Universidade Federal de Minas Gerais Instituto de Ciências Exatas Departamento de Física

Fase de Gouy em Ondas de Matéria de Estados Gaussianos Puros e Mistos

Irismar Gonçalves da Paz

#### Fase de Gouy em Ondas de Matéria de Estados Gaussianos Puros e Mistos

Irismar Gonçalves da Paz

Orientadora: Prof.<sup>a</sup> Dra. Maria Carolina Nemes

Co-orientador: Prof. Dr. José Geraldo Peixoto de Faria

Tese apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Ciências.

> Belo Horizonte Fevereiro de 2011

O conteúdo desta tese será um capítulo do livro: Electromagnetic Waves ISBN 978-953-307-174-9 A ser publicado em junho de 2011 pela InTech - Open Access Publisher

A Rosana

## Agradecimentos

Gostaria de agradecer, em especial, a duas pessoas que foram muito importantes para o desenvolvimento do trabalho desta tese, pela paciência, incentivo e disposição, minha orientadora Prof.<sup>a</sup> Maria Carolina Nemes e meu co-orientador Prof.<sup>o</sup> José Geraldo Peixoto de Faria. Agradeço aos professores Carlos Henrique Monken e Sebastião de Pádua pelas valiosas discussões sobre a fase de Gouy. Agradeço ao Dr. Pablo Lima Saldanha pelas valiosas discussões sobre a proposta experimental para medir a fase de Gouy. Agradeço aos professores do departamento de matemática da UFPI-Picos por compreenderem minhas constantes ausências. Agradeço ao Prof.<sup>o</sup> Gilberto Damaceno pela leitura do texto. Agradeço à minha noiva Rosana Vasconcelos, à minha família e amigos pelo apoio, incentivo e compreensão. Agradeço às secretárias e bibliotecárias da pós-graduação em Física pelo auxílio ágil e carismático. Agradeço ao CNPq pelo suporte financeiro.

## Resumo

Nesta tese, estudamos aspectos teóricos e experimentais da fase de Gouy em ondas de matéria. Mostramos que esta fase está relacionada com a covariância entre posição e momento podendo ser indiretamente extraída de experimentos interferométricos. Em seguida, analisamos um experimento de difração de macro-moléculas realizado pelo grupo de A. Zeilinger [1] e mostramos que a existência de uma fase de Gouy é compatível com aqueles dados experimentais. Semelhante à fase de Gouy para ondas eletromagnéticas clássicas, mostramos que um feixe de ondas de matéria sofre uma anomalia de fase em torno do foco de uma lente quântica. Uma proposta experimental para medir esta fase é apresentada com parâmetros experimentais viáveis à tecnologia atual. Esperamos que este trabalho motive pesquisas do problema teórico, há alguns anos em aberto, e de experimentos relativos que nos levem a uma compreensão mais profunda e realista da fase de Gouy em estados mistos de ondas de matéria e de luz. Por último, apresentamos nossas conclusões.

## Abstract

In this thesis, we study theoretical and experimental aspects of the Gouy phase in matter waves. We show that this phase is related to the covariance between position and momentum and can be indirectly extracted from interferometric experiments. Next, we analyze a diffraction experiment with macro-molecules realized by Zeilinger's group [1] and we show that the existence of a Gouy phase is compatible with those experimental data. Similar to the Gouy phase for classical electromagnetic waves, it is shown that a beam of matter waves suffers a phase anomaly around the focus of a quantum lens. An experimental proposal to measure this phase is presented with experimental parameters viable to current technology. We hope this work motivates studies of the theoretical problem, open a few years ago, and for experiments that lead us to an understanding deeper and more realistic of the Gouy phase for mixed states of matter waves and light. At the end, we present our conclusions.

# Conteúdo

A	grade	ecimen	tos	iii
Re	Resumo iv			
Al	bstra	ct		v
1	Intr	odução	0	6
<b>2</b>	2 Tópicos Básicos			10
	2.1	Analog	gia entre Onda de Matéria e Onda de Luz Clássica	10
	2.2	Defini	ção da Fase de Gouy para Estados Puros	13
	2.3 Medida Indireta da Fase de Gouy		14	
		2.3.1	Experimento para Medir a Largura de um Feixe Gaussiano de Luz	17
	2.4	Feixes	de Luz Parcialmente Coerentes	20
		2.4.1	Fontes do Tipo Schell	20
3	Evi Mol	dência léculas	Indireta de Fase de Gouy em Ondas de Matéria - de Fulereno	27
	3.1	Evolu	ção de um Estado Gaussiano Puro de Ondas de Matéria	28

	3.2	Observ	vação de Efeitos Quânticos com Macromoléculas (fulerenos)	30
	3.3	Coerêr	ncia Parcial do Feixe de Fulerenos	32
		3.3.1	Efeito da Convolução com o Detetor	37
		3.3.2	Efeito da Interação de van der Waals	39
	3.4	Covari	ância $\sigma_{xp}$ e Fase de Gouy	43
		3.4.1	Fase de Gouy de um Estado Misto	43
4	Len	tes Qu	ânticas e Fase de Gouy em Ondas de Matéria	47
	4.1	Interac	ção Átomo e Campo	47
		4.1.1	Limite Ressonante	51
		4.1.2	Limite Dispersivo	52
	4.2	Lentes	Quânticas	53
		4.2.1	Introdução	53
		4.2.2	O Modelo	53
		4.2.3	Evolução de um Estado Inicial Comprimido	60
		4.2.4	Focalização de um Feixe de Átomos	66
		4.2.5	Anomalia de Fase nas Proximidades do Foco	70
	4.3	Possív	el Experimento com Átomos de Césio	70
5	Proj Inte	posta ] erferom	Experimental para Medir a Fase de Gouy Usando netria Ramsey	72
	5.1	Átomo	s de Rydberg	73
	5.2	Interfe	rometria Ramsey	73
	5.3	Lente Fina para Átomos e Analogia entre Ondas de Matéria e Luz Clássica		
	5.4	Propos	sta Experimental	78

6	Conclusões				
	6.1	Perspectivas	87		
Bi	bliog	rafia	96		

# LISTA DE FIGURAS

2.1	Interpretação da fase de Gouy	14
2.2	Arranjo experimental-Luz	17
2.3	Curva de intensidade	18
2.4	Largura e covariância para um feixe de luz gaussiano	18
2.5	Fase de Gouy-Luz	19
2.6	Fonte do tipo Schell	21
2.7	Largura de um feixe de luz do tipo Schell	24
3.1	Esboço de uma molécula de fulereno	31
3.2	Difração de moléculas de fulereno	32
3.3	Fonte incoerente	33
3.4	Arranjo experimental utilizado para difratar moléculas de fulerenc	) 33
3.5	Efeito da convolução com o detetor	39
3.6	Largura de um feixe de moléculas de fulereno	41
3.7	Covariância para os fulerenos	44
3.8	Fase de Gouy para os fulerenos	45
3.9	Fase de Gouy a partir da definição	46
4.1	Átomo de dois níveis	48

4.2	Lente quântica para átomos	54
4.3	Aproximação harmônica	56
4.4	Dinâmica do pacote de ondas-estado gaussiano	61
4.5	Dinâmica do pacote de ondas-estado comprimido	62
5.1	Esboço de uma lente fina	75
59	Arrania experimental usado para medir a fase de Couv em	
0.2	Arranjo experimental usado para medir a lase de Gouy em	
	feixes atômicos	79
		~ ~
5.3	Níveis de energia atômicos	80
5 4	Focolização do um foirre atômico	01
0.4	Focalização de um leixe atomico	81
5 5	Efeito da fase de Gouy no padrão de intensidade	82
0.0		02
5.6	Dependência do acoplamento com a posição transversa do átomo	84

Capítulo 1

### Introdução

O princípio de complementaridade, em sua completa generalidade, reflete a capacidade de entidades quânticas comportarem-se como partículas ou como ondas sobre diferentes condições experimentais [2, 3]. Logo após o início da mecânica quântica, as noções de complementaridade e incerteza foram introduzidas para destacar estas características [4, 5, 6, 7, 8], desconhecidas em física clássica. Complementaridade e incerteza continuam atraindo a atenção de pesquisadores, inspirando novos testes e demonstrações experimentais [9, 10]. Quando Schrödinger construiu a equação, a qual está no coração da mecânica quântica, ele a fez de tal maneira que o caráter dual onda-partícula fosse automaticamente incluído. Como é bem conhecido [11, 12, 13, 14], a equação paraxial para as ondas eletromagnéticas é formalmente equivalente à equação de Schrödinger bidimensional para uma partícula livre [15]. Isso implica que a fase de Gouy, presente nas soluções da equação paraxial, que corrige a óptica geométrica em relação à óptica ondulatória [16], também está presente nas soluções da equação de Schrödinger para uma partícula livre. Esta fase em ondas de matéria confirma o caráter ondulatório da entidade quântica descrita pela equação de Schrödinger. Nesta tese, estudamos este termo de fase ainda não explorado em mecânica quântica e esperamos que novos efeitos quânticos possam ser explicados a partir dele.

O deslocamento de fase que uma onda de luz convergente sofre ao ser focalizada, também conhecido como deslocamento de fase de Gouy, é um fenômeno bastante conhecido em óptica [17, 18, 19, 20, 21, 22, 23]. Este deslocamento de fase (às vezes chamado de anomalia de fase) foi primeiramente observado por Gouy em 1890 [17, 18]. Após sua observação, sua origem física e consequências têm sido objetos de estudo, especialmente nas últimas décadas [16, 24, 25, 26, 27, 28]. Embora este fenômeno seja frequentemente apresentado como uma propriedade de feixes de luz gaussianos [20], o deslocamento de fase de Gouy aparece em qualquer classe de onda que seja submetida a algum confinamento espacial transverso, seja por focalização ou difração através de pequenas aberturas. Como discutido em [28], quando uma onda é focalizada, o deslocamento de fase de Gouy é associado à propagação de  $z = -\infty$  a  $z = +\infty$  e é igual a  $\pi/2$  para ondas cilíndricas (focalização ao longo de uma dimensão), e  $\pi$  para ondas esféricas (focalização ao longo de duas dimensões). No caso de ondas difratadas, a fase de Gouy é associada à propagação a partir da abertura de difração até o infinito, correspondendo a um deslocamento de  $\pi/4(\pi/2)$  para uma dimensão (duas dimensões). Como mostrado nas Refs. [25, 29], podemos dar à fase de Gouy uma interpretação geométrica.

Experimentos em óptica clássica mostrando a existência do deslocamento de fase de Gouy foram realizados com laser contínuo [30] e laser pulsado [31, 32]. Experimentos recentes na área de óptica quântica também exibiram este efeito [33, 34]. A fase de Gouy também tem sido observada em ondas de água [35], acústica [36], superfície plasmon-poláriton [37], e em pulsos fônonpoláriton [38]. Nesta tese, mostramos que uma anomalia de fase de Gouy para ondas de matéria também pode ser observada [39, 40, 41, 42, 43] e que a mesma está relacionada com a covariância entre posição e momento que se desenvolve ao longo da dinâmica quântica [39]. Alguns efeitos relacionados com a fase de Gouy em ondas eletromagnéticas, tais como modelagem de pulso [44] e aceleração [45], comportamento espectral anômalo [46], conversores de modos [47, 48], entre outros, aparecem como questões interessantes a respeito dos efeitos da fase de Gouy em ondas de matéria. Por exemplo, a fase de Gouy em ondas de matéria pode ser usada como conversores de modos de funções de onda do centro de massa, com possíveis aplicações em informação quântica [41]. Uma outra aplicação seria estudar a transferência de momento angular orbital entre feixes Laguerre-Gauss e Hermite-Gauss de ondas de matéria e vice-versa, uma vez a tecnologia atual permite a produção de feixes de onda de matéria com momento angular orbital bem deifinido [49, 50]. Em uma publicação recente é reportada uma proposta para melhorar o poder de resolução de um microscópio eletrônico onde um feixe Laguere-Gauss de ondas de elétrons contendo um termo de fase de Gouy é o ingrendiente essencial dessa proposta [51].

A busca da fase de Gouy para ondas de matéria envolve o problema da incoerência do feixe inicial, evitado em ondas de luz pelo feixe laser. Neste sentido, as ondas de matéria se assemelham mais a um laser oscilando em diferentes modos transversos, onde a coerência espacial é apenas parcialmente obtida. A fase de Gouy para ondas de matéria foi indiretamente obtida de um experimento de difração de moléculas de fulereno realizado pelo grupo de A. Zeilinger [1]. O feixe de fulerenos é produzido termicamente depois colimado para que correlações sejam criadas. Como a colimação não é ideal, o feixe produzido é parcialmente coerente e deve ser descrito pelo formalismo de matriz densidade. Mostramos que a matriz densidade representando o estado gaussiano quântico de ondas de matéria produzidas termicamente é completamente análoga à densidade espectral cruzada representando um estado gaussiano de luz do tipo Schell, onde definimos um fator de qualidade  $\mathcal{M}$  para o feixe de ondas de matéria. Uma expressão para a fase de Gouy de um estado misto não foi obtida nesta tese. A necessidade de uma expressão para a fase de Gouy de um estado misto de ondas de matéria tornouse necessária, onde tivemos que partir para uma conjectura [39], uma vez que este problema teórico, apesar dos esforços recentes, não encontrou uma formulação adequada.

Como mencionado anteriormente, a anomalia de fase de Gouy em óptica é um fenômeno que surge devido a um confinamento espacial transverso de um feixe de luz, portanto, para obter o análogo para ondas de matéria neste sentido é necessário focalizar um feixe de ondas de matéria para vermos se tal anomalia de fase também ocorre para as mesmas. Para tal, propomos e discutimos as características de uma lente quântica a partir da interação dispersiva entre um átomo de dois níveis e um modo do campo eletromagnético. Então, evoluímos um estado gaussiano de ondas de matéria através de uma região de campo estacionário. Vimos que, para haver focalização, o estado atômico inicial deveria conter alguma compressão em momento. Obtivemos as expresões para a distância focal e cintura do feixe e definimos a magnificância M para a focalização de um feixe gaussiano de ondas de matéria. Uma anomalia de fase semelhante à fase de Gouy óptica também foi teoricamente obtida.

Uma proposta experimental para uma observação desse termo de fase em ondas de matéria com átomos de césio mostrou-se inviável à tecnologia atual. Hoje em dia, uma manipulação coerente de átomos de Rydberg ultrafrios é experimentalmente possível. Devido a isso, propomos um experimento de interferometria Ramsey para medir a fase usando feixes de átomos de Rydberg focalizados. Para isso, usamos duas zonas de Ramsey (que farão o papel de divisores de feixe), duas cavidades de microondas (que farão o papel de lentes para os átomos) e um detetor de ionização fixo. Um deslocamento nas franjas de interferência deve ser observado quando o experimento for realizado com as cavidades que fazem o papel de lentes estiverem ligadas ou desligadas.

A tese está dividida da seguinte forma: No capítulo 2, fizemos uma breve revisão de alguns tópicos conhecidos da literatura. No capítulo 3, mostramos uma evidência indireta de fase de Gouy em ondas de matéria. No capítulo 4, mostramos que existe uma anomalia de fase de Gouy em torno da região focal de uma lente quântica para ondas de matéria. No capítulo 5, propomos um experimento para medir a fase de Gouy em átomos de Rydberg usando interferometria Ramsey. No capítulo 6, apresentamos nossas conclusões e deixamos uma perspectiva de trabalho futuro, onde pretendemos obter a expressão para a fase de Gouy de estados gaussianos mistos em termos de propriedades geométricas.

CAPITULO 2
------------

### Tópicos Básicos

Neste capítulo, vamos discutir sucintamente alguns tópicos conhecidos na literatura que são bastante importantes para fazermos uma conexão com o restante desta tese. De fato, vamos explorar a analogia existente entre ondas de matéria e ondas eletromagnéticas na aproximação paraxial. Algumas dessas analogias foram bastante exploradas durante o meu mestrado [15]. Aqui, daremos atenção especial a um termo específico do campo, conhecido como anomalia de fase de Gouy.

Na seção 2.1, mostramos as condições necessárias para que a equação paraxial de Helmholtz para ondas eletromagnéticas e a equação de Schrödinger para a partícula livre sejam tratadas como análogas. Na seção 2.2, fizemos uma revisão sobre a anomalia de fase de Gouy de estados puros de luz. Na seção 2.3, mostramos que a fase de Gouy de um estado gaussiano puro está relacionada com a covariância entre posição e momento podendo, assim, ser indiretamente extraída de um experimento para medir largura de feixe. Na seção 2.4, estudamos os feixes de luz parcialmente coerentes, basicamente os feixes do tipo Schell, pois estes apresentam uma completa analogia com os feixes de ondas de fulerenos estudados no capítulo 3.

### 2.1 Analogia entre Onda de Matéria e Onda de Luz Clássica

Nesta seção, mostramos a analogia existente entre a equação paraxial de Helmholtz para ondas eletromagnéticas e a equação de Schrödinger bidimensional para partículas livres. Essa analogia é muito interessante, pois nos permite estudar a propagação de um feixe de laser de ondas de matéria usando ferramentas análogas às usadas na propagação de um laser de fótons. Um exemplo de tais ferramentas é o formalismo de matrizes ABCD tratado na Ref. [52] para ondas de matéria.

Considere um campo elétrico estacionário no vácuo, i.e.,

$$E(\vec{r}) = A(\vec{r}) \exp(ikz), \qquad (2.1)$$

onde k é o número de onda no vácuo. Na aproximação paraxial, assumimos que o vetor de propagação da onda faz um pequeno ângulo com a direção z, i.e.,  $k \approx k_z$ , o que implica  $k_z \gg k_x, k_y$  [19, 23]. Isso é equivalente a assumir que a função envelope complexa que modula o campo, função  $A(\vec{r})$ , varia lentamente dentro de um comprimento de onda  $\lambda_L = 2\pi/k$ . Sob essa condição, a equação para  $A(\vec{r})$  pode ser imediatamente aproximada por [19]

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + i4\pi \frac{1}{\lambda_L} \frac{\partial}{\partial z}\right) A(x, y, z) = 0, \qquad (2.2)$$

onde o índice L significa luz.

Considere agora a equação de Schrödinger bidimensional para uma partícula livre de massam

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + 2i\frac{m}{\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(x, y, t) = 0.$$
(2.3)

Aqui,  $\psi(x, y, t)$  representa a função de onda da partícula no tempo t. Vamos assumir agora que o movimento da partícula na direção z seja clássico e que sua velocidade ao longo dessa direção permaneça constante. Nesse caso, podemos interpretar a variação no tempo como sendo a variação ao longo dessa direção de acordo com a relação  $t = z/v_z$ . Agora, usando o fato de que  $\lambda_P = h/p \sim h/p_z$  (pois  $p \sim p_z$  na aproximação paraxial de ondas de matéria) e substituindo na equação (2.3) obtemos

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + i4\pi \frac{1}{\lambda_P} \frac{\partial}{\partial z}\right) \psi\left(x, y, t = z/v_z\right) = 0, \qquad (2.4)$$

onde o índice P significa partícula. A condição de movimento clássico com velocidade constante ao longo da direção de propagação tem sido usada na

análise de recentes experimentos de difração de moléculas de fulereno [1, 53]. Um modelo teórico usando essa suposição reproduziu os dados experimentais qualitativamente bem [54].

Supor que a velocidade ao longo da direção z é constante e que o movimento ao longo daquela direção é clássico, implica a seguinte condição: o momento  $p_z$  é bem definido, i.e,  $\Delta p_z \ll p_z$ , de maneira que a função de onda inicial é associada a um comprimento de onda de de Broglie bem definido [54]

$$\lambda_P \sim \frac{h}{p_z} \ll \Delta z,$$
 (2.5)

onde  $\Delta z$  é a dispersão em posição na direção longitudinal z.

Ainda podemos reforçar a condição (2.5) assumindo que a distância L da fenda de difração ao detetor seja muito maior que a dispersão em posição na direção z, i.e.,

$$L \gg \Delta z \gg \lambda_z. \tag{2.6}$$

A condição (2.5), que nos permite assumir a propagação na direção z como clássica, é válida apenas se a fonte de ondas de matéria fosse ideal e a propagação livre, onde o comprimento de coerência ao longo desta direção  $\ell_z$  é infinito ( $\ell_z \gg \Delta z$ ). Entretanto, quando temos perdas de coerência, causadas pela incoerência da fonte ou pelo acoplamento com o ambiente (decoerência), o comprimento de coerência diminui. Assim, podemos ter  $\ell_z \leq \Delta z$  e  $\ell_z \sim \lambda_z$ , onde efeitos quânticos tornam-se visíveis e a nova condição crucial para garantirmos uma propagação clássica torna-se  $\lambda_z \ll \ell_z$ . No entanto, a condição (2.6) nos permite tomar a direção z como clássica mesmo para  $\lambda_z \sim \ell_z$ .

