned} & \begin{cases} \frac{d\bar{x}(\tau)}{d\tau} = \frac{\bar{p}(\tau)}{\mu} \\ \frac{d\bar{p}(\tau)}{d\tau} = -\frac{a}{2} \\ \frac{d\bar{t}(\tau)}{d\tau} = 1 \end{cases} \Rightarrow \\ & \Rightarrow \begin{cases} \bar{x}(\tau) = \bar{x}(\tau') + \frac{\bar{p}(\tau')}{\mu} (\tau - \tau') - \frac{a}{4\mu} (\tau - \tau')^2, \\ \bar{p}(\tau) = \bar{p}(\tau') - \frac{a}{2} (\tau - \tau'), \\ \bar{t}(\tau) = \tau, \end{cases} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{12}^{(1)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau))}{d\tau} &= \left\{ \frac{i}{\hbar} [a\bar{x}(\tau) + b] - \frac{\Gamma}{2} \right\} \rho_{12}^{(1)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)) + \\ & i\Gamma f \left(\bar{x}(\tau) - \frac{\bar{p}(\tau)\bar{t}(\tau)}{\mu}, \bar{p}(\tau) \right). \end{aligned}$$

Temos, conforme (8.95)

$$\begin{cases} A(\tau) = \frac{i}{\hbar} [a\bar{x}(\tau) + b] - \frac{\Gamma}{2}, \\ B(\tau) = i\Gamma f \left(\bar{x}(\tau) - \frac{\bar{p}(\tau)\bar{t}(\tau)}{\mu}, \bar{p}(\tau) \right), \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \int_0^{\tau'} A(\tau'') d\tau'' &= \frac{ia}{\hbar} \left\{ \bar{x}(\tau) \tau' + \frac{\bar{p}(\tau)}{\mu} \left[\frac{(\tau' - \tau)^2}{2} - \frac{\tau^2}{2} \right] - \frac{a}{4\mu} \left[\frac{(\tau' - \tau)^3}{3} + \frac{\tau^3}{3} \right] \right\} + \\ & \left(\frac{ib}{\hbar} - \frac{\Gamma}{2} \right) \tau', \end{aligned}$$

$$\rho_{12}^{(1)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)) = \exp \left[\int_0^\tau A(\tau') d\tau' \right] \left\{ \rho_{12}^{(1)}(\bar{x}(0), \bar{p}(0), \bar{t}(0)) + i\Gamma \int_0^\tau \exp \left[- \int_0^{\tau'} A(\tau'') d\tau'' \right] f \left(\bar{x}(\tau') - \frac{\bar{p}(\tau') \bar{t}(\tau')}{\mu}, \bar{p}(\tau') \right) d\tau' \right\}.$$

Sabendo que

$$\rho_{12}^{(1)}(\bar{x}(0), \bar{p}(0), \bar{t}(0)) = 0,$$

então

$$\begin{aligned} & \rho_{12}^{(1)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)) = \\ & = i\Gamma \int_0^\tau \exp \left[\int_0^{\tau'} A(\tau'') d\tau'' - \int_0^{\tau'} A(\tau'') d\tau'' \right] f \left(\bar{x}(\tau') - \frac{\bar{p}(\tau') \bar{t}(\tau')}{\mu}, \bar{p}(\tau') \right) d\tau' \Rightarrow \\ \Rightarrow & \rho_{12}^{(1)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)) = i\Gamma \int_0^\tau \exp \left[\int_{\tau'}^\tau A(\tau'') d\tau'' \right] f \left(\bar{x}(\tau') - \frac{\bar{p}(\tau') \bar{t}(\tau')}{\mu}, \bar{p}(\tau') \right) d\tau', \\ & \int_0^\tau A(\tau'') d\tau'' - \int_0^{\tau'} A(\tau'') d\tau'' = \frac{ia}{\hbar} \left[\bar{x}(\tau) (\tau - \tau') - \frac{\bar{p}(\tau) (\tau - \tau')^2}{\mu} - \right. \\ & \quad \left. - \frac{a (\tau - \tau')^3}{4\mu} \right] + \left(\frac{ib}{\hbar} - \frac{\Gamma}{2} \right) (\tau - \tau'), \\ & \rho_{12}^{(1)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)) = i\Gamma \int_0^\tau d\tau' \exp \left\{ \frac{ia}{\hbar} \left[\bar{x}(\tau) (\tau - \tau') - \frac{\bar{p}(\tau) (\tau - \tau')^2}{\mu} - \right. \right. \\ & \quad \left. \left. \frac{a (\tau - \tau')^3}{4\mu} \right] + \left(\frac{ib}{\hbar} - \frac{\Gamma}{2} \right) (\tau - \tau') \right\} \times \\ & \quad \times f \left(\bar{x}(\tau) - \frac{\bar{p}(\tau)}{\mu} \tau - \frac{a}{4\mu} (\tau^2 - \tau'^2), \bar{p}(\tau) + \frac{a}{2} (\tau - \tau') \right) \Rightarrow \\ \Rightarrow & \rho_{12}^{(1)}(x, p, t) = i\Gamma \int_0^t dt' \exp \left\{ \frac{ia(t-t')}{\hbar} \left[x - \frac{p(t-t')}{\mu} - \frac{a(t-t')^2}{4\mu} \right] + \right. \\ & \quad \left. \left(\frac{ib}{\hbar} - \frac{\Gamma}{2} \right) (t-t') \right\} f \left(x - \frac{pt}{\mu} - \frac{a}{4\mu} (t^2 - t'^2), p + \frac{a}{2} (t-t') \right). \end{aligned} \quad (8.113)$$