A analogia entre ondas de luz clássicas e de matéria (ondas quânticas) fica mais palpável se introduzirmos o formalismo de operadores em óptica clássica introduzido por Stoler [55]. Neste formalismo, a função A(x, y, z)é representada pelo ket vetor  $|A(z)\rangle$ . Se tomarmos o produto interno com os vetores da base  $|x, y\rangle$ , obtemos  $A(x, y, z) = \langle x, y | A(z) \rangle$ . Os operadores diferenciais  $-i(\partial/\partial x) = -i(\partial/\partial y)$  atuando no espaço de funções contendo A(x, y, z) são representados no espaço de ket abstrato pelos operadores  $\hat{k}_x$  e  $\hat{k}_y$ . A estrutura algébrica dos operadores  $\hat{k}_x$ ,  $\hat{k}_y$ ,  $\hat{x} \in \hat{y}$  é especificada pelas seguintes relações de comutação

$$[\hat{x}, \hat{k}_x] \equiv \hat{x}\hat{k}_x - \hat{k}_x\hat{x} = i, \quad [\hat{y}, \hat{k}_y] = i, \quad [\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{x}, \hat{k}_y] = [\hat{y}, \hat{k}_x] = 0.$$
(2.7)

### 2.2 Definição da Fase de Gouy para Estados Puros

De forma geral, podemos definir a fase de Gouy como sendo a fase relativa entre um estado que sofreu um confinamento espacial transverso, por focalização ou por difração através de pequenas aberturas, e um dado estado de referência ambos se propagando na mesma direção. Se o estado que sofreu o confinamento espacial for o estado gaussiano e o estado de referência uma onda plana ou uma onda esférica se propagando na mesma direção do estado gaussiano (ver Fig. 2.1), temos a definição usualmente conhecida para a fase de Gouy [24, 28]. Na Ref. [21], a fase de Gouy é definida como sendo a fase de um estado que sofreu uma focalização comparada com a fase de uma onda esférica covergindo para um foco.

Por exemplo, partindo para uma generalização da definição, podemos dizer que a fase de Gouy de um estado qualquer E(q, z) relativa ao estado  $E_0(q)$  é a fase global entre esses dois estados e é dada por

$$\varphi(z) = \arg[Tr(\hat{U}_z|E_0\rangle\langle E_0|)]$$
  
= arg  $\int dq dq' E_0^*(q) \langle q|\hat{U}_z|q'\rangle E_0(q')$   
= arg  $\int dq dq' E_0^*(q) G(q,q';z,0) E_0(q'),$  (2.8)

onde  $\hat{U}_z$  é o operador evolução e  $G(q, q'; z, 0) = \langle q | \hat{U}_z | q' \rangle$  é o propagador (ou função de Green) do estado inicial  $E_0(q')$  [15, 22, 56].

Na Fig. 2.1, mostramos uma interpretação para o deslocameto de fase de Gouy que é fisicamente transparente. Temos a representação das frentes de onda, a) uma onda plana; b) uma onda esférica; c) um feixe gaussiano. As linhas tracejadas mostram um adiantamento de fase do feixe gaussiano em comparação com uma onda plana ou uma onda esférica (Fig. 3.1.8 de [19]). Este adiantamento de fase ao longo da direção de propagação é a fase de Gouy, que uma das frentes de onda (estado gaussiano) ganha em relação à frente de onda plana.



Figura 2.1: Frentes de ondà, a) uma onda plana; b) uma onda esférica; c) um feixe gaussiano. Figura retirada da Ref. [19].

#### 2.3 Medida Indireta da Fase de Gouy

Nesta seção, mostramos que a fase de Gouy de um feixe gaussiano de luz está relacionada com a covariância entre posição e momento  $\sigma_{xk_x}$ . Esse resultado, juntamente com a saturação do determinante da matriz de covariância para evoluções quadráticas e unitárias, neste caso dada por

$$C_L = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xk_x} \\ & & \\ \sigma_{xk_x} & \sigma_{kk} \end{pmatrix}, \qquad (2.9)$$

nos permite extrair a fase de Gouy a partir de um experimento realizado para medir a largura do feixe  $\sigma_{xx}$ . Devemos salientar que a abordagem tratada aqui não é a usual em óptica para se estudar a fase de Gouy. De fato, trataremos aqui de estados gaussianos, por simplicidade, mas a fase de Gouy é uma propriedade geral das ondas transversalmente confinadas, conforme discutido na seção 2.2.

A propagação, a partir da equação paraxial de Helmholtz, equação (2.2), de um feixe gaussiano puro gerado pela seguinte distribuição de campo no plano z = 0, i.e.,

$$E(x, y, 0) = N \ e^{-(x^2 + y^2)/w_0^2}, \tag{2.10}$$

onde N é uma constante de normalização, nos permite obter no plano $z \geq 0$ a seguinte distribuição de campo

$$E(x, y, z) = \frac{Nw_0}{w(z)} \exp\left[-\frac{x^2 + y^2}{w(z)^2}\right] \exp(ikz)$$
  
 
$$\times \exp\left[\left(\frac{ik(x^2 + y^2)}{2R(z)}\right) + i\xi(z)\right], \qquad (2.11)$$

onde

$$w(z) = w_0 \left[ 1 + \left(\frac{z}{z_0}\right)^2 \right]^{\frac{1}{2}},$$
(2.12)

$$R(z) = z \left[ 1 + \left(\frac{z_0}{z}\right)^2 \right], \qquad (2.13)$$

$$\xi(z) = -\arctan\left(\frac{z}{z_0}\right),\tag{2.14}$$

е

$$z_0 = \frac{\pi w_0^2}{\lambda_L}.\tag{2.15}$$

Aqui,  $w_0$  representa a cintura inicial do feixe e  $\lambda_L$  o comprimento de onda do laser [22]. w(z) e R(z) representam, respectivamente, a largura do feixe e o raio de curvatura das frentes de onda na posição z. A fase  $\xi(z)$ , equação (2.14), é conhecida como fase de Gouy.

A fase de Gouy, equação (2.14), aparece diretamente nos cálculos para a evolução do estado inicial, equação (2.10), ao se trabalhar o termo de fase que seria jogado fora pela normalização. Entretando, a mesma expressão deverá ser obtida se usarmos a definição, equação (2.8). De fato, supondo que o estado inicial é o estado de onda plana, i.e.,  $E_0 = \exp(ikz)$ , e que o estado final é o estado gaussiano dado pela equação (2.11), sem o termo de fase de Gouy, obtemos para uma dimensão

$$\arg[Tr(\hat{U}_z|E_0\rangle\langle E_0|)] = \frac{1}{2}\arctan\left(\frac{z}{z_0}\right),\qquad(2.16)$$

onde o fator 1/2 aparece pelo fato de termos trabalhado em uma dimensão apenas [28]. Assim, a fase de Gouy, equação (2.14), é a fase global que o estado gaussiano ganha relativa ao estado de onda plana.

Os elementos da matriz de covariância, equação (2.9), ao longo da dimensão x (para a dimensão y obtemos resultados análogos) para o estado gaussiano, equação (2.11), são [15]

$$\sigma_{xx} = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = \frac{w^2(z)}{4}, \qquad (2.17)$$

$$\sigma_{k_x k_x} = \langle \hat{k}_x^2 \rangle - \langle \hat{k}_x \rangle^2 = \frac{k}{2z_0}, \qquad (2.18)$$

е

$$\sigma_{xk_x} = \langle \frac{\hat{x}\hat{k}_x + \hat{k}_x\hat{x}}{2} \rangle = \frac{z}{2z_0}.$$
(2.19)

Uma relação equivalente à relação de incerteza de Schrödinger para ondas de luz é dada por [15]

$$\sigma_{xx}\sigma_{k_xk_x} - \sigma_{xk_x}^2 \ge \frac{1}{4},\tag{2.20}$$

uma desigualdade que, para estados gaussianos puros de luz, satura para o seu valor mínimo 1/4. A saturação da relação de incerteza generalizada, equação (2.20), nos permite determinar a covariância  $\sigma_{xk_x}$  para estados gaussianos puros de luz. De fato, partindo da equação (2.20) e usando as equações (2.17) e (2.18), obtemos

$$\sigma_{xk_x}(z) = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{w(z)}{w_0}\right)^2 - 1}.$$
 (2.21)

Note que a expressão acima depende de w(z), a largura do feixe na posição z. A seguir, descreveremos o experimento realizado para medir a largura do feixe.

#### 2.3.1 Experimento para Medir a Largura de um Feixe Gaussiano de Luz

Para obtermos experimentalmente a largura do feixe em função da distância de propagação, usamos o seguinte arranjo experimental mostrado na Fig. 2.2 (laboratório de Óptica Quântica da UFMG), onde  $L_1$  representa uma lente divergente,  $L_2$  uma lente convergente e D é um detetor de luz. Com esse arranjo podemos medir a largura do feixe em função de z. Na Fig. 2.3, mostramos a curva de intensidade em função da posição x do detetor para uma dada distância de propagação z. A largura do feixe nessa posição z é a largura da curva de intensidade, ajustada por uma gaussiana. Na Fig. 2.4, mostramos a largura do feixe para diferentes distâncias z, junto com o correspondente resultado para  $\sigma_{xk_x}$ . O comprimento de Rayleigh do feixe focalizado pela lente  $L_2$  vale  $z_0 = 50$  mm.



Figura 2.2: Esboço do arranjo experimental utilizado na realização do experimento.

Note que  $\sigma_{xk_x}$  pode ser positivo ou negativo de acordo com a equação (2.21). Porém, a equação (2.21) foi deduzida assumindo que o foco do feixe está em z = 0. Se desviarmos o foco para uma posição qualquer  $z_c$ , como no experimento realizado, devemos levar isso em conta. O sinal mais e menos na equação (2.21) pode ser melhor entendido se olharmos para a equação (2.19)

$$\sigma_{xk_x} = \frac{z}{2z_0} \to \sigma_{xk_x} = \frac{z - z_c}{2z_0},\tag{2.22}$$

que concorda com os dados experimentais. Aqui, podemos observar que para ondas de luz se propagando na direção do foco  $(z < z_c)$  a covariância é negativa, por outro lado, para ondas de luz se propagando depois do foco  $(z > z_c)$  a covariância é positiva.



Figura 2.3: Intensidade em função da posição x do detetor para uma dada distância de propagação z.



Figura 2.4: À esquerda, largura do feixe de luz gaussiano w(z) em função da direção de propagação z. Curva sólida corresponde à equação (2.12) e os pontos foram obtidos no experimento. À direita, covariância  $\sigma_{xk_x}$ em função de  $z - z_c$ . Curva sólida corresponde à equação (2.18) e os pontos foram obtidos do experimento através da equação (2.21).

A fase de Gouy, equação (2.14), não foi medida em nosso laboratório. Porém, é possível mostrar a consistência do modelo com a existência dessa fase. Substituindo-se a equação (2.18) na equação (2.14), mostramos que a fase de Gouy está relacionada com a covariância  $\sigma_{xk_x}$ , i.e.,

$$\xi(z) = -\frac{1}{2}\arctan(2\sigma_{xk_x}), \qquad (2.23)$$

aqui, o fator  $\frac{1}{2}$  aparece pelo fato de estarmos tratando de uma dimensão apenas [28]. O fato de o equivalente do determinante de Schrödinger ser igual a 1/4 para estados gaussianos puros, equação (2.20), nos permite trocar  $\sigma_{xk_x}$ na equação (2.23) pela equação (2.21) e obter a fase em função da largura do feixe, i.e.,

$$\xi(z) = \pm \frac{1}{2} \arctan\left(\sqrt{\left[\frac{w(z)}{w_0}\right]^2 - 1}\right).$$
(2.24)

Assim, a determinação de  $\sigma_{xk_x}$  ou de w(z) nos permite determinar  $\xi(z)$  (ver Fig 2.5). Esse experimento foi realizado durante meu mestrado [15], o que não foi observado na época é que a fase de Gouy poderia ser indiretamente extraída desses dados experimentais.



Figura 2.5: Fase de Gouy do feixe de luz gaussiano em função da direção de propagação  $z - z_c$ . Curva sólida corresponde à equação (2.14) e os pontos foram obtidos do experimento através da equação (2.24).

A obtenção desses resultados nos motivou a fazer algo semelhante para ondas de matéria e obter uma evidência indireta para a fase de Gouy em ondas de matéria. O resultado obtido está detalhado no capítulo 3 e publicado na Ref. [39].

#### 2.4 Feixes de Luz Parcialmente Coerentes

Nas seções anteriores, tratamos de estados de luz produzidos por fontes completamente coerentes, i.e., fontes do tipo laser [20, 23]. Entretanto, nem sempre nossa fonte de luz é um laser, e a coerência pode ser apenas parcial. Feixes de luz produzidos por fontes parcialmente coerentes talvez apresentem uma comparação mais realista com os feixes de ondas de matéria uma vez que estes últimos são geralmente produzidos por fontes térmicas. Um exemplo de fonte de luz parcialmente coerente será discutido a seguir, onde os resultados obtidos são análogos aos produzidos por fontes de ondas de fulerenos (discutidos no cap. 3).

#### 2.4.1 Fontes do Tipo Schell

Por volta de 1956, Schell e colaboradores produziram um tipo de fonte de luz onde a coerência entre os campos gerados é apenas parcialmente obtida. Este tipo de fonte ficou conhecido por fontes do tipo Schell [57]. Os campos gerados por estas fontes embora não sejam totalmente coerentes possuem grandes aplicações, pois os correspondentes feixes são altamente direcionais [22, 57, 58]. Podemos associar os feixes do tipo Schell com um laser oscilando em diferentes modos transversos, onde a coerência espacial é apenas parcialmente obtida [23, 59]. As fontes do tipo Schell foram produzidas poucos anos antes da produção do primeiro laser (1960). Assim, podemos nos perguntar qual a finalidade prática dessas fontes após a produção da fonte laser. Talvez a principal finalidade prática dos feixes do tipo Schell esteja na capacidade de redução do efeito de mancha (efeito speckle), presente nos feixes completamente coerentes [22, 60]. Por exemplo, se fizermos uma imagem fotográfica usando luz completamente coerente a imagem fica borrada devido ao efeito speckle, por outro lado, se a mesma imagem for feita usando luz parcialmente coerente teremos uma melhor resolução da mesma, ver Fig. 5.16 da Ref. [22].

A coerência entre os campos no domínio espaço-frequência, na teoria de coerência de segunda ordem, é caracterizada pela função grau de coerência espectral definida por [22]

$$\eta(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \nu) = \frac{\mathcal{W}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \nu)}{[S(\vec{r}_1, \nu)]^{\frac{1}{2}} [S(\vec{r}_2, \nu)]^{\frac{1}{2}}},$$
(2.25)

onde  $\mathcal{W}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \nu)$  é a função densidade espectral cruzada, função que expressa a correlação entre campos em pontos diferentes  $\vec{r}_1 \in \vec{r}_2$  na frequência  $\nu$ .  $S(\vec{r}_1, \nu) \in S(\vec{r}_2, \nu)$  são as densidades espectrais em cada ponto ou intensidades ópticas, i.e.,  $S(\vec{r}_i, \nu) = \mathcal{W}(\vec{r}_i, \vec{r}_i, \nu)$ . Vemos, pela equação (2.25), que  $0 \leq \eta(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \nu) \leq 1$ , onde os dois extremos caracterizam, respectivamente, campos completamente descorrelacionados e completamente correlacionados. Quando a dependência nas posições  $\vec{r}_1 \in \vec{r}_2$  é dada em termos da diferença entre as posições, i.e.,  $\eta(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \nu) = \eta(\vec{r}_2 - \vec{r}_1, \nu) \equiv \mathbf{g}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1, \nu)$ , a fonte é dita ser do tipo Schell.



Figura 2.6: Fonte de luz do tipo Schell. A mancha escura representa a área de coerência e a parte transparente é o tamanho efetivo da fonte. No caso de um laser a área de coerência é do tamanho da fonte.

Na Fig. 2.6, mostramos uma fonte de luz do tipo Schell quasi-homogênea em um dado plano transverso z, onde a dimensão linear efetiva da fonte representada por  $\sigma_s$  é muito maior que a largura efetiva de coerência espectral da fonte (ou comprimento de coerência transverso) representada por  $\sigma_g$ , i.e.,  $\sigma_s \gg \sigma_g$  e comparamos com uma fonte do tipo laser onde a largura efetiva de coerência espectral é do tamanho da fonte.

A densidade espectral cruzada gerada por uma fonte secundária gaussiana do tipo Schell unidimensional é dada por [22]

$$\mathcal{W}^{(0)}(x_1, x_1', \nu) = [S^{(0)}(x_1, \nu)]^{\frac{1}{2}} [S^{(0)}(x_1', \nu)]^{\frac{1}{2}} \mathbf{g}^{(0)}(x_1 - x_1', \nu), \qquad (2.26)$$

onde

$$S^{(0)}(x_1,\nu) = A^2(\nu) \exp\left[-\frac{2x_1^2}{\sigma_s^2(\nu)}\right],$$
(2.27)

е

$$\mathbf{g}^{(0)}(x_1 - x_1', \nu) = \exp\left[-\frac{(x_1 - x_1')^2}{2\sigma_{\mathbf{g}}^2(\nu)}\right].$$
 (2.28)

 $A(\nu)$  é uma constante que pode depender da frequência e o índice zero representa o plano da fonte z = 0. A fonte primária está localizada atrás do plano de abertura, plano z < 0, e irradia no semi-espaço z > 0.

Substituindo (2.27) e (2.28) em (2.26), obtemos

$$\mathcal{W}^{(0)}(x_1, x_1', \nu) = A^2 \exp\left[-\frac{(x_1^2 + x_1'^2)}{\sigma_s^2}\right] \exp\left[-\frac{(x_1 - x_1')^2}{2\sigma_g^2}\right].$$
 (2.29)

Para que a fonte gaussiana Schell produza um feixe, a escolha de  $\sigma_s$  e  $\sigma_g$  deve gerar um campo cuja intensidade radiante tenha valores apreciáveis dentro de um cone de estreito ângulo sólido, o que implica a relação

$$\frac{1}{\sigma_s^2} + \frac{1}{\sigma_g^2} \ll \frac{2\pi^2}{\lambda^2},\tag{2.30}$$

onde  $\lambda$  é o comprimento de onda da radiação produzida. A equação (2.30) remete a dois casos extremos: a) quando  $\sigma_{\mathbf{g}} \gg \sigma_s$  (fonte espacialmente coerente), a dimensão linear da fonte deve ser muito maior que o comprimento de onda da radiação, i.e.,  $\sigma_s \gg \frac{\lambda}{\pi\sqrt{2}}$  e b) quando  $\sigma_{\mathbf{g}} \ll \sigma_s$  (fonte globalmente espacialmente incoerente), a largura efetiva de coerência espectral da fonte deve ser muito maior que o comprimento de onda da radiação, i.e.,  $\sigma_{\mathbf{g}} \gg \frac{\lambda}{\pi\sqrt{2}}$ . Nesse último caso, vemos que a fonte deve ser pelo menos localmente coerente para que um feixe seja produzido.

A densidade espectral cruzada no plano entre planos  $z_1, z'_1 > 0$  é dada por [22]

$$\mathcal{W}(x, z_1; x', z_1'; \nu) = e^{ik(z_1 - z_1')} \int \int \mathcal{W}^{(0)}(x_1, x_1', \nu) G^*(x, z_1; x_1, 0) G(x', z_1'; x_1', 0) dx_1 dx_1'$$
(2.31)

onde

$$G(x, z_1; x_1, 0) = \sqrt{\frac{k}{i2\pi z_1}} \exp\left[\frac{ik}{2z_1}(x - x_1)^2\right],$$
 (2.32)

é a função de Green para a propagação livre [15, 22].

Substituindo (2.29) e (2.32) em (2.31) e assumindo  $z_1 = z'_1 = z$ , obtemos

$$\mathcal{W}(x, x', z; \nu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\bar{w}(z)} \exp\left[-\frac{(x+x')^2 + \mathcal{M}^4(x-x')^2}{2\bar{w}^2}\right] \exp\left[\frac{ik(x^2 - x'^2)}{2\bar{R}(z)}\right]$$
(2.33)

onde

$$\bar{w}(z) = \sigma_s \left[ 1 + \left(\frac{z}{\bar{z}_0}\right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \qquad (2.34)$$

$$\bar{R}(z) = z \left[ 1 + \left(\frac{\bar{z}_0}{z}\right)^2 \right], \qquad (2.35)$$

$$\bar{z}_0 = \mathcal{M}^{-2} z_0, \qquad (2.36)$$

е

$$\mathcal{M}^2 = \left[1 + \left(\frac{\sigma_s}{\sigma_g}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}.$$
(2.37)

A barra está sendo usada para diferenciar os parâmetros do estado gaussiano do tipo Schell dos parâmetros de um estado gaussiano completamente coerente. A quantidade  $\mathcal{M}^2$  depende do comprimento de coerência transverso no plano da fonte,  $\sigma_{g}$ . Ela é denominada fator de qualidade do feixe, pois mede a qualidade do feixe em termos de sua divergência. Tal quantidade é sempre maior que um, assumindo o valor mínimo  $\mathcal{M}^2 = 1$  para um feixe gaussiano completamente coerente [61, 62, 63, 64, 65, 66]. Na realidade, o fator  $\mathcal{M}^2$  poderia ser chamado de inverso do fator de qualidade uma vez que quanto maior o valor de  $\mathcal{M}^2$  mais divergente é o feixe [23, 59]. Na Ref. [67], os autores obtém uma expressão generalizada para o fator  $\mathcal{M}^2$  e concluem que o resultado  $\mathcal{M}^2 > 1$  se mantém apenas para feixes cuja propagação é paraxial, caso contrário pode-se obter  $\mathcal{M}^2 < 1$ . A quantidade  $\bar{z}_0$  é a generalização do conceito de comprimento de Rayleigh para feixes parcialmente coerentes [68, 69]. Vemos pela equação (2.36) que essa quantidade é sempre menor que o comprimento de Rayleigh do feixe gaussiano puramente coerente. Assim, os estados gaussianos do tipo Schell se alargarão mais rápido que os estados gaussiano puros, pois a escala de comprimento (comprimento de Rayleigh) é menor.

Na Fig. 2.7, à esquerda, mostramos curvas teóricas para a largura do feixe em função da distância de propagação z para uma largura da fonte fixa em  $\sigma_s = 0, 1$  cm e diferentes valores de  $\sigma_g$ . Observamos que quanto menor o comprimento de coerência  $\sigma_g$  mais o feixe se alarga, i.e., torna-se menos direcional. À direita, mostramos um resultado experimental para a largura de um feixe gaussiano do tipo Schell, estes resultados foram retirados da Ref. [22].



Figura 2.7: À esquerda, largura teórica do feixe do tipo Schell em função de z para diferentes valores do comprimento de coerência. À direita, mostramos um resultado experimental. Figuras retiradas da Ref. [22].

O ângulo de divergência do feixe é dado por [22, 23]

$$\bar{\theta}_s = \lim_{z \to \infty} \frac{\bar{w}(z)}{z} = \mathcal{M}^2\left(\frac{\lambda}{\pi\sigma_s}\right).$$
(2.38)

Nos limites de fontes globalmente coerentes ( $\sigma_g \gg \sigma_s$ ) e globalmente incoerentes  $\sigma_g \ll \sigma_s$ , obtemos, respectivamente

$$\bar{\theta}_s \approx \left(\frac{\lambda}{\pi}\right) \frac{1}{\sigma_s} \tag{2.39}$$

е

$$\bar{\theta}_s \approx \left(\frac{\lambda}{\pi}\right) \frac{1}{\sigma_{\rm g}}.\tag{2.40}$$

No limite coerente,  $\sigma_g \to \infty$  ( $\mathcal{M}^2 = 1$ ), temos

$$\bar{z}_{0c} = z_0 \tag{2.41}$$

e as equações (2.34) e (2.35) tornam-se

$$\bar{w}_c(z) = \sigma_s \left[ 1 + \left(\frac{z}{z_0}\right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} e \quad \bar{R}_c(z) = z \left[ 1 + \left(\frac{z_0}{z}\right)^2 \right],$$
 (2.42)

onde o índice c significa coerente. Trocando a notação  $\sigma_s$  por  $w_0$ , essas expressões ficam iguais às equações (2.12) e (2.13) para os parâmetros do feixe gaussiano puro. A expressão para a densidade espectral cruzada, equação (2.33), se reduz para

$$\mathcal{W}_c(x, x', z; \nu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\bar{w}_c(z)} \exp\left[-\frac{x^2 + x'^2}{\bar{w}_c(z)^2}\right] \exp\left[\frac{ik(x^2 - x'^2)}{2\bar{R}_c(z)}\right].$$
 (2.43)

Notamos que essa equação pode ser expressa na seguinte forma fatorada

$$\mathcal{W}_c(x, x', z; \nu) = E_c^*(x, z; \nu) E_c(x', z; \nu), \qquad (2.44)$$

onde

$$E_c(x,z;\nu) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\bar{w}_c(z)}} \exp\left[-\frac{x^2}{\bar{w}_c(z)}\right] \exp\left[\frac{ikx^2}{2\bar{R}_c(z)}\right] \exp[i\bar{\xi}_c(z)], \quad (2.45)$$

com  $\bar{\xi}_c(z)$  sendo alguma função de z. Essa função pode ser determinada considerando o limite coerente da densidade espectral cruzada  $\mathcal{W}(x, z_1; x', z'_1; \nu)$ em diferentes seções transversas  $z_1 \neq z'_1$ , pois quando  $z_1 = z'_1 = z$  o termo  $\exp[i\bar{\xi}_c(z)]$  se cancela no produto  $E_c^*(x, z_1; \nu)E_c(x', z'_1; \nu)$  [22]. Esta função deve estar relacionada com a fase de Gouy do estado Schell.

Como mencionado acima, para que um feixe gaussiano do tipo Schell reproduza o estado gaussiano puro no limite coerente precisamos definir uma fase de Gouy para um estado do tipo Schell. Uma definição generalizada para a fase de Gouy, que inclui campos multi-modais foi obtida na Ref. [16], cuja expressão é dada por

$$\bar{\xi}(z) = -\frac{\mathcal{M}^4}{2k} \int^z \frac{\mathrm{d}z}{W(z)^2},\tag{2.46}$$

onde  $\mathcal{M}^2$  é o fator de qualidade do feixe, W(z) é a largura do feixe cujo campo é multi-modal e k é o número de onda do campo. Como os estados do tipo Schell podem ser associados a um campo multi-modal com um determinado fator de qualidade  $\mathcal{M}^2$  [23] podemos usar a expressão (2.46) para calcular a fase de Gouy de um estado do tipo Schell. Assim, substituindo a largura do feixe equação (2.34) na equação (2.46), obtemos

$$\bar{\xi}(z) = -\frac{\mathcal{M}^2}{2} \arctan\left(\frac{z}{\bar{z}_0}\right), \qquad (2.47)$$

que reproduz a expressão conhecida para a fase de Gouy no limite coerente  $(\mathcal{M}^2 = 1)$ , i.e.,

$$\bar{\xi}_c(z) = -\frac{1}{2}\arctan\left(\frac{z}{z_0}\right). \tag{2.48}$$

Capítulo	3
0	~

# Evidência Indireta de Fase de Gouy em Ondas de Matéria -Moléculas de Fulereno

Motivados pelos resultados obtidos no capítulo 2, onde fizemos uma medida indireta da fase de Gouy para um feixe gaussiano de luz, mostramos neste capítulo que a fase de Gouy de um feixe gaussiano de partículas evoluindo livremente pode ser extraída de um experimento de difração de ondas de matéria [39]. Aqui, não estamos medindo a fase, apenas mostrando que o modelo de difração de ondas de matéria é compatível com a existência de uma fase de Gouy análoga à de ondas de luz. Como veremos, o que nos permitiu extrair a fase dos dados experimentais foi o fato de a mesma estar relacionada com a covariância entre posição e momento que se desenvolve através da dinâmica quântica. A partir do determinante de Schrödinger para estados gaussianos [15, 56, 70] e da dependência da fase com a covariância, foi possível expressá-la em função da largura do feixe, uma quantidade mais fácil de ser medida no laboratório do que a covariância e a própria fase.

Tomamos, como ponto de partida, uma comparação direta entre as soluções gaussianas da equação paraxial de Helmholtz para a luz e da equação de Schrödinger bidimensional para a partícula livre, discutidas no capítulo 2. Embora as analogias encontradas sejam matematicamente esperadas, pois as equações são as mesmas a menos de algumas constantes, fisicamente estamos comparando luz clássica com ondas quânticas. Em seguida, propomos um modelo teórico para a evolução de um pacote gaussiano de ondas de matéria gerado por uma fonte parcialmente coerente e estudamos a difração de macromoléculas através de uma fenda unidimensional. Nesse modelo, a direção de propagação é considerada clássica e os efeitos quânticos são observados ao longo de uma dimensão transversa à direção de propagação. Comparamos o modelo com um experimento de difração de moléculas de fulereno realizado recentemente pelo grupo de A. Zeilinger [1, 53] e mostramos que a covariância entre posição e momento e a fase de Gouy podem ser extraídas desse experimento.

### 3.1 Evolução de um Estado Gaussiano Puro de Ondas de Matéria

Para obtermos as analogias entre as equações de onda mencionadas no parágrafo acima, começamos com a evolução temporal de um pacote gaussiano coerente de ondas de matéria, representado pela seguinte função de onda em t = 0

$$\psi(x, y, 0) = \left(\frac{1}{b_0\sqrt{\pi}}\right) \exp\left[-\frac{(x^2 + y^2)}{2b_0^2}\right],$$
 (3.1)

onde  $b_0$  é a largura do pacote. A evolução no tempo do estado inicial, equação (3.1), via equação (2.4), nos permite obter após um tempo arbitrário t [15]

$$\psi(x, y, t) = \left[\frac{1}{B(t)\sqrt{\pi}}\right] \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2B^2(t)}\right)$$
$$\times \exp\left\{i\left[\frac{m(x^2 + y^2)}{2\hbar R(t)} + \mu(t)\right]\right\}, \quad (3.2)$$

onde m é a massa da partícula que forma o pacote. A função do tempo  $\mu(t)$ é análoga à fase de Gouy de um estado gaussiano puro de luz. A comparação com a equação de onda na aproximação paraxial com a mesma condição em z = 0 produz

$$B(t) = b_0 \left[ 1 + \left(\frac{t}{\tau_0}\right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \longrightarrow w(z), \qquad (3.3)$$

$$R(t) = t \left[ 1 + \left(\frac{\tau_0}{t}\right)^2 \right] \longrightarrow R(z), \qquad (3.4)$$

$$\mu(t) = -\arctan\left(\frac{t}{\tau_0}\right) \longrightarrow \xi(z), \qquad (3.5)$$

е

$$\tau_0 = \frac{mb_0^2}{\hbar} \longrightarrow z_0. \tag{3.6}$$

O parâmetro B(t) (w(z)) é a largura do feixe de partículas coerente (largura do feixe de luz), o parâmetro R(t) (R(z)) é o raio de curvatura das frentes de onda de matéria (raio de curvatura das frentes de onda de luz),  $\mu(t)$   $(\xi(z))$ é a fase de Gouy das ondas de matéria (fase de Gouy das ondas de luz). O parâmetro  $\tau_0$  está relacionado apenas com a condição inicial e é responsável por dois regimes de crescimento da largura do feixe B(t) [15, 56], em completa analogia com o comprimento de Rayleigh que separa o crescimento da largura do feixe w(z) em dois regimes diferentes, como é bem conhecido em óptica [19].

A seguir, mostramos que  $\mu(t)$  está diretamente relacionada com a covariância entre posição e momento que se desenvolve através da dinâmica quântica. Para ondas de luz a abordagem teórica é outra e em geral não envolve diretamente o conceito de covariância. Para ondas de matéria, mostramos que a matriz de covariância desempenha um papel essencial (obviamente as mesmas considerações valem para feixes paraxiais clássicos, conforme discutido no capítulo 2). Para evoluções quadráticas e unitárias (como a evolução livre no caso presente) o determinante da matriz de covariância é independente do tempo e, para estados puros, satura em seu valor mínimo

$$\det \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xp} \\ & & \\ \sigma_{xp} & \sigma_{pp} \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}, \qquad (3.7)$$

onde

$$\sigma_{xx} = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = \frac{B(t)^2}{2}, \qquad (3.8)$$

$$\sigma_{pp} = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2b_0^2},\tag{3.9}$$

е

$$\sigma_{xp} = \frac{1}{2} \langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle - \langle \hat{x} \rangle \langle \hat{p} \rangle = \frac{\hbar}{2} \left( \frac{t}{\tau_0} \right)$$
$$= -\frac{\hbar}{2} \tan 2\mu(t). \qquad (3.10)$$
Através da equação (3.10), notamos que  $\mu(t)$  está relacionada com a covariância  $\sigma_{xp}$ . Assim, se medirmos  $\sigma_{xp}$ , da equação (3.10) podemos inferir a fase de Gouy para ondas de matéria representadas por um pacote de ondas gaussiano coerente evoluindo livremente. De fato, a equação (3.10) sugere que, medindo-se  $\sigma_{xp}$  obtemos  $\mu(t)$ , mas, como medir  $\sigma_{xp}$  no laboratório? Uma maneira conveniente de obtê-la, embora indireta, seria a utilizada no capítulo 2 para medir  $\sigma_{xk}$  para ondas de luz através da saturação do análogo do determinante de Schrödinger para um feixe gaussiano e dos dados experimentais da largura deste feixe. Para ondas de matéria, precisaríamos de um experimento que medisse a largura de um feixe gaussiano de ondas de matéria. Felizmente, o resultado que precisamos foi realizado pelo grupo de A. Zeilinger em 2002 com difração de moléculas de fulereno [1].

A seguir, discutiremos um pouco os experimentos realizados pelo grupo de A. Zeilinger com macromoléculas onde são observados efeitos quânticos [9, 71]. Para entendermos o experimento de difração de moléculas de fulereno reportado pelo grupo de A. Zeilinger na Ref. [1], faremos um modelo teórico de difração de estados gaussianos produzidos por uma fonte de ondas de matéria parcialmente coerente. Mostraremos que a fase de Gouy desses estados gaussianos mistos também está relacionada com a covariância  $\sigma_{xp}$ , o que nos possibilitou extraí-la dos dados experimentais da Ref. [1].

# 3.2 Observação de Efeitos Quânticos com Macromoléculas (fulerenos)

Louis de Broglie (1923) sugeriu que as partículas da matéria podem se propagar como ondas, com um comprimento de onda dado por [72]

$$\lambda = \frac{h}{p},\tag{3.11}$$

onde h é a constante de Plank e p o momento da partícula. Essa ideia notável motivou a equação de Schrödinger, que descreve a propagação dessas ondas. Após a proposta de de Broglie para o comportamento ondulatório da matéria, fenômenos ondulatórios foram observados experimentalmente com elétrons, nêutrons, átomos, etc [73, 74, 75]. Experimentos de fenda dupla de Young com ondas de matéria foram realizados por Jönsson para elétrons [76], por Zeilinger e colaboradores para nêutrons [77], por Carnal e Mlynek para átomos [78]. A interferência com partículas no limite microscópico é uma das propriedades mais intrigantes da teoria quântica [79]. Os efeitos de perda de coerência para um objeto macroscópico certamente serão os responsáveis pela não observabilidade de efeitos de interferência no mundo clássico. Então, surge uma pergunta crucial: existe um limite na natureza para a observação destes efeitos? [53].

Em busca de uma resposta para a pergunta do parágrafo anterior, nos últimos anos, o grupo de A. Zeilinger e colaboradores [1, 9, 53, 71, 74, 77] tem realizado diversos experimentos que exibem efeitos quânticos com partículas "grandes", massivas e complexas, chamadas de fulerenos. Essas partículas contém cerca de 60 (fulerenos  $C_{60}$ ) a 70 (fulerenos  $C_{70}$ ) átomos de carbono [ver esboço de sua estrutura na Fig. (3.1)] possuem massa da ordem de  $1, 2 \times 10^{-24}$  kg, diâmetro da ordem de 7Å [80], e vários graus de liberdade internos excitados [9] sendo, assim, mais parecidas com o mundo clássico do que os fótons, elétrons, prótons, nêutrons, etc. Experimentos deste tipo são bastante importantes do ponto de vista de fundamentos da mecânica quântica, pois nos projetam em busca de uma resposta para um problema em aberto em mecânica quântica que é a transição do mundo quântico para o mundo clássico [81].



Figura 3.1: Molécula de fulereno  $C_{60}$ , formada por 60 átomos de carbono arranjados numa estrutura icosaédrica. Ela se assemelha a uma bola de futebol [53].

Na Fig. 3.2, à esquerda mostramos um experimento idealizado do comportamento quântico da bola de fulereno e à direita mostramos o resultado experimental para difração de moléculas de fulereno obtido pelo grupo de A. Zeilinger em 1999 [9]. Na parte (a) do gráfico à direita da Fig. 3.2, temos o resultado para o padrão de difração com grade e na parte (b) o correspondente padrão quando retiramos a grade de difração do caminho de propagação dos fulerenos. Esses resultados mostram que os fulerenos se comportam como ondas nestes experimentos.



Figura 3.2: Difração de moléculas de fulereno. Experimento realizado por A. Zeilinger et al [9]. A parte (a) do gráfico à direita corresponde ao padrão de difração com grade e a parte (b) é o caso sem a grade de difração.

Na Ref. [1] é apresentada uma investigação experimental da relação de incerteza na difração de moléculas de fulereno. Em tal experimento, um feixe molecular colimado atravessa uma fenda de abertura variável e sua largura é medida em função da largura da fenda (ver Fig. 3 da Ref. [1]). A seguir, descreveremos um modelo de ondas de matéria parcialmente coerente que seja compatível com os dados experimentais da Ref. [1].

# **3.3** Coerência Parcial do Feixe de Fulerenos

O feixe de fulerenos é produzido num forno a uma temperatura aproximadamente igual a 900 K e são ejetados um por um através de uma pequena fenda colocada no forno. A essa temperatura, as moléculas deixam o forno com uma velocidade mais provável  $v_{mp}$  da ordem de 200 m/s com uma dispersão de  $\Delta v = 0, 6v$  [1, 53]. Na Fig. 3.3, apresentamos um esboço de como as moléculas de fulereno são ejetadas do forno, i.e., com diferentes momentos, o que implica diferentes comprimentos de onda.

Certamente, se tentássemos realizar um experimento de fenda dupla com as moléculas de fulereno que deixam o forno da Fig. 3.3 não veríamos padrão de interferência algum ou, no máximo, veríamos um padrão de interferência com visibilidade muito baixa. De fato, para se obter um determinado grau de coerência e melhorar a visibilidade nas franjas de interferência com moléculas



Figura 3.3: Moléculas de fulereno deixam o forno com diferentes velocidades o que implica diferentes comprimentos de onda.

de fulereno, o feixe é colimado por fendas da ordem de 10  $\mu$ m antes de antingir a grade de difração [9].

No experimento da Ref. [1], cujos dados serão utilizados para medir  $\sigma_{xp}$ , um feixe de fulerenos  $C_{70}$  é produzido num forno a uma temperatura de 900K depois é colimado pela fenda  $S_1$  cuja largura é fixada em  $\sigma_0 = 10 \ \mu\text{m}$ . A fenda  $S_1$  funciona como uma fonte secundária. Após a colimação, o feixe de fulerenos evolui livremente até uma fenda de difração  $b_0$  cuja largura varia de 70 nm a 20  $\mu$ m. O feixe difratado em  $b_0$  evolui livremente até um detetor localizado a uma distância  $z_2 = 1,33$  m conforme arranjo experimental da Fig. 3.4.



Figura 3.4: Arranjo experimental utilizado pelo grupo de A. Zeilinger [1]. Um feixe de fulerenos  $C_{70}$  é produzido no forno a uma temperatura de 900 K depois é colimado pela fenda  $S_1$  cuja largura é fixada em 10  $\mu$ m e difratado pela fenda de largura variável  $b_0$ .

Infelizmente, não é fisicamente razoável assumir que um pacote de ondas coerente deixe a fenda de difração devido à maneira como as moléculas de fulereno são produzidas, conforme discutido acima. Portanto, a fim de introduzir certa incoerência espacial ao longo da direção transversa, direção onde ocorrem os efeitos quânticos, vamos recorrer ao formalismo de matrizes densidade [65, 82, 83, 84]. Os resultados obtidos são completamente análogos aos obtidos na seção 2.4 para os estados de luz do tipo Schell, com a matriz densidade fazendo o papel da densidade espectral cruzada definida na teoria de coerência óptica. De fato, os estados de luz do tipo Schell também podem ser tratados através do formalismo de matriz densidade, conforme foi feito na Ref. [65].