Solucionando (8.111) temos

$$\begin{aligned} \rho_{21}^{(1)}(x, p, t) & = -i\Gamma \int_0^t dt' \exp \left\{ -\frac{ia(t-t')}{\hbar} \left[x - \frac{p(t-t')}{\mu} - \frac{a(t-t')^2}{4\mu} \right] - \right. \\ & \quad \left. \left(\frac{ib}{\hbar} + \frac{\Gamma}{2} \right) (t-t') \right\} f \left(x - \frac{pt}{\mu} - \frac{a}{4\mu} (t^2 - t'^2), p + \frac{a}{2} (t-t') \right), \end{aligned} \quad (8.114)$$

e finalmente

$$\hat{u}^{(1)}(x, p, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho_{12}^{(1)}(x, p, t) \\ \rho_{21}^{(1)}(x, p, t) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

8.1.4 Termos referentes a λ^2

Quanto ao termo de segunda ordem de $\hat{u}(x, p, t)$ temos

$$\hat{M}_1 \hat{u}^{(1)}(x, p, t) = \begin{pmatrix} \rho_{12}^{(1)}(x, p, t) - \rho_{21}^{(1)}(x, p, t) \\ 0 \\ 0 \\ -\rho_{12}^{(1)}(x, p, t) + \rho_{21}^{(1)}(x, p, t) \end{pmatrix},$$

$$\hat{M}_0(x) \hat{u}^{(2)}(x, p, t) = \begin{pmatrix} \rho_{22}^{(2)}(x, p, t) \\ \left[i \frac{\Theta(x)}{\Gamma} - \frac{1}{2} \right] \rho_{12}^{(2)}(x, p, t) \\ - \left[i \frac{\Theta(x)}{\Gamma} + \frac{1}{2} \right] \rho_{21}^{(2)}(x, p, t) \\ -\rho_{22}^{(2)}(x, p, t) \end{pmatrix},$$

$$\frac{\partial \rho_{11}^{(2)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{11}^{(2)}(x, p, t)}{\partial x} =$$

$$= \Gamma \rho_{22}^{(2)}(x, p, t) + i\Gamma \left[\rho_{12}^{(1)}(x, p, t) - \rho_{21}^{(1)}(x, p, t) \right], \quad (8.115)$$

$$\frac{\partial \rho_{12}^{(2)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{12}^{(2)}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{a}{2} \frac{\partial \rho_{12}^{(2)}(x, p, t)}{\partial p} =$$

$$= \left[\frac{i}{\hbar} (ax + b) - \frac{\Gamma}{2} \right] \rho_{12}^{(2)}(x, p, t), \quad (8.116)$$

$$\frac{\partial \rho_{21}^{(2)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{21}^{(2)}(x, p, t)}{\partial x} - \frac{a}{2} \frac{\partial \rho_{21}^{(2)}(x, p, t)}{\partial p} =$$

$$= - \left[\frac{i}{\hbar} (ax + b) + \frac{\Gamma}{2} \right] \rho_{21}^{(2)}(x, p, t), \quad (8.117)$$

$$\frac{\partial \rho_{22}^{(2)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{22}^{(2)}(x, p, t)}{\partial x} - a \frac{\partial \rho_{22}^{(2)}(x, p, t)}{\partial p} = -\Gamma \rho_{22}^{(2)}(x, p, t) -$$

$$i\Gamma \left[\rho_{12}^{(1)}(x, p, t) - \rho_{21}^{(1)}(x, p, t) \right]. \quad (8.118)$$

Nos concentraremos apenas na solução de (8.118). Sabendo que

$$\begin{aligned} \rho_{12}^{(1)}(x, p, t) &= \rho_{21}^{(1)*}(x, p, t) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \rho_{12}^{(1)}(x, p, t) - \rho_{21}^{(1)}(x, p, t) = 2i \operatorname{Im} \left[\rho_{12}^{(1)}(x, p, t) \right] \\ \frac{\partial \rho_{22}^{(2)}(x, p, t)}{\partial t} + \frac{p}{\mu} \frac{\partial \rho_{22}^{(2)}(x, p, t)}{\partial x} - a \frac{\partial \rho_{22}^{(2)}(x, p, t)}{\partial p} &= -\Gamma \rho_{22}^{(2)}(x, p, t) + 2\Gamma \operatorname{Im} \left[\rho_{12}^{(1)}(x, p, t) \right]. \end{aligned}$$