A função de onda das moléculas de fulereno que deixam a fenda de largura  $b_0$  na direção transversa é dada por

$$\psi_{k_x}(\bar{x},0) = \frac{1}{\sqrt{b_0\sqrt{\pi}}} \exp(-\frac{\bar{x}^2}{2b_0^2} + ik_x\bar{x}), \qquad (3.12)$$

onde  $k_x$  é o número de onda transverso. A função de onda no anteparo é dada por

$$\psi_{k_x}(x,t) = \int d\bar{x} G(x,t;\bar{x},0)\psi_{k_x}(\bar{x},0), \qquad (3.13)$$

onde

$$G(x,t;\bar{x},0) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{im}{2\hbar t} \left(x-\bar{x}\right)^{2}\right],$$
(3.14)

e  $t = z_2/v_z$  é o tempo de propagação da fenda ao detetor, sendo  $v_z$  a velocidade mais provável na direção z, e  $z_2$  a distância da fenda ao detetor.

Após algumas manipulações algébricas obtemos para a função de onda normalizada no detetor, o resultado

$$\psi_{k_x}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi B(t)}}} \exp\left[-\frac{1}{2B^2(t)} \left(x - \frac{b_0^2 t}{\tau_0} k_x\right)^2\right] \\ \times \exp\left[\frac{i\mu(t)}{2} + \frac{im}{2\hbar R(t)} \left(x^2 - b_0^4 k_x^2 + \frac{2mb_0^4}{\hbar t} x k_x\right)\right], \quad (3.15)$$

onde B(t),  $R(t) \in \mu(t)$  são dados pelas equações (3.3), (3.4) e (3.5), respectivamente.

Devido à produção térmica o feixe conterá diferentes componentes  $k_x$ , embora ele tenha sido colimado [54]. O feixe é uma mistura incoerente de funções de onda com número de onda  $k_x$  distribuído aleatoriamente de acordo com a distribuição de probabilidade  $\tilde{\mathbf{g}}^{(0)}(k_x)$ . Essa distribuição depende da geometria do objeto colimador, fonte secundária, o qual reduz a largura produzida termicamente na direção x. O índice 0 representa o plano da fonte secundária (plano do colimador), o que significa que a perda de coerência produzida no feixe é devida à fonte, apenas. A matriz densidade do feixe no tempo t é dada por

$$\rho(x, x', t) = \int dk_x \widetilde{\mathbf{g}}^{(0)}(k_x) \psi_{k_x}(x, t) \psi_{k_x}^*(x', t).$$
(3.16)

Para simplificar, vamos tomar uma distribuição de probabilidade do vetor de onda  $k_x$  que seja dada por uma função gaussiana centrada em  $k_x = 0$  e de largura  $\Delta k_x = \delta_{k_x}/\sqrt{2}$ , i.e.,

$$\widetilde{\mathbf{g}}^{(0)}(k_x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\delta_{k_x}} \exp\left(-\frac{k_x^2}{\delta_{k_x}^2}\right),\tag{3.17}$$

o que nos permite obter, para a matriz densidade da equação (3.16), o seguinte resultado

$$\rho(x, x', t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\bar{B}(t)} \exp\left[-\frac{(x+x')^2 + \mathcal{M}_P^4(x-x')^2}{4\bar{B}^2(t)}\right] \exp\left[\frac{im}{2\hbar\bar{R}(t)}(x^2 - x'^2)\right].$$
(3.18)

onde

$$\bar{B}(t) = b_0 \left[ 1 + \left(\frac{t}{\bar{\tau}_0}\right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \qquad (3.19)$$

$$\bar{R}(t) = t \left[ 1 + \left(\frac{\bar{\tau}_0}{t}\right)^2 \right], \qquad (3.20)$$

$$\bar{\tau}_0 = \mathcal{M}_P^{-2} \tau_0, \qquad (3.21)$$

е

$$\mathcal{M}_{P}^{2} = \sqrt{1 + b_{0}^{2} \delta_{k_{x}}^{2}}.$$
(3.22)

A barra foi usada para diferenciar os parâmetros do estado gaussiano não puro de ondas de matéria dos respectivos parâmetros de um estado gaussiano puro. Observamos que a matriz densidade da equação (3.18) é um estado não-puro devido à incoerência da fonte. A quantidade  $\mathcal{M}_P^2$  é o fator de qualidade do feixe de partículas, onde usamos o índice P para diferenciar do fator  $\mathcal{M}$  usado anteriormente para feixes de luz. A quantidade  $\bar{\tau}_0$ é a generalização da definição de tempo de envelhecimento [56] (escala de tempo) para estados gaussianos de ondas de matéria parcialmente coerentes. Vemos que esta quantidade é sempre menor que o tempo de envelhecimento de estados gaussianos puros  $\tau_0$ , e neste caso os estados gaussianos não puros se alargarão mais rápido com o tempo que os estados gaussianos puros. No limite coerente  $\delta_{k_x} \to 0$  (colimação ideal), obtemos os parâmetros do estado gaussiano puro da seção 3.1.

No limite  $t \to 0$  (o plano da fonte), temos

$$\rho^{(0)}(x,x') = \frac{1}{\sqrt{\pi}b_0} \exp\left[-\frac{(x^2 + x'^2)}{2b_0^2}\right] \exp\left[-\frac{(x - x')^2}{2\ell_{0x}^2}\right],$$
(3.23)

onde  $\ell_{0x} = (\delta_{k_x}/\sqrt{2})^{-1}$  é o comprimento de coerência transverso no plano da fonte. O último termo desta equação faz o papel do grau de coerência espectral se compararmos a equação (3.23) com a equação (2.29). Vemos que a dependência deste termo com a posição transversa aparece como a diferença entre as posições e, neste caso, a fonte de fulerenos é uma fonte do tipo Schell. Novamente, a fonte de fulerenos à qual nos referimos aqui é a fenda de colimação e não o forno.

De posse da matriz densidade, obtemos a intensidade no detetor fazendo x = x' e  $t = z_2/v_z$ , i.e.,

$$I(x,t) = \rho(x,x,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\bar{B}(t)} \exp\left[-\frac{x^2}{\bar{B}^2(t)}\right].$$
 (3.24)

A seguir, calculamos os novos elementos da matriz de covariância e obtivemos os seguintes resultados

$$\sigma_{xx} = \langle \hat{x}^2 \rangle = \int dx x^2 \rho(x, x, t)$$
$$= \frac{b_0^2}{2} \left[ 1 + \left(\frac{t}{\bar{\tau}_0}\right)^2 \right], \qquad (3.25)$$

$$\sigma_{pp} = \langle \hat{p}^2 \rangle = \int \left[ \int dx \psi_{k_x}^*(x', t) (-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}) \psi_{k_x}(x, t) \right]_{x=x'} \widetilde{\mathbf{g}}^{(0)}(k_x) dk_x$$
$$= \frac{\hbar^2}{2} \frac{\mathcal{M}_P^4}{b_0^2}, \tag{3.26}$$

е

$$\sigma_{xp} = \langle \frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{2} \rangle = \int \left[ \int dx \psi_{k_x}^*(x', t) x(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi_{k_x}(x, t) \right]_{x=x'} \widetilde{\mathbf{g}}^{(0)}(k_x) dk_x$$
$$= \frac{\hbar}{2} \mathcal{M}_P^2 \left( \frac{t}{\bar{\tau}_0} \right). \tag{3.27}$$

Com esses novos elementos, obtemos o seguinte resultado para o determinante da matriz de covariância

$$\det \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xp} \\ & & \\ \sigma_{xp} & \sigma_{pp} \end{pmatrix} = \mathcal{M}_P^4 \frac{\hbar^2}{4}.$$
 (3.28)

Esse resultado mostra que o determinante da matriz de covariância continua independente do tempo, mas possui um valor diferente de  $\frac{\hbar^2}{4}$ , pois temos agora um estado incoerente.

## 3.3.1 Efeito da Convolução com o Detetor

Aqui, analisamos a influência do tamanho do detetor na largura do feixe atômico medido. Esse efeito é obtido através da convolução com o detetor. Ele aparece quando conhecemos a solução para um detetor puntual (detetor ideal) e queremos saber a solução para um detetor que tenha um certo tamanho finito. O efeito do detetor torna-se mais visível à medida que o tamanho do objeto que queremos medir, neste caso a largura de um feixe de fulerenos, torna-se menor que o tamanho do detetor.

Devido ao efeito do detetor, a intensidade realmente medida ou intensidade efetiva  $I_{ef}(x,t)$  será uma convolução da função resolução do detetor D(x) com a intensidade I(x,t) calculada através da integral de convolução [85], i.e.,

$$I_{ef}(x,t) = I(x,t) \otimes D(x) = \int_{-\infty}^{\infty} I(x',t)D(x-x')dx'.$$
 (3.29)

Para simplificar os cálculos, supomos que o detetor é representado por uma

função gaussiana, i.e.,

$$D(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_D}} e^{-x^2/2\sigma_D^2},$$
 (3.30)

onde  $\sigma_D$  representa a largura do detetor.

Substituindo a equação (3.30) na equação (3.29) obtemos para a intensidade efetiva o resultado

$$I_{ef}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{1}{2\sigma_D^2 + \bar{B}^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_D^2 + \bar{B}^2}\right).$$
 (3.31)

A variância  $\sigma_{xx}$  efetiva vale

$$\sigma_{xx}^{ef} = \langle \hat{x}^2 \rangle = \int dx x^2 I_{ef}(x,t)$$
$$= \sigma_D^2 + \frac{\bar{B}^2}{2}.$$
(3.32)

Na Fig. 3.5, comparamos os gráficos para as intensidades no detetor  $I_{ef}(x,t)$  e I(x,t) em função de x para dois diferentes valores da largura da fenda de difração. No gráfico à esquerda, observamos que o efeito da convolução quase não existe quando o feixe é difratado por uma fenda muito pequena, para o gráfico à direita, onde aumentamos a largura da fenda, esse efeito torna-se bastante visível devendo, portanto, ser levado em conta no experimento. O mesmo efeito de incoerência da fonte, representado por  $\delta_{k_x}$ , foi levado em conta na obtenção de ambas as curvas de intensidade. A justificativa para termos um menor efeito da convolução com o detetor para o caso do feixe difratado com uma fenda bastante pequena em comparação com o caso do feixe difratado com uma fenda maior é que a largura do feixe difratado com vana fenda pequena é bem maior que a largura do detetor, como veremos a seguir, quando ajustarmos o modelo com os dados experimentais da Ref. [1].

A seguir, estudamos os efeitos das interações de van der Waals entre as moléculas de fulereno e as paredes da fenda de difração. Esses efeitos também podem alterar os resultados para a difração de moléculas de fulereno uma vez que essas interações podem causar uma alteração no momento da partícula.



Figura 3.5: Curva à esquerda mostra as intensidades medidas no detetor após a onda de matéria passar por uma fenda de largura  $b_0 = 70$  nm e curva à direita mostra as intensidades para uma fenda de largura  $b_0 = 1, 4 \ \mu m$ . Linha pontilhada representa a intensidade não-convoluída e linha cheia a intensidade convoluída. As curvas mostram que o efeito da convolução com o detetor deve ser levado em conta no experimento. O mesmo efeito de incoerência, representado por  $\delta_{k_x}$ , foi levado em conta em ambas as curvas.

## 3.3.2 Efeito da Interação de van der Waals

Aqui, discutimos um pouco os efeitos das interações de van der Waals (vdW) na difração de moléculas de fulereno por fendas de nitrato de silício (SiNx). Tais interações podem ocorrer entre dois átomos, entre duas moléculas, entre um átomo e uma superfície e entre uma molécula e uma superfície [86]. No caso presente, as interações ocorrem entre as moléculas de fulereno e a superfície da fenda de SiNx, são atrativas e de longo alcance com potencial da forma [86, 87]

$$V = -\frac{C_3}{r^3},$$
 (3.33)

onde r é a distância do centro da molécula à parede da fenda e  $C_3$  um fator que depende da molécula de fulereno, seus estados eletrônicos e dos estados eletrônicos do material da fenda [86].

O coeficiente  $C_3$  para forças de vdW entre átomo (ou molécula) e superfície é dado pela expressão de Lifshitz [88]

$$C_3 = \frac{\hbar}{4\pi} \int_0^\infty d\omega \alpha(i\omega) \varrho(i\omega), \qquad (3.34)$$

onde  $\alpha(i\omega)$  é a polarizabilidade dinâmica do átomo e  $\rho(i\omega)$  a correspondente

resposta dos elétrons do material da superfície. Uma expressão correspondente à (3.34) e mais simples é obtida na Ref. [86] para forças de vdW entre átomos e uma superfície de SiNx, onde o átomo e a superfície são considerados osciladores individuais de frequências  $E_a/\hbar$  para o átomo e  $E_s/\hbar$  para a superfície, i.e.,

$$C_3^{1osc} = \alpha_0 \varrho_0 \frac{E_a E_s}{8(E_a + E_s)}.$$
 (3.35)

Aqui,  $\alpha_0$  é a polarizabilidade elétrica estática do átomo,  $\rho_0 = \rho(i\omega \to 0) = 0,588$  é o limite estático para os elétrons do  $SiN_x$ ,  $E_s = 13$  eV e  $E_a$  é dada pela expressão

$$E_a = \frac{4C_6}{3\alpha_0^2},$$
 (3.36)

onde  $C_6$  é o coeficiente de interação de vdW entre dois átomos.

Usando os valores aproximados  $C_6 \approx 39, 6 \text{ meV nm}^6 [89] e \alpha_0 \approx 0, 103 \text{ nm}^3$ [90], obtemos  $C_3^{SiN_x-C_{70}} \approx 0, 03 \text{ eV nm}^3$  para o coeficiente de interação de vdW entre moléculas de fulereno  $C_{70}$  e uma superfície de  $SiN_x$ . Na Ref. [91], os autores obtiveram  $C_3^{(Au-C_{70})} \approx 0, 09 \text{ eV nm}^3$  para o coeficiente de interação de vdW entre moléculas de fulereno  $C_{70}$  e uma superfície de ouro.

A seguir, fizemos algumas estimativas que nos permitiram identificar qual a largura limite da fenda para que as interações de vdW entre as moléculas de fulereno e a fenda de  $SiN_x$  sejam relevantes. A força de vdW é dada por  $F = -\partial V/\partial r = -3C_3/r^4$ . Para uma fenda de largura  $b_0 = 70$  nm, considerando que a molécula de fulereno passa mais ou menos no meio da fenda, temos  $r = b_0/2 = 35$  nm e  $F = -9,6 \times 10^{-18}$  N. A espessura da fenda vale  $\Delta z = 200$  nm [53], o que implica um tempo de interação de  $\Delta t = \Delta z/v_z \approx 1$ ns. A variação de momento sofrida pela molécula a<br/>o passar pela fenda será igual a  $\Delta p = F \Delta t \approx 9, 6 \times 10^{-27}$  kg m/s. O momento inicial da molécula ao penetrar na fenda vale  $p_z = mv_z = 3, 4 \times 10^{-22}$  kg m/s, assim, obtemos  $\Delta p/p_z = 3, 4 \times 10^{-5}$ . Se fizermos os mesmos cálculos para uma fenda com largura da ordem de  $b_0 = 1 \ \mu m$ , obtemos  $\Delta p/p_z \approx 10^{-9}$ . Esses dados indicam que as interações de vdW entre as moléculas de fulereno e uma fenda de  $SiN_x$  devem ser relevantes apenas para valores de fenda menores que aqueles utilizados no experimento. Neste caso, o fator 1/3 que utilizamos na Ref. [39] para corrigir possíveis efeitos de vdW para pequenos valores de largura de fenda deve ser substituído por um erro de  $\pm 30$  nm na medida da largura da fenda [1].

O resultado experimental para a largura  $W_{FWHM}$  (largura completa em meio máximo) no detetor, realizado pelo grupo de A. Zeilinger em Ref. [1] é mostrado na Fig. 3.6 e comparado com nosso cálculo teórico, equação (3.32) (onde  $W_{FWHM} = 2\sqrt{2 \ln 2\sigma_{xx}^{ef}}$ ). Os pontos são os dados experimentais extraídos da Ref. [1], a curva tracejada é a largura do feixe com efeito de incoerência e sem a convolução com o detetor e a curva sólida leva em conta ambos os efeitos. Essas curvas mostram que, para ajustarmos os pontos experimentais com o modelo teórico, devemos levar em conta a convolução com o detetor e a coerência parcial da fonte de fulerenos. Para levarmos em conta a convolução com o detetor, usamos um detetor de largura FWHMda ordem de 12  $\mu$ m, onde tomamos como base o valor citado em [1]. O parâmetro que mede a coerência parcial na direção transversa do feixe que melhor ajusta os dados experimentais é dado por  $\delta_{kx} = 9.0 \times 10^6 \text{ m}^{-1}$ .



Figura 3.6: Largura do feixe de moléculas de fulereno  $C_{70}$  em função da largura da fenda. Curvas sólida e tracejada correspondem ao nosso cálculo equação (3.32) e os pontos são os resultados experimentais obtidos na Ref. [1]. Curva tracejada corresponde ao caso incoerente sem convolução com o detetor e curva sólida corresonde ao caso onde ambos os efeitos foram levados em conta. Para o ajuste do cálculo teórico com os dados experimentais usamos  $\delta k_x = 9, 0 \times 10^6 \text{m}^{-1}$  e  $t = z_2/v_z = 6, 65 \text{ms}$ .

Com esse valor de  $\delta_{k_x}$  calculamos o comprimento de coerência transverso inicial, i.e.,  $\ell_{0x} = \ell_x(t=0)$  e obtivemos  $\ell_{0x} = (\delta_{k_x}/\sqrt{2})^{-1} \approx 1, 3 \times 10^{-7}$  m. Como não levamos em consideração o acoplamento com o ambiente em nosso modelo, o comprimento de coerência inicial permanece constante, i.e.,  $\ell_x(t) = \ell_{0x}$ . Para compararmos o valor do comprimento de coerência com o valor do comprimento de onda, calculamos  $\lambda_P$  através da equação  $\lambda_P \approx \lambda_z = h/mv_z$ (onde  $v_z \approx 200$  m/s é a velocidade mais provável) e obtivemos  $\lambda_P \approx 2,5$  pm. Assim, temos  $\ell_{0x} \gg \lambda_P$ , e a condição de feixe de fulerenos é garantida (fonte localmente coerente) conforme discutido na seção 2.4 para os estados de luz do tipo Schell, onde estamos usando  $\ell_{0x}$  no lugar de  $\sigma_g$  para representar o comprimento de coerência transverso. O ângulo de divergência do feixe de fulerenos produzido na fonte secundária (fenda de colimação) pode ser calculado através da expressão (2.40), pois a dimensão da fonte é muito maior que o comprimento de coerência transverso, i.e.,  $\sigma_0 \gg \ell_{0x}$ . Fazendo isso, obtemos

$$\bar{\theta}_0 \approx \left(\frac{\lambda_P}{\pi \ell_{0x}}\right) = 6, 1 \ \mu \text{rad},$$
(3.37)

um valor compatível com o valor experimental citado na Ref. [71] ( $2 \le \theta \le 10 \,\mu$ rad).

A faixa de comprimentos de onda ao longo da direção x é dada por

$$\Delta \lambda_x = \frac{2\pi}{\Delta k_x} = 986 \text{ nm}, \qquad (3.38)$$

onde  $\Delta k_x = \delta_{k_x}/\sqrt{2} = 6,4 \times 10^6 \text{ m}^{-1}$ . O valor obtido para a faixa de comprimentos de onda transversos é da mesma ordem de grandeza do comprimento de coerência  $\ell_{0x}$ , o que justifica a existência de efeitos quânticos ao longo desta direção. O comprimento de coerência na direção longitudinal vale  $\ell_{0z} = (v/\Delta v)\lambda_P \approx 5 \text{ pm}$ , que também é da mesma ordem de grandeza do comprimento de onda nesta direção e, assim, a justificativa para tratarmos a direção z como clássica é devido ao fato de que a distância do detetor é muito maior que  $\lambda_z$ , i.e.,  $z_2 \gg \lambda_z$ . A componente do vetor de onda na direção z vale  $k_z = mv_z/\hbar \approx 2,24 \times 10^{12} \text{ m}^{-1}$ . Os valores encontrados para  $k_z$  e  $\Delta k_x$  mostram que  $k_z \gg \Delta k_x$  e assim, a aproximação paraxial discutida no capítulo 2 é garantida para o feixe parcialmente coerente.