Adotando o mesmo procedimento utilizado na resolução de (8.107)

$$\frac{d\rho_{22}^{(2)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau))}{d\tau} = -\Gamma \rho_{22}^{(2)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)) + 2\Gamma \operatorname{Im} \left[\rho_{12}^{(1)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)) \right],$$

sendo

$$\begin{cases} \bar{x}(\tau) = \bar{x}(\tau') + \frac{\bar{p}(\tau')}{\mu}(\tau - \tau') - \frac{a}{2\mu}(\tau - \tau')^2, \\ \bar{p}(\tau) = \bar{p}(\tau') - a(\tau - \tau'), \\ \bar{t}(\tau) = \tau. \end{cases} \quad (8.119)$$

Por analogia a (8.95)

$$\begin{cases} A(\tau) = -\Gamma, \\ B(\tau) = 2\Gamma \operatorname{Im} \left[\rho_{12}^{(1)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)) \right]. \end{cases}$$

Impondo que $\rho_{22}^{(2)}(x, p, 0) = 0$

$$\begin{aligned} \rho_{22}^{(2)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)) &= \exp \left[-\Gamma \int_0^\tau d\tau' \right] \times \\ &\times \left\{ \int_0^\tau \exp \left[\Gamma \int_0^{\tau'} d\tau'' \right] 2\Gamma \operatorname{Im} \left[\rho_{12}^{(1)}(\bar{x}(\tau'), \bar{p}(\tau'), \bar{t}(\tau')) \right] d\tau' \right\} \Rightarrow \\ \Rightarrow \rho_{22}^{(2)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)) &= 2\Gamma \int_0^\tau \exp[-\Gamma(\tau - \tau')] \operatorname{Im} \left[\rho_{12}^{(1)}(\bar{x}(\tau'), \bar{p}(\tau'), \bar{t}(\tau')) \right] d\tau' \\ &\Rightarrow \rho_{22}^{(2)}(\bar{x}(\tau), \bar{p}(\tau), \bar{t}(\tau)) = 2\Gamma \int_0^\tau \exp[-\Gamma(\tau - \tau')] \times \\ &\times \operatorname{Im} \left[\rho_{12}^{(1)} \left(\bar{x}(\tau) + \frac{\bar{p}(\tau)}{\mu}(\tau' - \tau) - \frac{a}{2\mu}(\tau' - \tau)^2, \bar{p}(\tau) - a(\tau' - \tau), \tau' \right) \right] d\tau' \end{aligned}$$

Substituindo o grupo de equações (8.119) em (8.113) e tomando a parte imaginária

$$\begin{aligned} &\operatorname{Im} \left[\rho_{12}^{(1)} \left(x + \frac{p}{\mu}(t' - t) - \frac{a}{2\mu}(t' - t)^2, p - a(t' - t), t' \right) \right] = \\ &= \Gamma \int_0^{t'} dt'' \exp \left[-\frac{\Gamma}{2}(t' - t'') \right] \cos \left\{ \frac{a}{\hbar} \left[x(t' - t'') - \frac{p}{2\mu} \left[(t - t'')^2 - (t - t')^2 \right] \right] - \right. \end{aligned}$$

$$\times f \left(x - \frac{pt}{\mu} - \frac{a}{2\mu} \left[(t^2 - t'^2) + \frac{1}{2} (t'^2 - t''^2) \right], p + a \left[(t - t') + \frac{1}{2} (t' - t'') \right] \right).$$

Temos assim

$$\begin{aligned} \rho_{22}^{(2)}(x, p, t) &= 2\Gamma^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \exp \left[-\Gamma(t - t') - \frac{\Gamma}{2}(t' - t'') \right] \times \\ &\times \cos \left(-\frac{a}{\hbar} \left\{ \frac{p}{2\mu} \left[(t - t'')^2 - (t - t')^2 \right] + \frac{a}{6\mu} \left[(t - t'')^3 - (t - t')^3 - \frac{1}{2}(t' - t'')^3 \right] \right\} + \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{ax + b}{\hbar} \right) (t' - t'') \right), \\ \rho_{22}(x, p, t) &\approx \lambda^2 \rho_{22}^{(2)}(x, p, t) \Rightarrow \\ \Rightarrow \rho_{22}(x, p, t) &\approx 2\Omega^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \exp \left[-\Gamma(t - t') - \frac{\Gamma}{2}(t' - t'') \right] \times \\ &\times \cos \left(-\frac{a}{\hbar} \left\{ \frac{p}{2\mu} \left[(t - t'')^2 - (t - t')^2 \right] + \frac{a}{6\mu} \left[(t - t'')^3 - (t - t')^3 - \frac{1}{2}(t' - t'')^3 \right] \right\} + \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{ax + b}{\hbar} \right) (t' - t'') \right) \end{aligned}$$

Temos assim uma aproximação semi-analítica para a componente da função de Wigner relacionada à população do estado excitado.