# **3.4** Covariância $\sigma_{xp}$ e Fase de Gouy

Nesta seção, calculamos a covariância entre posição e momento e a fase de Gouy dos fulerenos a partir dos dados experimentais da Ref. [1]. Para obtermos a fase de Gouy de um estado gaussiano misto usamos uma definição de fase de Gouy que é válida para estados puros. Calculamos a fase e mostramos que ela também está relacionada com a covariância  $\sigma_{xp}$  assim como acontece no caso de estados gaussianos puros.

Partindo do determinante da matriz de covariância para um estado gaussiano misto, equação (3.28), podemos expressar  $\sigma_{xp}$  em termos da largura do feixe, i.e.,

$$\sigma_{xp} = \frac{\hbar \mathcal{M}_P^2}{2} \left[ \left( \frac{W_{FWHM}}{2\sqrt{\ln 2}b_0} \right)^2 - 1 \right]^{\frac{1}{2}}, \qquad (3.39)$$

onde  $W_{FWHM}$  é medido no laboratório. A curva para  $\sigma_{xp}$  obtida com os dados experimentais da Ref. [1], equação (3.39), é mostrada na Fig. 3.7 e comparada com o valor teórico, equação (3.27). Na obtenção de  $\sigma_{xp}$ , a partir de  $W_{FWHM}$ , aproximamos o fator  $2\sqrt{\ln 2}$  por 2 na equação (3.39) para obtermos um melhor ajuste com os valores teóricos. No ajuste, também multiplicamos a curva teórica por um fator constante uma vez que os pontos foram obtidos a partir de uma largura de feixe convoluída e a covariância teórica não leva em consideração esse efeito. A diferença em relação à curva retilínea para a covariância mostrada na Fig. 2.4 para ondas de luz ocorre porque no caso das ondas de luz estamos tratando da covariância em função da direção de propagação e para o caso das ondas de matéria estamos tratando da covariância em função da largura da fenda de difração.

#### 3.4.1 Fase de Gouy de um Estado Misto

Na Ref. [25], Simon e Mukunda deram uma interpretação geométrica para a fase de Gouy. De fato, para obter tal interpretação, os autores partiram da analogia existente entre a equação paraxial de Helmholtz para a luz clássica e a equação de Schrödinger para uma partícula livre e usaram a definição quântica de fase geométrica em termos dos invariantes de Bargmann [92, 93]. Uma definição mais recente justifica a origem física da fase de Gouy em termos do alargamento espacial, governado pela relação de incerteza, de um feixe cuja distribuição transversa do campo é uma função gaussiana (ou



Figura 3.7: Covariância x - p em função da largura da fenda. Curva sólida corresponde ao nosso cálculo, equação (3.27), e os pontos foram obtidos do experimento realizado na Ref. [1] através da equação (3.39). Os parâmetros são os mesmos da Fig. 3.6.

arbitrária) [28]. De acordo com a equação (11) da Ref. [28] a fase  $\mu(t)$  e a largura do feixe B(t) para um estado gaussiano puro de ondas de matéria estão relacionadas pela expressão

$$\mu(t) = -\frac{\hbar}{2m} \int^{t} \frac{\mathrm{d}t}{B(t)^{2}}.$$
(3.40)

Aqui, conjecturamos, com base nos resultados obtidos, que essa definição se mantém para estados gaussianos parcialmente coerentes uma vez que o alargamento desses estados também é governado pela relação de incerteza. Assim, para o estado dado na equação (3.18), a fase de Gouy é

$$\mu(t) = -\frac{1}{2\mathcal{M}_P^2} \arctan\left(\frac{t}{\bar{\tau}_0}\right),\tag{3.41}$$

onde o fator  $\frac{1}{2}$  aparece pelo fato de estarmos trabalhando em uma única dimensão. Note que, novamente  $\mu(t)$  está relacionada ao  $\sigma_{xp}$  e é afetada pela coerência parcial do pacote de onda inicial, i.e.,

$$\mu(t) = -\frac{1}{2\mathcal{M}_P^2} \arctan\left(\frac{2\sigma_{xp}}{\hbar\mathcal{M}_P^2}\right).$$
(3.42)

Na Fig. 3.8, mostramos a fase extraída da equação (3.42). Como esper-

ado, a variação da fase é de  $\pi/4$ , pois estamos tratando de um problema de difração unidimensional e a propagação do feixe vai de t = 0 até  $t = z_2/v_z$ [28]. Este resultado mostra que a existência de uma fase de Gouy é compatível com os dados experimentais envolvendo a difração de moléculas de fulereno. Ele é uma evidência indireta de fase de Gouy para as ondas de matéria.



Figura 3.8: Fase de Gouy em função da largura da fenda. Curva sólida corresponde ao nosso cálculo, equação (3.41), e os pontos foram obtidos do experimento reportado na Ref. [1]. Os parâmetros são os mesmos da Fig. 3.6.

Os resultados deste capítulo estão publicados na Ref.: *Phys. Lett. A* **374**, 1660 (2010), cuja cópia apresentamos em anexo.

Talvez a expressão certa para o cálculo da fase seja a equação (2.47) e não a equação (3.41), uma vez que os estados quânticos dos fulerenos são análogos aos estados de luz do tipo Schell. O ajuste dos pontos usando a equação (2.47) é mostrado na Fig. 3.9. Embora este novo ajuste pareça estar



Figura 3.9: Fase de Gouy em função da largura da fenda ajustada através da definição (2.47). Curva sólida corresponde à equação (2.47), e os pontos foram obtidos do experimento reportado na Ref. [1]. Os parâmetros são os mesmos da Fig. 3.6.

correto, uma definição mais rigorosa para a fase de Gouy de um estado misto de ondas de matéria que corrobore com os dados experimentais ficará para um trabalho futuro.

# Lentes Quânticas e Fase de Gouy em Ondas de Matéria

Este capítulo é dedicado à análise teórica de uma lente quântica para focalizar átomos. Nosso objetivo principal aqui é analisar as propriedades da fase de Gouy para ondas de matéria em torno do foco dessa lente. Ou seja, queremos saber se a mesma anomalia de fase que ocorre com os feixes de luz ao serem focalizados, ocorre para ondas de matéria. Na seção 4.1, tratamos a interação entre um átomo e um campo eletromagnético pois esta interação vai produzir o efeito de lente para a matéria. Na seção 4.2 descrevemos a lente quântica. Na seção 4.3, propomos um experimento com átomos de césio e calculamos alguns parâmetros experimentais, onde obtivemos valores inviáveis à tecnologia experimental atual [40].

# 4.1 Interação Átomo e Campo

Consideramos, nesta seção, um modelo simples de interação entre átomo e campo no qual um único modo do campo eletromagnético quântico é acoplado a um átomo de dois níveis. Este tipo de interação é conhecido como modelo de Jaynes-Cummings [94, 95, 96]. Por muito tempo, este esquema foi apenas um modelo teórico mas, devido aos modernos desenvolvimentos em óptica quântica, em particular a construção de cavidades de microondas de altos fatores de qualidade, tornou-se possível sua realização experimental [112, 113, 124]. Para entendermos melhor, vamos para a Fig. 4.1, o átomo de dois níveis, na realidade, é um átomo no qual apenas uma determinada transição entre dois níveis de energia acopla bem com um determinado modo da cavidade, qualquer outra faixa de transição é totalmente dessintonizada deste modo. Vamos supor que a faixa de transição que acopla com o modo do campo é representada pelos estados atômicos internos definidos por

$$|g\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix} \tag{4.1}$$

е

$$|e\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix}, \tag{4.2}$$

denominados, respectivamente, estado fundamental e excitado com energias dadas por  $E_g$  e  $E_e$ , onde  $E_g < E_e$ . A frequência de transição entre esses níveis é dada por  $\omega_{ge} = (E_e - E_g)/\hbar$ .



Figura 4.1: Átomo de dois níveis interagindo com um modo do campo na cavidade.

Quantizando o campo na cavidade, Fig. 4.1 à direita, obtemos para o operador energia o resultado [22, 83, 96, 97]

$$\hat{H}_{campo} = \hbar \sum_{j=0} \omega_j \hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_j, \qquad (4.3)$$

onde desconsideramos o termo de energia de ponto zero. Daqui para a frente, consideraremos que o modo que acopla com a transição  $g \leftrightarrow e$  tem frequência  $\omega_j = \omega_c$ .

#### Aproximação de Dipolo

Para obtemos o hamiltoniano de interação, que representaremos aqui por  $\hat{H}_{int}$ , consideramos que o átomo é formado por um único elétron de valência e que o campo altera apenas o estado deste elétron, uma vez que os elétrons restantes estão fortemente ligados ao núcleo. Neste caso, a contribuição importante para o momento de dipolo atômico é a correspondente ao momento de dipolo do elétron de valência dada por  $\vec{\wp} = e\vec{x}_e$ , onde e é a carga do elétron e  $\vec{x}_e$  a posição do elétron de valência relativa ao núcleo. Além disso, consideramos que o comprimento de onda do campo é muito maior que o tamanho do átomo, de maneira que o campo não muda consideravelmente ao longo do átomo. As considerações acima constituem a chamada aproximação de dipolo e, nesse caso, o hamiltoniano de interação é dado por [83, 96, 97]

$$\hat{H}_{int} = -\hat{\vec{\wp}} \cdot \vec{\vec{E}}(\hat{\vec{x}}, t), \qquad (4.4)$$

onde  $\hat{\vec{p}}$  é o operador momento de dipolo elétrico,  $\hat{\vec{x}}$  é o operador posição do centro de massa e  $\hat{\vec{E}}(\hat{\vec{x}},t)$  o operador de campo elétrico. Os auto-estados de energia do átomo na representação de posição  $\psi_i(\vec{x})$  (i = g, e) possuem paridade bem definida e, nesse caso

$$\langle i | \hat{\vec{x}} | i \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3 x |\psi_i(\vec{x})|^2 \vec{x} = 0,$$
 (4.5)

uma vez que  $|\psi_i(\vec{x})|^2$  tem paridade par e  $\vec{x}$  tem paridade ímpar. Assim, obtemos para operador momento de dipolo

$$\hat{\vec{\wp}} = \vec{\wp}\hat{\sigma}^{\dagger} + \vec{\wp^*}\hat{\sigma}, \tag{4.6}$$

onde  $\vec{\varphi} \equiv \langle e | \hat{\vec{\varphi}} | g \rangle$ ,  $\hat{\sigma} \equiv | g \rangle \langle e |$  faz a transição do estado excitado para o estado fundamental e  $\hat{\sigma}^{\dagger} \equiv | e \rangle \langle g |$  faz a transição do estado fundamental para o estado excitado. O operador de campo elétrico é dado por [22, 82, 83, 96]

$$\vec{E}(\hat{\vec{x}},t) = \mathcal{E}_0 \vec{u}(\hat{\vec{x}}) i \left[ \hat{a}(t) - \hat{a}^{\dagger}(t) \right], \qquad (4.7)$$

onde  $\mathcal{E}_0$  é a amplitude do campo elétrico no vácuo,  $\vec{u}(\hat{\vec{x}})$  é a função modo espacial da cavidade dependente da posição do centro de massa do átomo  $\hat{\vec{x}}$ . Assim, o hamiltoniano que representa a interação entre átomo e campo,

equação (4.4), vale

$$\hat{H}_{int} = \hbar \Omega_R(\hat{\vec{x}})(\hat{\sigma}^{\dagger} - \hat{\sigma})(\hat{a} - \hat{a}^{\dagger}), \qquad (4.8)$$

onde  $\Omega_R(\vec{x}) = |\vec{\varphi} \cdot \vec{u}(\vec{x})| \mathcal{E}_0/\hbar$  é a frequência de Rabi no vácuo dependente da posição.

No momento, vamos desprezar o movimento do centro de massa dos átomos na direção transversa (x, y) e considerar a dependência do campo com a direção z do movimento do centro de massa dos átomos constante. Neste caso, a frequência de Rabi pode ser considerada uma constante, i.e.,  $\Omega_R(\vec{x}) = \Omega_0$ , onde  $\Omega_0 = \wp \mathcal{E}_0/\hbar$  é o seu valor de pico. Os efeitos do movimento do centro de massa na direção transversa serão considerados a seguir quando descrevermos a lente quântica para átomos. Nesse caso, o hamiltoniano que representa a energia total do sistema na aproximação de dipolo é dado por

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int},\tag{4.9}$$

onde

$$\hat{H}_0 = \hbar \omega_c \hat{a}^{\dagger} \hat{a} + \frac{1}{2} \hbar \omega_{ge} \hat{\sigma}_z, \qquad (4.10)$$

representa o hamiltoniano livre do sitema global, com  $\hat{\sigma}_z = |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|$ sendo uma pseudo-matriz de Pauli.

#### Aproximação de Onda Girante

O hamiltoniano dado pela equação (4.9) possui alguns termos que não conservam o número de excitações, assim, para que possamos justificar a eliminação de tais termos vamos escrever este hamiltoniano na representação de interação. Nesta representação, o hamiltoniano do sistema global é dado por

$$\hat{H}_I = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}^I, \tag{4.11}$$

onde

$$\hat{H}_{int}^{I} = e^{i\hat{H}_{0}t/\hbar}\hat{H}_{int} \ e^{-i\hat{H}_{0}t/\hbar} \tag{4.12}$$

é o hamiltoniano de interação na representação de interação e  $\hat{H}_{int}$  é o hamiltoniano de interação na representação de Schrödinger. Substituindo

as equações (4.10) e (4.8) na equação (4.12), obtemos

$$\hat{H}_{int}^{I} = \hbar\Omega_0 \left[ \hat{a}^{\dagger} \hat{\sigma} \ e^{-i\Delta t} + \hat{a} \hat{\sigma}^{\dagger} \ e^{i\Delta t} - \hat{a}^{\dagger} \hat{\sigma}^{\dagger} \ e^{i(\omega_{ge} + \omega_c)t} - \hat{a} \hat{\sigma} \ e^{-i(\omega_{ge} + \omega_c)t} \right], \quad (4.13)$$

onde  $\Delta = \omega_{ge} - \omega_c$  é dessintonia entre átomo e campo.

A aproximação de onda girante consiste em desprezarmos o terceiro e o quarto termos do hamiltoniano (4.13), pois estes oscilam rapidamente uma vez que a frequência de oscilação envolve a soma das frequências da cavidade e da transição atômica, enquanto que os dois primeiros termos oscilam com a diferença dessas frequências. Fazendo isso, obtemos

$$\hat{H}_{int}^{I} = \hbar \Omega_0 \left( \hat{a}^{\dagger} \hat{\sigma} \ e^{-i\Delta t} + \hat{a} \hat{\sigma}^{\dagger} \ e^{i\Delta t} \right).$$
(4.14)

#### 4.1.1 Limite Ressonante

Para termos uma ideia do efeito do acoplamento do átomo com o campo vamos fazer a evolução temporal de um dado estado inicial para o caso ressonante, i.e., quando  $\Delta = 0$ . Na seção seguinte analisaremos o caso não ressonante. Vamos supor que o estado inicial do sistema átomo campo é dado por

$$|\psi_{AC}(0)\rangle = |e\rangle \otimes |n\rangle = |e, n\rangle, \qquad (4.15)$$

e para o estado final podemos supor a seguinte combinação linear

$$|\psi_{AC}(t)\rangle = C_{g,n+1}(t)|g,n+1\rangle + C_{e,n}(t)|e,n\rangle,$$
 (4.16)

onde  $|C_{g,n+1}(t)|^2 e |C_{e,n}(t)|^2$ são as probabilidades de encontrarmos o sistema nos estados  $|g, n + 1\rangle$  e  $|e, n\rangle$ , respectivamente. Agora, fazendo a evolução temporal na representação de interação

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_{AC}(t)\rangle = \hat{H}^{I}_{int} |\psi_{AC}(t)\rangle, \qquad (4.17)$$

obtemos para as probabilidades os resultados

$$|C_{e,n}(t)|^2 = \cos^2(\Omega_0 \sqrt{n+1}t), \qquad (4.18)$$

е

$$|C_{g,n+1}(t)|^2 = \sin^2(\Omega_0\sqrt{n+1}t).$$
(4.19)

O fato de termos probabilidades diferentes de zero, para determinados instantes de tempo, mostra que o átomo pode sofrer transição para o caso de interação ressonante. Como veremos a seguir, para o caso de forte dessintonia  $\Delta$ , a probabilidade de haver transição é nula em qualquer instante de tempo.

## 4.1.2 Limite Dispersivo

Neste limite de interação, para o caso de forte dessintonia, a transição atômica acopla com o modo do campo na cavidade mas não ocorre troca de fótons entre o átomo e o campo. Uma maneira prática de tal interação ser produzida consiste em aplicarmos um campo elétrico para aumentar ou diminuir a separação entre os níveis atômicos tirando-os da condição de ressonância (efeito Stark). Como veremos a seguir, embora não ocorra troca de fótons nesse tipo de interação, os níveis atômicos internos ganham um termo de fase que depende do número de fótons do modo do campo na cavidade.

No limite de forte dessintonia, o hamiltoniano que governa a evolução dispersiva é dado por [96, 98]

$$\hat{H}_{ef} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_{int}^{I} \int^{t} \hat{H}_{int}^{I}(t') dt', \qquad (4.20)$$

onde a integral é avaliada no tempo sem a constante de integração. Assim, substituindo a equação (4.14), na equação (4.20), obtemos para o hamiltoniano efetivo que representa a interação dispersiva

$$\hat{H}_{ef} = \frac{\hbar\Omega_0^2}{\Delta} \left[ (\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + 1) |e\rangle \langle e| - \hat{a}^{\dagger}\hat{a}|g\rangle \langle g| \right].$$
(4.21)

Para calcularmos a probabilidade de transição para o caso fortemente dispersivo, vamos fazer a evolução temporal do estado inicial do sistema átomo e campo dado pela equação (4.15). O operador de evolução para o sistema, na representação de interação, é dado por [94]

$$\hat{U}(t) = \exp\left\{-i\frac{\Omega_0^2 t}{\Delta} \left[ (\hat{a}^{\dagger}\hat{a}+1)|e\rangle\langle e| - \hat{a}^{\dagger}\hat{a}|g\rangle\langle g| \right] \right\} \\
= e^{-i\frac{\Omega_0^2 t}{\Delta}} e^{\left(-i\frac{\Omega_0^2}{\Delta}t\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\right)} \otimes |e\rangle\langle e| + e^{\left(i\frac{\Omega_0^2}{\Delta}t\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\right)} \otimes |g\rangle\langle g|. \quad (4.22)$$

Assim, a evolução temporal do estado inicial dado pela equação (4.15) fornece

$$|\psi_{AC}(t)\rangle = \hat{U}(t)|e\rangle \otimes |n\rangle = \exp\left[-i(n+1)\frac{\Omega_0^2}{\Delta}t\right]|e\rangle \otimes |n\rangle, \qquad (4.23)$$

i.e., o estado final é igual ao estado inicial acrescido de uma fase que depende do número de fótons na cavidade. A probabilidade de encontrar o sistema no estado  $|g, n + 1\rangle$  uma vez que ele foi preparado no estado  $|e, n\rangle$  vale

$$|\langle g, n+1|\psi_{AC}(t)\rangle|^2 = 0, \qquad (4.24)$$

mostrando que em nenhum instante de tempo ocorre transição.

# 4.2 Lentes Quânticas

Nesta seção, mostramos uma maneira possível de construir uma lente quântica para focalizar átomos e que um feixe gaussiano de ondas de matéria sofre uma anomalia de fase na região em torno do foco dessa lente, semelhante ao que acontece com um feixe gaussiano de luz ao ser focalizado [40]. Nas subseções seguintes, descreveremos o modelo utilizado e mostraremos os resultados obtidos.

#### 4.2.1 Introdução

Átomos sob influência de campos eletromagnéticos (CEM) podem sofrer efeitos mecânicos, como desvios no movimento do seu centro de massa e deflexão [99]. Esta propriedade é bastante útil em óptica atômica, pois permite a construção de dispositivos capazes de focalizar feixes de átomos, de maneira análoga à focalização de um feixe luminoso por uma lente ordinária. De fato, a presença do campo acopla o movimento do centro de massa com os estados eletrônicos internos [100, 101] o que torna possível a produção de uma lente. Por este motivo, tais dispositivos são conhecidos como lentes quânticas.

#### 4.2.2 O Modelo

Átomos movendo-se ao longo da direção Oz penetram em uma região onde é mantido um campo eletromagnético estacionário com densidade de energia variando na direção transversal x, ver Fig. 4.2. Esta região se estende desde  $z = -L_c$  até z = 0. O momento atômico na direção Oz é tal que o comprimento de onda de de Broglie associado é muito menor que o comprimento de onda do campo eletromagnético. O movimento atômico ao longo desta coordenada pode ser considerado, para todos os efeitos, clássico. Os efeitos quânticos serão considerados apenas ao longo da coordenada x, e a lente obtida representa uma lente cilíndrica.



Figura 4.2: Efeito de uma lente quântica para átomos. Diferentes estados de Fock defletem o feixe atômico em diferentes ângulos e focaliza o feixe em diferentes pontos. Campo eletromagnético estacionário com densidade de energia variando na direção transversal x e constante na direção longitudinal z. Figura retirada da Ref. [96].

Atomo e CEM interagem dispersivamente e esta interação é governada pelo hamiltoniano equação (4.21), acrescido do movimento do centro de massa

$$\hat{H}_{ef} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hbar\Omega_R^2(\hat{x})}{\Delta} \left[ (\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + 1)|e\rangle\langle e| - \hat{a}^{\dagger}\hat{a}|g\rangle\langle g| \right], \qquad (4.25)$$

onde m é a massa do átomo,  $\hat{p}_x$  e  $\hat{x}$  são os operadores momento linear e posição atômica ao longo da direção Ox,  $\hat{a}^{\dagger}$  e  $\hat{a}$  são os operadores de criação e de destruição de um fóton do modo do CEM [22, 82, 83]. Para simplificar, consideramos a dependência da frequência de Rabi com a direção z como sendo uma constante, por exemplo uma barreira retangular representada por uma função degrau [96]. A frequência de Rabi  $\Omega_R(x)$  varia transversalmente com o movimento dos átomos segundo a distribuição do campo. Esta variação cria gradientes não nulos para a energia e consequentemente forças na direção x sobre o centro de massa dos átomos. Como os dois subsistemas interagem dispersivamente, o átomo não muda de estado interno ao interagir com a cavidade, permanecendo em seu estado interno inicial. Por exemplo, supondo que o átomo entra na cavidade no estado  $|g\rangle$ , o hamiltoniano é simplificado para

$$\hat{H}_{AF} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + g\left(\hat{x}\right)\hat{a}^{\dagger}\hat{a}.$$
(4.26)

O acoplamento entre átomo e campo é dado pela função  $g(x) = -\frac{\hbar}{\Delta}\Omega_R^2(x)$ . O vetor de onda do modo do CEM  $\vec{k}$  é paralelo ao eixo Ox e o tempo efetivo de interação é  $t_{L_c} = L_c/v_z$ .

A evolução do sistema átomo e campo é dada pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}\left|\Psi\right\rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{H}_{AF}\left|\Psi\right\rangle$$

Em t = 0, o estado do sistema é produto direto do estado  $|\psi_{CM}\rangle$  do movimento transversal atômico com o estado do campo  $|\psi_F\rangle$ ,  $|\Psi(0)\rangle = |\psi_{CM}\rangle \otimes$  $|\psi_F\rangle$ . O estado  $|\psi_F\rangle$  pode ser expandido em uma superposição coerente de autoestados do operador número de fótons  $\hat{n} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}$ , i.e.,

$$|\psi_F\rangle = \sum_n w_n |n\rangle, \ \sum_n |w_n|^2 = 1.$$

Quando átomo e campo interagem, os estados atômicos e do campo tornam-se entrelaçados. Pode-se, então, escrever

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n} w_n \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \,\psi_n(x,t) \,|x\rangle \otimes |n\rangle \,, \qquad (4.27)$$

onde a função  $\psi_n(x,t)$  satisfaz

$$i\hbar\frac{\partial\psi_n\left(x,t\right)}{\partial t} = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + g\left(x\right)n\right\}\psi_n\left(x,t\right) . \tag{4.28}$$

Escrevendo  $|\psi_n(t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \,\psi_n(x,t) \,|x\rangle$ , a equação acima toma a forma

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}\left|\psi_{n}\left(t\right)\right\rangle}{\mathrm{d}t} = \left[\frac{\hat{p}_{x}^{2}}{2m} + g\left(\hat{x}\right)n\right]\left|\psi_{n}\left(t\right)\right\rangle.$$

$$(4.29)$$

#### 4.2.2.1 Aproximação Harmônica

Segundo Schleich [96], se a largura transversal  $b_0$  do pacote de ondas inicial  $\psi_n(x)$  satisfizer a condição  $b_0 < \lambda$  (ver Fig. 4.3), onde  $\lambda$  é o comprimento

de onda do CEM, a função g(x) pode ser expandida em torno de x = 0 em uma série de Taylor



Figura 4.3: Aproximação harmônica.

$$g(x) = g_0 + g_1 x + \frac{1}{2} g_2 x^2 + \dots \approx g_0 - \frac{g_1^2}{2g_2} + \frac{1}{2} g_2 \left( x + \frac{g_1}{g_2} \right)^2$$
  
$$\approx g_0 - \frac{g_1^2}{g_2} + \frac{1}{2} g_2 \left( x - x_f \right)^2, \qquad (4.30)$$

onde  $x_f = -g_1/g_2$ ,  $g_0 = g(0)$ ,  $g_1 = \frac{dg}{dx}\Big|_{x=0}$ ,  $g_2 = \frac{d^2g}{dx^2}\Big|_{x=0}$ . Na aproximação harmônica, a interação entre átomo e campo efetivamente se manifesta como um movimento harmônico ao longo da coordenada transversal sob a ação do potencial

$$U_n(x) = \frac{1}{2} m \Omega_n^2 (x - x_f)^2, \qquad (4.31)$$

onde  $\Omega_n$  é a frequência do oscilador harmônico deslocado,  $\Omega_n = \sqrt{ng_2/m}$ . Note a dependência de  $\Omega_n$  com n. Deste modo, a equação (4.29) fica

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}\left|\psi_{n}\left(t\right)\right\rangle}{\mathrm{d}t} = \left[\frac{\hat{p}_{x}^{2}}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega_{n}^{2}\left(\hat{x} - x_{f}\right)^{2}\right]\left|\psi_{n}\left(t\right)\right\rangle \equiv \hat{H}_{n}\left|\psi_{n}\left(t\right)\right\rangle,\qquad(4.32)$$

onde

$$\hat{H}_n = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega_n^2 \left(\hat{x} - x_f\right)^2, \qquad (4.33)$$

é o hamiltoniano efetivo que governa a evolução do estado atômico dado que o campo está no estado de número n.

#### 4.2.2.2 Evolução Temporal

Em t=0,a parte transversal da função de onda espacial do feixe atômico é um estado gaussiano dado por

$$\psi_n(x,0) = \left(\frac{1}{b_n \sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\frac{x^2}{2b_n^2}},$$
(4.34)

onde  $b_n = \sqrt{\hbar/(m\Omega_n)}$  é o "parâmetro do oscilador" [56]. O centróide do pacote de ondas ocupa a posição  $\bar{x} = 0, \bar{p} = 0$  no espaço de fase.

Façamos

$$\left|\tilde{\psi}_{n}\left(t\right)\right\rangle = \exp\left(i\hat{p}_{x}x_{f}/\hbar\right)\left|\psi_{n}\left(t\right)\right\rangle$$
(4.35)

е

$$\tilde{H}_n = \exp\left(i\hat{p}_x x_f/\hbar\right) \hat{H}_n \exp\left(-i\hat{p}_x x_f/\hbar\right).$$
(4.36)

Então,

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}\left|\tilde{\psi}_{n}\left(t\right)\right\rangle}{\mathrm{d}t} = \exp\left(i\hat{p}_{x}x_{f}/\hbar\right)\hat{H}_{n}\left|\psi_{n}\left(t\right)\right\rangle$$
$$= \exp\left(i\hat{p}_{x}x_{f}/\hbar\right)\hat{H}_{n}\exp\left(-i\hat{p}_{x}x_{f}/\hbar\right)\left|\tilde{\psi}_{n}\left(t\right)\right\rangle$$
$$= \tilde{H}_{n}\left|\tilde{\psi}_{n}\left(t\right)\right\rangle.$$

Mas

$$\exp\left(-i\hat{p}_x x_f/\hbar\right)\hat{x}\exp\left(i\hat{p}_x x_f/\hbar\right) = \hat{x} - x_f,$$

dai

$$\tilde{H}_n = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega_n^2 \hat{x}^2.$$
(4.37)

Como  $\tilde{\psi}_n(x) = \langle x | \tilde{\psi}_n \rangle = \langle x | e^{i \hat{p}_x x_f / \hbar} | \psi_n \rangle = \langle x + x_f | \psi_n \rangle = \psi_n(x + x_f)$ , o estado inicial (4.34) pode ser reescrito como

$$\tilde{\psi}_n(x,0) = \left(\frac{1}{b_n\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{(x+x_f)^2}{2b_n^2}\right].$$

Sujeito à interação com o CEM durante um intervalo de tempo  $t_{{\cal L}_c},$ o

estado atômico evoluirá para [56]

$$\tilde{\psi}_{n}\left(x,t \leq t_{L_{c}}\right) = \left(\frac{1}{b_{n}\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \exp\left[-i\left(\frac{\Omega_{n}t}{2} - \frac{xx_{f}}{b_{n}^{2}}\sin\Omega_{n}t - \frac{x_{f}^{2}}{b_{n}^{2}}\sin2\Omega_{n}t\right)\right] \\ \times \exp\left[-\frac{1}{2b_{n}^{2}}\left(x + x_{f}\cos\Omega_{n}t\right)^{2}\right].$$

$$(4.38)$$

Portanto,

$$\psi_n \left( x, t \le t_{L_c} \right) = \left( \frac{1}{b_n \sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \exp \left[ -i \left( \frac{\Omega_n t}{2} - \frac{\left( x - x_f \right) x_f}{b_n^2} \sin \Omega_n t - \frac{x_f^2}{b_n^2} \sin 2\Omega_n t \right) \right] \\ \times \exp \left[ -\frac{1}{2b_n^2} \left( x - x_f + x_f \cos \Omega_n t \right)^2 \right].$$

$$(4.39)$$

O movimento ao longo da coordenada longitudinal é tratado classicamente, daí  $z = v_z t - L_c$ . O feixe atômico deixará a região da onda estacionária no instante  $t_{L_c} = L_c/v_z$ . Vamos definir  $\phi_n = \Omega_n t_{L_c}$ . Então,

$$\psi_n(x, t_{L_c}) = \left(\frac{1}{b_n \sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \exp\left\{-i\left[\frac{\phi_n}{2} + \frac{x_f^2}{b_n^2}\sin\phi_n\left(1 - 2\cos\phi_n\right) - \frac{xx_f}{b_n^2}\sin\phi_n\right]\right\} \\ \times \exp\left[-\frac{1}{2b_n^2}\left(x - x_f + x_f\cos\phi_n\right)^2\right].$$
(4.40)

Note que em  $t = t_{L_c}$ , a parte transversal da função de onda espacial do átomo é um pacote de ondas gaussiano cujo centróide está localizado em  $\bar{x} = x_f (1 - \cos \phi_n), \ \bar{p} = \hbar x_f b_n^{-2} \sin \phi_n.$ 

Para  $t>t_{L_c},$ o átomo evoluirá como uma partícula livre. Esta evolução é governada pela equação de Schrödinger

$$\frac{\mathrm{d}\left|\psi_{n}\left(t\right)\right\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\hat{p}_{x}^{2}}{2m}\left|\psi_{n}\left(t\right)\right\rangle, \ t > t_{L_{c}}.$$
(4.41)

Resolvendo esta equação para o estado dado em (4.40), obtemos [56]

$$\psi_{n}(x,t > t_{L_{c}}) = \left[\frac{1}{B_{n}(t-t_{L_{c}})\sqrt{\pi}}\right]^{1/2} e^{-i\varphi_{0}} \exp\left\{-\frac{\left[x-x_{0}-\frac{\hbar k_{0}}{m}\left(t-t_{L_{c}}\right)\right]^{2}}{2B_{n}^{2}\left(t-t_{L_{c}}\right)} \times \left(1-i\frac{t-t_{L_{c}}}{\tau_{n}}\right)-i\frac{k_{0}^{2}b_{n}^{2}}{2}\frac{t-t_{L_{c}}}{\tau_{n}}+ik_{0}x\right\},$$
(4.42)

onde definimos  $k_0 = \frac{x_f}{b_n^2} \sin \phi_n$ ,  $\varphi_0 = \frac{\phi_n}{2} + \frac{x_f^2}{b_n^2} \sin \phi_n (1 - 2\cos \phi_n)$ ,  $\tau_n = mb_n^2/\hbar$  e

$$B_n(t) = b_n \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 b_n^4}} = b_n \sqrt{1 + \frac{t^2}{\tau_n^2}}.$$
 (4.43)

Análogo ao caso da luz, na propagação livre, deveria aparecer um termo de fase de Gouy na equação (4.42). No entanto, vamos supor que nós não conhecemos esse fato, tal fase será obtida naturalmente a partir de uma análise das equações de movimento para os parâmetros de um estado gaussiano de ondas de matéria.

Note que a largura do pacote gaussiano  $B_n$ , quando o feixe deixa a região de CEM, aumenta monotonicamente com o tempo. Este comportamento da largura do pacote de ondas quando o feixe atômico evolui livremente nos leva a concluir que, pelo menos para o estado inicial (4.34) não ocorre focalização, ou seja, não existe uma região onde se espera que  $B_n$  seja mínimo. No entanto, um cálculo efetuado nas Refs. [96, 102] levando-se em conta o mesmo estado inicial (4.34) para o feixe atômico ao penetrar a região de CEM produz um resultado bastante diferente. Outra análise mais completa do mesmo problema reportada na Ref. [103] confirma estes resultados. Neste trabalho, os autores obtêm a seguinte expressão para a largura do pacote de ondas

$$B_{n}(t) = b_{0} \left[ \left( \frac{\hbar}{b_{0}^{2} m \Omega_{n}} \right)^{2} \left( \Omega_{n} t \cos \left( \Omega_{n} t_{L_{c}} \right) + \sin \left( \Omega_{n} t_{L_{c}} \right) \right)^{2} + \left( \cos \left( \Omega_{n} t_{L_{c}} \right) - \Omega_{n} t \sin \left( \Omega_{n} t_{L_{c}} \right) \right)^{2} \right]^{1/2} .$$

$$(4.44)$$

Note que cada diferente estado de número do modo do CEM produz, neste caso, uma largura diferente para o pacote de ondas. O estado inicial considerado é um pouco diferente de (4.34) por possuir momento lateral inicial, além de conter *alguma compressão*. Acreditamos que tal compressão inicial

é essencial para se obter focalização. Este argumento é melhor entendido pelas Figs. 4.4 e 4.5. Nelas ilustramos, no espaço de fase, a dinâmica do pacote de ondas que representa o estado de movimento atômico ao longo da coordenada transversal. Parece que a focalização do feixe atômico se reduz a uma transferência da compressão inicial em momento para posição, quando o feixe atinge a região focal.

Na Ref. [102], os autores negligenciam o termo de energia cinética  $\frac{\hat{p}_x^2}{2m}$ no hamiltoniano  $\hat{H}_n$  que rege a dinâmica da parte transversal da função de onda espacial atômica [*cf.* equação. (4.33)]. Tal aproximação é radical, pois a dinâmica deixa de ser regida por um movimento harmônico no estágio inicial. Entretanto, nesta aproximação, a região de CEM atua sobre o feixe atômico da mesma forma que uma lente delgada atua sobre um feixe luminoso. No espaço de fase, a consequência disso é a seguinte: o pacote de ondas, além de sofrer rotação em torno do mínimo de potencial  $x_f$ , será comprimido também. Talvez seja esta a razão pela qual os resultados obtidos na Ref. [102] indiquem que, mesmo para o estado inicial (4.34), pode ocorrer focalização.

Falta determinar se a fase da função de onda apresenta alguma anomalia para  $t > t_{L_c}$ .

## 4.2.3 Evolução de um Estado Inicial Comprimido

Nesta seção, faremos a evolução temporal de um estado atômico gaussiano inicialmente comprimido em momento.

## 4.2.3.1 Propriedades do Operador de Compressão

Considere o operador [104]

$$\hat{S}(\epsilon) = \exp\left[\frac{\epsilon}{2}\left(\hat{b}^{\dagger}\right)^2 - \frac{\epsilon^*}{2}\hat{b}^2\right], \qquad (4.45)$$

onde  $\epsilon = |\epsilon| e^{i\theta}$  é um parâmetro complexo (o parâmetro de compressão) e

$$\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{x}}{b_n} + i \frac{\hat{p}_x b_n}{\hbar} \right).$$

Temos

$$\hat{S}(\epsilon)\hat{b}\hat{S}^{\dagger}(\epsilon) = \hat{b}\cosh|\epsilon| - e^{-i\theta}\hat{b}^{\dagger}\sinh|\epsilon| \equiv \hat{B}.$$
(4.46)



Figura 4.4: Representação pictórica da dinâmica do pacote de ondas associado à parte transversal da função de onda espacial atômica.  $x_f$  representa a posição de mínimo do potencial harmônico. O pacote de ondas está inicialmente centrado na origem do espaço de fase (I). Na região de CEM, o átomo estará sob a ação do potencial harmônico; deste modo, cada ponto do pacote de ondas sofrerá uma rotação em torno de  $x_f$  com velocidade angular constante. Note que o pacote não exibe qualquer tipo de compressão inicial. Em (II), o feixe atômico deixa a região de CEM e passa a se mover livremente. Neste caso, cada ponto do pacote de ondas irá se mover na direção positiva do eixo-x com velocidade constante. Para cada ponto, no entanto, este valor dependerá do valor de sua coordenada-p. Quanto maior o valor absoluto desta coordenada, maior é a velocidade com que o ponto se movimenta. Isto provoca um estiramento do pacote de ondas, como se observa em (III). Em virtude disso, a incerteza em posição aumenta (e a tendência é que continue aumentando sem limites).



Figura 4.5: Representação pictórica da dinâmica do pacote de ondas associado à parte transversal da função de onda espacial atômica. Como na Fig. 4.4,  $x_f$  representa a posição de mínimo do potencial harmônico e o pacote de ondas está inicialmente centrado na origem do espaço de fase (I). Todavia, neste caso, o pacote de ondas exibe alguma compressão inicial em momento. Durante o movimento na região de CEM, representado pela transição (I)-(II), o pacote matém sua forma. O movimento livre é representado pela transição (II)-(III). Neste estágio da dinâmica, a incerteza em posição diminui gradativamente, até atingir um mínimo (na figura, este mínimo ocorre no instante em que o pacote está centrado em  $x_f$ ). A partir daí, o pacote é estirado, e a incerteza em posição passa a aumentar sem limite. Portanto, focalização parece implicar transferência de compressão: a compressão inicial em momento transforma-se em compressão em posição quando o feixe atômico atinge a região focal.

Note que

$$\left[\hat{B}, \hat{B}^{\dagger}\right] = 1.$$

Considere o caso em que  $\epsilon$  é real e positivo. Temos, então,  $\hat{S}(\epsilon) \hat{x} \hat{S}^{\dagger}(\epsilon) = e^{\epsilon} \hat{x}$ , e  $\hat{S}(\epsilon) \hat{p}_x \hat{S}^{\dagger}(\epsilon) = e^{-\epsilon} \hat{p}_x$ , o que leva a

$$\hat{x}\hat{S}^{\dagger}\left(\epsilon\right)\left|x\right\rangle = \mathrm{e}^{\epsilon}x\hat{S}^{\dagger}\left(\epsilon\right)\left|x\right\rangle,$$

е

$$\hat{p}_x \hat{S}^{\dagger}(\epsilon) |p\rangle = e^{-\epsilon} p \hat{S}^{\dagger}(\epsilon) |p\rangle$$

i.e.,  $\hat{S}^{\dagger}(\epsilon) |x\rangle$  é autoestado do operador posição com autovalor  $e^{\epsilon}x$ , enquanto  $\hat{S}^{\dagger}(\epsilon) |p\rangle$  é autoestado do operador momento com autovalor  $e^{-\epsilon}p$ . Daí,  $\hat{S}^{\dagger}(\epsilon) |x\rangle = e^{\epsilon/2} |e^{\epsilon}x\rangle e \hat{S}^{\dagger}(\epsilon) |p\rangle = e^{-\epsilon/2} |e^{-\epsilon}p\rangle$ . Portanto, a representação em posição do estado  $\hat{S}(\epsilon) |\psi\rangle$  é

$$\left\langle x\right|\hat{S}\left(\epsilon\right)\left|\psi\right\rangle =\psi_{\epsilon}\left(x
ight)=\mathrm{e}^{\epsilon/2}\psi\left(\mathrm{e}^{\epsilon}x
ight)$$

Analogamente, a representação do mesmo estado em momento é

$$\langle p | \hat{S}(\epsilon) | \psi \rangle = \psi_{\epsilon}(p) = e^{-\epsilon/2} \psi \left( e^{-\epsilon} p \right).$$

A variância em posição do estado  $|\psi_{\epsilon}\rangle = \hat{S}(\epsilon) |\psi\rangle$  é dada por

$$\begin{aligned} \Delta x_{\epsilon}^{2} &= \langle \psi_{\epsilon} | \hat{x}^{2} | \psi_{\epsilon} \rangle - \langle \psi_{\epsilon} | \hat{x} | \psi_{\epsilon} \rangle^{2} \\ &= \langle \psi | \hat{S}^{\dagger} (\epsilon) \hat{x}^{2} \hat{S} (\epsilon) | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{S}^{\dagger} (\epsilon) \hat{x} \hat{S} (\epsilon) | \psi \rangle^{2} \\ &= \langle \psi | \hat{S} (-\epsilon) \hat{x}^{2} \hat{S}^{\dagger} (-\epsilon) | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{S} (-\epsilon) \hat{x} \hat{S}^{\dagger} (-\epsilon) | \psi \rangle^{2} \\ &= \langle \psi | (e^{-\epsilon} \hat{x})^{2} | \psi \rangle - \langle \psi | e^{-\epsilon} \hat{x} | \psi \rangle^{2} = e^{-2\epsilon} \Delta x^{2}, \end{aligned}$$
(4.47)

onde  $\Delta x^2$  é a variância em posição do estado  $|\psi\rangle. \,$  Para a incerteza em momento, temos

$$\Delta p_{\epsilon}^{2} = \langle \psi_{\epsilon} | \hat{p}_{x}^{2} | \psi_{\epsilon} \rangle - \langle \psi_{\epsilon} | \hat{p}_{x} | \psi_{\epsilon} \rangle^{2}$$
  
$$= \langle \psi | (e^{\epsilon} \hat{p}_{x})^{2} | \psi \rangle - \langle \psi | e^{\epsilon} \hat{p}_{x} | \psi \rangle^{2} = e^{2\epsilon} \Delta p^{2}.$$
(4.48)

Portanto, a ação do operador  $\hat{S}(\epsilon)$  sobre um estado  $|\psi\rangle$ , com  $\epsilon$  real e positivo, produz um estado  $|\psi_{\epsilon}\rangle$  comprimido em posição ao custo de um alargamento em momento. No caso em que  $\epsilon < 0$ , teremos um estado comprimido em

momento e alargado em posição. No caso mais geral, o parâmetro de compressão é complexo e pode ser escrito na forma  $\epsilon = |\epsilon| e^{-i\theta}$ . A compressão ocorrerá ao longo da quadratura que faz um ângulo  $\theta/2$  em relação ao eixo das posições x.

## 4.2.3.2 Estado Coerente Comprimido

O estado coerente comprimido (algumas vezes chamado estado comprimido generalizado) é definido por [96]

$$\left|\epsilon,\alpha\right\rangle = \hat{D}\left(\alpha\right)\hat{S}\left(\epsilon\right)\left|0\right\rangle,\tag{4.49}$$

onde  $|0\rangle$  é o estado de vácuo do oscilador harmônico.  $\hat{D}(\alpha)$  é o operador de deslocamento, definido como  $\hat{D}(\alpha) = \exp\left(\alpha \hat{b}^{\dagger} - \alpha^{*}\hat{b}\right)$ . Sua ação sobre o estado de vácuo produz o estado coerente  $|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)|0\rangle$ . Para o estado coerente, as incertezas em posição e momento das quadraturas  $\hat{X}_{\theta} = 2^{-1/2} \left(e^{i\theta}\hat{b} + e^{-i\theta}\hat{b}^{\dagger}\right)$  e  $\hat{P}_{\theta} = i2^{-1/2} \left(e^{-i\theta}\hat{b}^{\dagger} - e^{i\theta}\hat{b}\right)$  são iguais e minimizam a relação de incerteza. Nas representações de posição e momento, o estado coerente é uma função gaussiana. A ação do operador de compressão sobre o estado coerente produz um estado também de incerteza mínima que mantém a forma gaussiana, mas com larguras diferentes nas quadraturas  $\hat{X}_{\theta}$ e  $\hat{P}_{\theta}$ .

Segundo Bialynicki-Birula [105], a forma geral de um estado gaussiano, na representação de posição, é dada pela expressão

$$\psi\left(x\right) = \left(\frac{u}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-i\frac{\bar{x}\bar{p}}{2\hbar}\right) \exp\left[-\frac{\left(x-\bar{x}\right)^2\left(u+iv\right)}{2} + i\frac{\bar{p}x}{\hbar}\right],\qquad(4.50)$$

onde  $\bar{x} \in \bar{p}$  são as coordenadas do "centro de massa" da distribuição no espaço de fase e  $u \in v$  dão a forma desta distribuição.

# 4.2.3.3 Evolução Temporal

Uma dinâmica regida por um hamiltoniano quadrático em posição e momento mantém a forma gaussiana de um estado inicial gaussiano. Este é o caso do problema tratado aqui. O movimento atômico pode ser dividido em dois estágios: no primeiro, o átomo sofre a ação de um potencial harmônico quando atravessa a região de CEM enquanto que, na segunda parte, o átomo evolui livremente. Nos dois estágios, os hamiltonianos que governam a evolução atômica são quadráticos em posição e momento [cf. equação (4.33)]. Uma vez que o estado inicial atômico é estado gaussiano [cf. equação (4.34)], podemos considerar que, durante toda evolução, tal estado apresentará a forma dada pela equação (4.50). Neste caso, os parâmetros  $\bar{x}$ ,  $\bar{p}$ ,  $u \in v$ são funções do tempo, e suas respectivas equações de movimento podem ser deduzidas a partir da equação de Schrödinger.

Considere uma partícula de massa m movendo-se sob a ação de um potencial harmônico. A frequência natural deste movimento é  $\Omega_n$ . O hamiltoniano que governa esta dinâmica é dado por

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega_n^2 \hat{x}^2.$$
(4.51)

Na representação posição, a evolução do estado  $\psi$  da partícula é regida pela equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(x,t\right) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\Omega_n^2 x^2\right]\psi\left(x,t\right).$$
(4.52)

Suponha que o estado inicial da partícula seja gaussiano. Podemos obter as equações de movimento para os parâmetros  $\bar{x}$ ,  $\bar{p}$ ,  $u \in v$  substituindo a forma geral (4.50) na equação acima, agrupando os termos de mesma potência em  $(x - \bar{x})$  e, em seguida, separando as partes real e imaginária. Este procedimento leva a seis equações para os quatro parâmetros mencionados. O sistema é, portanto, "supercompleto". Eliminando tal redundância, as equações de movimento são as seguintes

$$\dot{\bar{x}} = \frac{\bar{p}}{m} \,, \tag{4.53a}$$

$$\dot{\bar{p}} = -m\Omega_n^2 \bar{x} , \qquad (4.53b)$$

$$\dot{K} = i \frac{m\Omega_n^2}{\hbar} - i \frac{\hbar}{m} K^2 , \qquad (4.53c)$$

onde definimos K = u + iv. Aqui, os pontos indicam derivação temporal. Note que as equações de movimento para as coordenadas do centróide da distribuição são equivalentes às equações clássicas de movimento para a posição e o momento de uma partícula se movendo em um potencial harmônico.
Uma importante observação deve ser feita aqui. Uma das duas equações eliminadas não é consistente com as demais em (4.53). Esta equação é a seguinte

$$\bar{p}\dot{\bar{x}} - \dot{\bar{p}}\bar{x} = \frac{\bar{p}^2}{m} + m\Omega_n^2 \bar{x}^2 + \frac{\hbar^2}{m}u.$$
 (4.54)

Para ver isto, basta substituir as expressões (4.53a, 4.53b) na equação acima. Obteremos u = 0, que não faz nenhum sentido, uma vez que u representa o inverso do quadrado da largura do pacote gaussiano. A única maneira de "driblar" tal incoveniente é redefinir o estado geral como

$$\psi(x) = \left(\frac{u}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-i\frac{\bar{x}\bar{p}}{2\hbar} + i\frac{\Phi}{2}\right) \exp\left[-\frac{(x-\bar{x})^2(u+iv)}{2} + i\frac{\bar{p}x}{\hbar}\right], \quad (4.55)$$

onde  $\Phi$  é uma função real do tempo. Esta fase global, em geral negligenciada (ver, p. ex., [56, 105]), garante a consistência das equações de movimento, pois em adição às equações (4.53), devemos ter

$$\dot{\Phi} = -\frac{\hbar}{m}u. \tag{4.56}$$

 $\Phi/2$  é conhecida como fase de Gouy.

### 4.2.4 Focalização de um Feixe de Átomos

Retornemos ao problema da focalização de um feixe atômico. Como vimos, o dispositivo usado como "lente" - um campo eletromagnético estacionário interagindo dispersivamente com o átomo - não produz compressão sobre o estado atômico. Portanto, o estado inicial já deve conter alguma compressão em momento que, devido à ação do potencial harmônico, será transferida para a posição quando o átomo estiver evoluindo livremente.

Vamos supor que o estado inicial atômico é o estado de vácuo comprimido

$$\langle x|\psi_n(0)\rangle = \psi_n(x,0) = \left(\frac{1}{b_0\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\frac{x^2}{2b_0^2}},$$
 (4.57)

onde  $b_0$  é a largura inicial do pacote de ondas, com  $b_0 > b_n$ . Deste modo, podemos escrever

 $\left|\psi_{n}\left(0\right)\right\rangle = \hat{S}\left(\epsilon\right)\left|0\right\rangle,$ 

com  $e^{\epsilon} = b_n/b_0$ . Na região de CEM, o estado evoluirá segundo a dinâmica gerada pelo hamiltoniano (4.33), durante o intervalo de tempo  $0 < t < t_{L_c}$ . Como vimos,  $\hat{H}_n$  descreve o movimento ao longo de um potencial harmônico cujo mínimo é deslocado para a posição  $x = x_f$ . Usando as definições (4.35, 4.36), deslocamos o mínimo do potencial harmônico para a origem x = 0. Nesta situação, escrevemos o estado inicial como

$$\left|\tilde{\psi}_{n}\left(0\right)\right\rangle = \hat{D}\left(-\frac{x_{f}}{\sqrt{2}b_{n}}\right)\hat{S}\left(\epsilon\right)\left|0\right\rangle,$$

cuja representação em posição é [96]

$$\tilde{\psi}_n(x,0) = \left[\frac{1}{\pi b_0^2}\right]^{1/4} \exp\left[-\frac{(x+x_f)^2}{2b_0^2}\right].$$
(4.58)

Resolvemos as equações (4.53) para as condições iniciais  $\bar{x}_0 = -x_f$ ,  $\bar{p}_0 = 0$ ,  $u = b_0^{-2}$  e v = 0, e obtemos

$$\bar{x}\left(t < t_{L_c}\right) = -x_f \cos\Omega_n t , \qquad (4.59a)$$

$$\bar{p}\left(t < t_{L_c}\right) = m\Omega_n x_f \sin\Omega_n t , \qquad (4.59b)$$

$$K\left(t < t_{L_c}\right) = \left(\cos\Omega_n t + i\frac{b_n^2}{b_0^2}\sin\Omega_n t\right)^{-1} \left(\frac{1}{b_0^2}\cos\Omega_n t + i\frac{1}{b_n^2}\sin\Omega_n t\right).$$
(4.59c)

Da equação (4.59c), encontramos

$$u(t < t_{L_c}) = \left[ b_0^2 \left( \cos^2 \Omega_n t + \frac{b_n^4}{b_0^4} \sin^2 \Omega_n t \right) \right]^{-1}.$$
 (4.60)

Relembrando,  $u^{-1}$  é o quadrado da largura do pacote gaussiano. Se fizermos  $b_0 = b_n$ , i.e., se o estado inicial não possuir qualquer compressão,  $u^{-1} = b_n^2$ .

Integrando a equação (4.60) obtemos a seguinte expressão para a fase  $\Phi$  dentro da cavidade

$$\Phi(t < t_{L_c}) = -\arctan\left[\frac{b_n^2}{b_0^2}\tan(\Omega_n t)\right].$$
(4.61)

Quando o feixe atômico deixa a região de CEM, o estado atômico passa

a evoluir livremente. As equações de movimento para os parâmetros  $\bar{x}$ ,  $\bar{p}$ ,  $u \in v$  podem ser obtidas fazendo  $\Omega_n = 0$  em (4.53). Assim, para  $t > t_L$ , teremos

$$\bar{x}(t > t_{L_c}) = -x_f \cos \phi_n + \Omega_n (t - t_{L_c}) x_f \sin \phi_n , \qquad (4.62a)$$

$$\bar{p}(t > t_{L_c}) = m\Omega_n x_f \sin \phi_n , \qquad (4.62b)$$

$$K(t > t_{L_c}) = \frac{\frac{b_n^2}{b_0^2}\cos\phi_n + i\sin\phi_n}{b_n^2 \left[\cos\phi_n + i\frac{b_n^2}{b_0^2}\sin\phi_n + i\frac{t - t_{L_c}}{\tau_n} \left(\frac{b_n^2}{b_0^2}\cos\phi_n + i\sin\phi_n\right)\right]}.$$
(4.62c)

Note que

$$b_0^2 u\left(t > t_{L_c}\right) = \left[ \left(\cos\phi_n - \frac{t - t_{L_c}}{\tau_n}\sin\phi_n\right)^2 + \frac{b_n^4}{b_0^4} \left(\sin\phi_n + \frac{t - t_{L_c}}{\tau_n}\cos\phi_n\right)^2 \right]^{-1}.$$
(4.63)

O foco ocorrerá na região do feixe em que a largura do pacote de ondas for mínima. Em outras palavras, quando  $u(t > t_L)$  for máximo, teremos um foco. Isto acontece quando a função

$$D(t) = \left(\cos\phi_n - \frac{t - t_{L_c}}{\tau_n}\sin\phi_n\right)^2 + \frac{b_n^4}{b_0^4} \left(\sin\phi_n + \frac{t - t_{L_c}}{\tau_n}\cos\phi_n\right)^2 \quad (4.64)$$

atingir seu valor mínimo. Tomando a derivada no tempo desta função, igualando-a a zero, obtemos

$$t_f = \frac{z_f + L_c}{v_z} = t_{L_c} + \tau_n \frac{\left(1 - \frac{b_n^4}{b_0^4}\right) \sin \phi_n \cos \phi_n}{\frac{b_n^4}{b_0^4} \cos^2 \phi_n + \sin^2 \phi_n} \,. \tag{4.65}$$

Portanto, o foco do feixe atômico estará localizado na região em torno de

$$z_f = v_z \tau_n \frac{\left(1 - \frac{b_n^4}{b_0^4}\right) \tan \phi_n}{\frac{b_n^4}{b_0^4} + \tan^2 \phi_n} \,. \tag{4.66}$$

A largura do feixe gaussiano que passou pela lente,  $B'(t) = 1/\sqrt{u(t)}$ ,

pode ser escrita como

$$B'(t) = b'_0 \left[ 1 + \left(\frac{t - t_f}{\tau'_0}\right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$
(4.67)

onde definimos

$$b_0' = M b_0, (4.68)$$

$$\tau_0' = M^2 \tau_0, \tag{4.69}$$

е

$$M = \frac{1}{\sqrt{\cos^2 \phi_n + \frac{b_0^4}{b_n^4} \sin^2 \phi_n}}.$$
 (4.70)

A linha foi usada aqui para diferenciar os parâmetros do feixe após a focalização dos respectivos parâmetros antes da focalização. Vemos que a cintura do feixe é aumentada pelo fator M e o tempo de envelhecimento do pacote é aumentado por  $M^2$  (não confundir com o fator de qualidade  $\mathcal{M}$ ). Em óptica, a quantidade M é conhecida por fator de magnificação [19]. Se o estado não for inicialmente comprimido, i.e., se  $b_n = b_0$ , não haverá focalização e neste caso  $b'_0 = b_0 e \tau'_0 = \tau_0$  como pode ser visto pelas equações (4.68), (4.69) e (4.70).

#### 4.2.4.1 Regime de Lente Fina

Se considerarmos um tempo de interação dos átomos com o campo na cavidade  $t_{L_c}$  muito pequeno, temos o chamado regime de lente fina. Porque, quando o tempo de interação é muito pequeno, o movimento dos átomos ao longo da direção transversa também é muito pequeno, ou seja, a energia cinética média transversa dos átomos é muito menor que a energia potencial média  $\langle \hat{U}(x) \rangle$  produzida pelo campo,  $\frac{\langle \hat{p}_x^2 \rangle}{2m} \ll \langle \hat{U}(x) \rangle$  [102]. O ângulo de rotação do estado atômico provocado pela interação com o campo na cavidade  $\phi_n = \Omega_n t_{L_c}$  é diretamente proporcional ao tempo de interação, assim, se  $t_{L_c}$ for muito pequeno,  $\phi_n$  também será muito pequeno. Se considerarmos  $\phi_n \ll 1$ e um estado atômico inicial bem comprimido em momento com  $b_n/b_0 \ll 1$ , a expressão para a distância focal, equação (4.66), toma a forma simples [96]

$$z_f = \frac{mv_z^2}{ng_2L_c}.\tag{4.71}$$

#### 4.2.5 Anomalia de Fase nas Proximidades do Foco

Se integrarmos a equação de movimento (4.56) para  $\Phi$  considerando a expressão para B'(t) dada pela equação (4.67), obtemos

$$\mu(t) = \frac{\Phi(t)}{2} = -\frac{\hbar}{2m} \int_{t_f}^t \frac{dt}{B'^2(t)} \\ = -\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{t - t_f}{\tau'_0}\right).$$
(4.72)

A integral foi feita de  $t_f$  a t, pois a fase de Gouy é a fase do estado gaussiano relativa à onda plana no foco, i.e., no foco o estado gaussiano está em fase com a onda plana [19, 24, 28]. No foco,  $\mu = 0$ , como esperado. Portanto, a fase da função de onda atômica sofre uma variação de  $\pi/2$  nas proximidades de  $t_f$ . O fato deste deslocamento de fase ser  $\pi/2$  e não  $\pi$  é explicado por termos levado em conta a dinâmica atômica ao longo de uma única coordenada transversal [28]. A inclusão da coordenada y pode fazer com que esta variação seja igual a  $\pi$ .

## 4.3 Possível Experimento com Átomos de Césio

Nesta seção, calculamos alguns parâmetros experimentais para termos uma ideia das dimensões a serem usadas no arranjo experimental para medir a fase de Gouy em ondas de matéria. Os cálculos foram feitos para a focalização de um feixe de átomos de césio frios.

Consideramos que dentro da cavidade existe um campo estacionário senoidal e o acoplamento entre átomo e campo é dado pela função

$$g(x) = \frac{\hbar\Omega_0^2}{\Delta}\sin^2\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right). \tag{4.73}$$

Nesse caso, a frequência de oscilação do átomo será

$$\Omega_n = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{G\hbar n}{m}},\tag{4.74}$$

onde  $G \equiv \frac{2\Omega_0^2}{\Delta}$  é a constante de acoplamento efetiva. Assumimos os seguintes valores para a dessintonia  $|\Delta| \sim 2\pi \times 10^{11}$  Hz, constante de acoplamento efetiva  $G \sim 2\pi \times 10^7$  Hz, estado de Fock do campo dentro da cavidade com  $n \sim 100$ , e consideramos a linha  $D_2$  de transição atômica do césio (que corresponde a um comprimento de onda de transição de  $\lambda \sim 852$  nm) [106]. Nosso átomo de dois níveis corresponde a essa linha de transição cuja frequência  $\omega_{ge}$  é a frequência de transição dessa linha. A massa dos átomos de césio vale  $m = 2, 2 \times 10^{-25}$  kg. Neste caso,  $\frac{2G\sqrt{n}}{|\Delta|} = 10^{-3}$  (acoplamento dispersivo [96, 102, 103]),  $\frac{|\Delta|}{\omega_{ge}} \sim 0.3 \times 10^{-3}, b_n \sim 5.16 \times 10^{-8}$  m,  $\Omega_n =$  $1,80 \times 10^5$  rad/s. Para garantirmos a aproximação harmônica  $\frac{b_0}{\lambda} \ll 1$ , a largura transversa  $b_0$  do pacote de ondas inicial deverá ser da ordem de 80 nm. Ainda restam dois parâmetros a serem calculados:  $L_c$  (cintura do campo estacionário) e  $v_z$  (velocidade atômica longitudinal). Tomando  $t_{L_c} \sim$  $1~\mu {\rm s},$ a velocidade atômica longitudinal pode ser calculada impondo que  $z_f^{(n)} \sim 10^{-4}$  m. Assim, obtemos  $v_z \sim 30$  m/s, o que implica que a cintura do campo estacionário deve ser aproximadamente  $L_c \sim 30 \ \mu m$ .

Um problema experimental que percebemos no cálculo desses parâmetros é a necessidade de uma colimação do pacote de ondas inicial da ordem de  $b_0 \sim 80$  nm. No capítulo seguinte, tentaremos resolver esta dificuldade propondo o experimento com átomos excitados para um número quântico bastante elevado - os átomos de Rydberg.

Os resultados deste capítulo estão publicados na Ref.: J. Phys.: Conference Series 84, 012016 (2007), cuja cópia apresentamos em anexo.

Capítulo	5
OAI II OLO	0

# Proposta Experimental para Medir a Fase de Gouy Usando Interferometria Ramsey

Uma das analogias existentes entre a evolução livre de ondas de matéria através da equação de Schrödinger e a propagação no vácuo de ondas de luz clássicas na aproximação paraxial, é a existência de uma fase de Gouy para ondas de matéria [15, 39, 40]. Na literatura, existem vários resultados experimentais para a fase de Gouy em ondas de luz clássicas [30, 31, 32] e quânticas [33, 34]. Nosso objetivo, neste capítulo, é propor um experimento, semelhante aos realizados com luz, para medir a fase de Gouy em ondas de matéria [41].

Na Ref. [40], calculamos os valores de alguns parâmetros experimentais, caso o experimento fosse realizado com átomos de césio e encontramos valores de parâmetros inviáveis à tecnologia experimental atual. A fim de contornarmos essas dificuldades experimentais, propomos a realização do experimento com átomos de Rydberg, pois o conhecimento de diversas propriedades teóricas e experimentais destas espécies atômicas [107, 108, 109, 110, 111, 112, 113] nos permitiu adotar valores de parâmetros experimentais mais realistas [41].

Nas seções seguintes, discutimos um pouco da literatura existente para interferometria Ramsey e átomos de Rydberg, obtemos as expressões para uma lente fina para átomos a partir da analogia existente entre a equação paraxial de Helmholtz e a equação de Schrödinger e descrevemos um possível arranjo experimental a ser utilizado para medir a fase.

## 5.1 Atomos de Rydberg

São átomos de metais alcalinos ou de hidrogênio cujo elétron mais externo é excitado para um número quântico principal n bastante elevado. Quão elevado deve ser n para que o átomo seja considerado de Rydberg não é algo estabelecido, mas sabe-se que para fins práticos  $n \ge 15$  é bastante satisfatório [107]. Estes átomos são produzidos pela excitação de um feixe atômico no estado fundamental por um feixe de laser [107, 108, 109]. Propriedades importantes dos átomos de Rydberg, tais como: enormes raio atômico médio e momento de dipolo de transição entre dois estados de Rydberg  $n \rightarrow n-1$ , são facilmente obtidas a partir das fórmulas para o átomo de hidrogênio, pois o átomo altamente excitado pode ser visto aproximadamente como um átomo de hidrogênio [107].

Após a produção dessas espécies atômicas tornou-se possível a realização de diversos experimentos de fundamentos da mecânica quântica e de óptica quântica [114, 115, 116, 117, 118, 119, 120, 121]. Nos últimos anos, atenção especial tem sido dada à realização de experimentos com átomos de Rydberg ultrafrios, onde a velocidade atômica longitudinal é bastante baixa [122].

## 5.2 Interferometria Ramsey

A interferometria Ramsey é um tipo de interferometria atômica onde os caminhos do interferômetro são representados por estados atômicos internos. O interferômetro é constituído por duas zonas de Ramsey, que são cavidades de microondas de baixo fator de qualidade constantemente realimentadas por campos clássicos. O comportamento quântico do campo dentro dessas cavidades pode ser desprezado devido à forte dissipação das mesmas [123]. Assim, não há emaranhamento entre átomo e campo e o efeito da interação é apenas colocar uma fase no estado atômico interno.

Para entendermos o efeito das zonas de Ramsey sobre o átomo vamos voltar ao hamiltoniano de interação equação (4.14). Agora, considerando que o átomo interage ressonantemente ( $\Delta = 0$ ) com um campo clássico do tipo  $E(\vec{x}) = E_0(\vec{x}) e^{-i\beta}$ , e que os átomos de Rydberg têm longo tempo de vida para emissão espontânea, obtemos para o hamiltoniano de interação o

resultado

$$\hat{H}_{int} = \hbar \Omega_R \left( \hat{\sigma} \ e^{i\beta} + \hat{\sigma}^{\dagger} \ e^{-i\beta} \right), \tag{5.1}$$

onde  $\Omega_R$  é a frequência de Rabi e  $\beta$  é a fase do campo clássico. Assim, o sistema pode ser tratado como conservativo e o operador evolução através da zona de Ramsey é dado por

$$\hat{U}_{ZR}(t) = \cos(\Omega_R t)\hat{I} - i\sin(\Omega_R t)\left(\hat{\sigma} \ e^{i\beta} + \hat{\sigma}^{\dagger} \ e^{-i\beta}\right).$$
(5.2)

Se ajustarmos a intensidade do campo aplicado nas zonas de Ramsey e o tempo que os átomos interagem com estas cavidades, de maneira que,  $\Omega_R t = \pi/4$ , obtemos

$$\hat{U}_{ZR}(t)|g\rangle = \frac{|g\rangle - ie^{-i\beta}|e\rangle}{\sqrt{2}},\tag{5.3}$$

ou

$$\hat{U}_{ZR}(t)|e\rangle = \frac{|e\rangle - ie^{i\beta}|g\rangle}{\sqrt{2}},\tag{5.4}$$

caso o átomo esteja inicialmente no estado  $|g\rangle$  ou  $|e\rangle$ , respectivamente. A transformação acima é conhecida como aplicar um pulso  $\pi/2$  no átomo [94, 95, 124].

A interferência Ramsey acontece basicamente da seguinte forma: o átomo de dois níveis, com uma certa preparação inicial, ao passar pela primeira zona de Ramsey é levado para um estado de superposição de  $|g\rangle$  com  $|e\rangle$ . A propagação da primeira para a segunda zona de Ramsey acumula uma fase devido à diferença de energia desses níveis . Na segunda zona de Ramsey os estados são "misturados", fazendo com que a probabilidade de detecção em  $|g\rangle$  ou  $|e\rangle$  dependa da fase acumulada. A variação desta fase fornece o padrão de interferência Ramsey [94, 95, 124].

## 5.3 Lente Fina para Átomos e Analogia entre Ondas de Matéria e Luz Clássica

Nesta seção, obteremos as expressões para uma lente fina para átomos partindo dos resultados obtidos na Ref. [19] para uma lente fina para ondas de luz e da analogia existente entre a equação paraxial de Helmholtz e a equação de Schrödinger bidimensional [11, 12, 13, 14, 15]. As expressões obtidas nesta seção são fisicamente mais simples de entender do que as correspondentes expressões obtidas no capítulo anterior, pois partem de resultados bastante conhecidos em óptica clássica.

Na Fig. 5.1, temos o esboço de uma lente fina para ondas de luz. Um feixe gaussiano, solução da equação paraxial de Helmholtz, centrado em z = 0com cintura  $w_0$ , comprimento de Rayleigh  $z_0$  e ângulo de divergência  $\theta_0$  é transmitido através de uma lente fina localizada na distância z. Vamos tratar o caso no qual a lente fina focaliza ao longo da dimensão x apenas, fazendo o papel de uma lente cilíndrica. A lente fina tem um formato e um índice de refração tais que o caminho óptico para a luz é uma função quadrática de x e, consequentemente, a fase que o campo adquire ao passar pela lente é quadrática em x, i.e.,  $\exp(-ikx^2/2f)$ , onde f é a distância focal da lente. w (w') é a largura do feixe antes (depois) da lente, R(R') é o raio de curvatura das frentes de onda antes (depois) da lente. O feixe transmitido é focalizado



Figura 5.1: Esboço de uma lente fina para ondas de luz. Fig. retirada de Ref. [19]

para uma cintura  $w'_0$  em uma distância z' dados, respectivamente, por [19]

$$w_0' = \frac{w_0}{\sqrt{1 + (z_0/f)^2}} \tag{5.5}$$

е

$$z' = \frac{f}{1 + (f/z_0)^2}.$$
(5.6)

Como a equação paraxial de Helmholtz é análoga à equação de Schrödinger [11, 12, 13, 14, 15], podemos obter uma expressão equivalente à equação (5.6) para a evolução de um estado gaussiano de ondas de matéria. A analogia entre as duas equações foi tratada no capítulo 2 para o caso de propagações livres. Pela analogia óptico-mecânica [125], colocar um potencial na equação de Schrödinger é semelhante a passarmos a luz por um meio cujo efeito sobre o caminho óptico dos raios de luz seja o mesmo do potencial mecânico sobre os átomos. Este meio pode ser uma lente para a luz, por exemplo, um vidro caracterizado pelo seu índice de refração constante  $\mathbf{n} = k'/k$ , onde k' é o número de onda no meio. Levando em conta este potencial nas duas equações temos, em uma dimensão

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2kU_L + i4\pi \frac{1}{\lambda_L} \frac{\partial}{\partial z}\right) A(x, y, z) = 0,$$
(5.7)

е

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2}U_P + i4\pi \frac{1}{\lambda_P}\frac{\partial}{\partial z}\right)\psi\left(x, y, t = z/v_z\right) = 0,$$
(5.8)

onde  $U_L$  é o potencial para a luz e  $U_P$  o potencial para os átomos (ou partículas). O potencial  $U_P$  que atua nos átomos pode ser produzido por um campo estacionário gerado pela interferência de feixes de luz contrapropagantes.

A fase colocada pela lente fina para ondas de luz vale [19]

$$\theta_L(x) = -\frac{k}{2f}x^2. \tag{5.9}$$

Fazendo uma analogia com as ondas de matéria, obtemos para a fase colocada por uma lente fina para átomos o seguinte resultado

$$\theta_P(x) = -\frac{k_P}{2f_P}x^2,\tag{5.10}$$

onde  $k_P = mv_z/\hbar$  é o vetor de onda atômico e  $f_P$  é a distância focal da lente atômica.

Na aproximação de lente atômica fina, o movimento dos átomos ao longo da direção transversa deve ser muito pequeno, ou seja, a energia cinética média transversa dos átomos é muito menor que a energia potencial média  $\langle \hat{U}_P(x) \rangle$  produzida pelo campo,  $\frac{\langle \hat{p}_x^2 \rangle}{2m} \ll \langle \hat{U}_P(x) \rangle$ . Assim, a evolução dos átomos através da região de campo é dada pelo operador  $\exp(-i\hat{U}_P t_{L_c}/\hbar)$ que, comparado com a fase equação (5.10), nos permite obter para o potencial  $U_P$  o resultado

$$U_P(x) = \frac{\hbar k_P}{2f_P t_{L_c}} x^2,$$
 (5.11)

onde  $t_{L_c} = L_c/v_z$  é o tempo de interação dos átomos com o campo na cavidade.

5.3 Lente Fina para Átomos e Analogia entre Ondas de Matéria e Luz Clássica

No capítulo anterior, discutimos o modelo de interação entre átomo e campo, i.e., consideramos que um átomo de dois níveis acopla via momento de dipolo com um modo do campo produzido numa cavidade. Consideramos que a largura inicial  $b_0$  do pacote de ondas atômico é muito menor que o comprimento de onda  $\lambda$  do campo na cavidade, i.e.,  $b_0 \ll \lambda$ , e, nesse caso, a região de nó de campo elétrico produz um potencial harmônico para os átomos. Este potencial é dado pela equação (4.31) que, comparado com a equação (5.11), nos permite obter para a distância focal de uma lente fina atômica o resultado

$$f_P = \frac{mv_z^2}{ng_2L_c}.$$
(5.12)

Esta expressão é igual à obtida na equação (4.71) a partir de uma aproximação da equação (4.66). A cintura do feixe atômico e distância focal são dadas, respectivamente, pelas equações (5.5) e (5.6) com f sendo substituído por  $f_P \, e \, w_0$  sendo substituído pela largura inicial  $b_0$  do feixe atômico.

Para obtermos valores para a distância focal  $f_P$  e cintura do feixe  $w'_0$ precisamos do fator  $g_2$ , a derivada segunda da função acoplamento. Assim, considerando um campo estacionário senoidal dentro da cavidade, a função acoplamento é dada pela equação (4.73), o que nos permite obter  $g_2 = 8\pi^2 \Omega_0^2 \hbar / \Delta \lambda^2$ . Para termos acesso a valores numéricos, vamos adotar parâmetros correspondentes aos átomos de Rydberg, produzidos a partir da excitação de átomos de rubídio, e às cavidades de microondas, i.e., massa atômica  $m = 1,44 \times 10^{-25}$  kg, frequência de Rabi  $\Omega_0/(2\pi) = 47$  kHz, dessintonia  $\Delta/(2\pi) = -30$  MHz, comprimento da cavidade  $L_c = 1$  cm e comprimento de onda do campo dentro da cavidade  $\lambda = 5,8$  mm [110, 111, 112]. Assim, assumindo que um feixe de átomos de Rydberg com velocidade longitudinal  $v_z = 50 \text{ m/s}$  e largura de colimação  $b_0 = 10 \mu \text{m}$ , penetra numa cavidade de microondas contendo um campo efetivamente clássico com número médio de fótons  $\bar{n} = 3 \times 10^6$ , obtemos para a distância focal da lente e cintura do feixe atômico os resultados  $f_P = 105 \text{ mm}$  (usando a equação (5.6) para calcular a distância focal dos átomos obtemos  $z' \approx f_P$ ) e  $w'_0 = 300$  nm. De posse desses resultados, calculamos o comprimento de Rayleigh do feixe atômico na região focal e obtemos  $z'_0 = k_P w'^2_0/2 = 3$  mm.

A expressão (5.12) foi deduzida para um dado estado de Fock com número n de fótons e o cálculo da distância focal foi feito para um estado coerente contendo um número médio de fótons  $\bar{n}$ . De fato, para os dados que estamos usando o número de estados de Fock que podem ser resolvidos vale  $b_0/\lambda_P \sim 10^5$  que é uma ordem de grandeza menor que o número de fótons que estamos usando no cálculo da distância focal. Isso significa que para a quantidade de fótons que estamos supondo, os diferentes estados de Fock não podem ser resolvidos, o que é equivalente a tratarmos o campo como estado coerente contendo este número médio de fótons . Também fizemos um cálculo para a distância focal usando um campo completamente clássico e obtivemos uma expressão análoga à (5.12) sem a dependência explicita com o número de fótons do campo, conforme pode ser visto na Ref. [43].

Para que nossas aproximações sejam válidas, precisamos testar as condições de potencial harmônico e de lente fina para esses dados. A condição de potencial harmônico é garantida, pois  $b_0/\lambda \approx 10^{-3}$ . Para que a condição de lente fina possa ser usada, precisamos saber os valores médios da energia cinética transversa e potencial dos átomos. Ao entrarem na cavidade, o valor esperado da energia cinética dos átomos ao longo da direção x vale  $\langle \hat{E}_c \rangle = \langle \hat{p}_x^2 \rangle/2m = \hbar^2/8m \langle \hat{x}^2 \rangle \approx 10^{-34}$  J, o corresponde valor esperado da energia potencial, equação (5.11), vale  $\langle \hat{U}_P \rangle = \frac{\hbar k_P}{2f_P t_{L_c}} \langle \hat{x}^2 \rangle \approx 10^{-29}$  J, onde  $\langle \hat{x}^2 \rangle = b_0^2$ . Estes valores mostram que usar a aproximação de lente fina para focalizar o feixe atômico é razoável, pois  $\langle \hat{U}_P \rangle \approx 10^5 \langle \hat{E}_c \rangle$ . De fato, se usarmos as expressões (4.66) e (4.68) para o cálculo exato da distância focal e cintura do feixe obtemos, respectivamente,  $f_P = 101$  mm e  $w'_0 = \sqrt{2}b'_0 = 307$  nm. Os respectivos erros quando os cálculos são feitos na aproximação de lente fina são de 4% e 2%.

### 5.4 Proposta Experimental

O arranjo experimental necessário para medir a fase é descrito na Fig. 5.2. Átomos de Rydberg [107, 108, 109] são enviados um por um com velocidade ao longo do eixo z bem definida. Uma fenda é usada para colimar o feixe atômico na direção x. As zonas de Ramsey [123, 124]  $R_1 \in R_2$  são duas cavidades de microondas alimentadas por uma fonte comum S, enquanto  $C_1$ e  $C_2$  são duas cavidades de alto fator de qualidade Q preparadas para funcionar como lente fina para o feixe atômico. O campo dentro dessas cavidades é suprido pela fonte comum S'. O estado de cada átomo é medido no detetor D.

Na preparação dos átomos de Rydberg, seleciona-se três níveis atômicos



Figura 5.2: Esboço do arranjo experimental usado para medir a fase de Gouy para ondas de matéria. Átomos de Rydberg são enviados um por um com velocidade ao longo do eixo z bem definida. Uma fenda é usada para colimar o feixe atômico na direção x. As zonas de Ramsey  $R_1 \in R_2$ são duas cavidades de microondas alimentadas por uma fonte comum S, enquanto  $C_1 \in C_2$  são duas cavidades de alto Q preparadas para funcionar como lentes finas para o centro de massa do feixe atômico composto de estados internos específicos. O campo dentro dessas cavidades é suprido pela fonte comum S'. O estado de cada átomo é medido pelo detetor D.

com números quânticos principais 49, 50 e 51, chamados *i*, *g* e *e*, respectivamente. As transições  $g \Leftrightarrow e e i \Leftrightarrow g$  são 51, 1 e 54, 3 GHz, respectivamente [124]. Na Fig. 5.3, mostramos o diagrama dos níveis de energia atômicos, onde comparamos as frequências de transição desses níveis com a frequência do campo dentro das cavidades  $C_1 e C_2$ .  $\omega_{gi} = \omega_g - \omega_i$  é a frequência de transição do nível *i* para o nível g,  $\omega_{eg} = \omega_e - \omega_g$  é a frequência de transição do nível *g* para o nível *e*, onde  $\omega_i$ ,  $\omega_g e \omega_e$  são as frequências dos níveis *i*, *g* e *e*, respectivamente.  $\omega_c$  é a frequência do campo dentro das cavidades  $C_1 e$  $C_2$ ,  $\Delta_g = \omega_{eg} - \omega_c e \Delta_i = \omega_{gi} - \omega_c$  são as respectivas dessintonias.

A zona de Ramsey  $R_1$  prepara um estado atômico do tipo

$$|\psi\rangle = \psi(x)\left(|i\rangle + |g\rangle\right),\tag{5.13}$$

onde  $\psi(x)$  representa a parte espacial da função de onda atômica, preparada num estado gaussiano,  $|i\rangle \in |g\rangle$  representam os níveis atômicos internos com frequências dadas, respectivamente, por  $\omega_i \in \omega_g$ . O arranjo experimental é preparado de tal forma que apenas os átomos que passarem no nível  $|g\rangle$  pela primeira cavidade sentirão o efeito de lente, pois o átomo estando nesse nível ou no nível  $|e\rangle$  acopla fortemente com o campo, uma vez que a frequência de



Figura 5.3: Frequências de transição entre os níveis de energia atômicos comparadas com a frequência do campo dentro das cavidades  $C_1 \in C_2$ .  $\omega_{gi}$  é a frequência de transição do nível *i* para o nível *g*,  $\omega_{eg}$  é a frequência de transição do nível *g* para o nível *e*,  $\omega_c$  é a frequência do campo dentro das cavidades  $C_1 \in C_2$ ,  $\Delta_g \in \Delta_i$  são as respectivas dessintonias.

transição entre esses dois níveis é próxima da frequência do campo, embora não ressonante. Os átomos que passarem no nível  $|i\rangle$  não sentirão o efeito de lente, pois o átomo estando nesse nível acopla fracamente com o campo, uma vez que a frequência de transição desse nível para o nível  $|g\rangle$  ou  $|e\rangle$  está muito distante da frequência do campo. Devemos salientar que mesmo no caso de níveis fortemente acoplados, o acoplamento deve ser dispersivo para que o efeito de lente seja produzido [13, 102, 103].

O processo de focalização do feixe atômico composto de átomos no nível  $|g\rangle$  acontece da seguinte forma (ver Fig. 5.4): o estado gaussiano inicial  $\psi_g(x) = \psi(x)$  ao interagir durante o tempo  $t_{L_c}$  com a cavidade  $C_1$  ganha uma fase quadrática negativa  $e^{-i\frac{mx^2}{2ht_F}}$  (onde  $t_F$  é o tempo que os átomos levam para atingir o foco F), pois a dessintonia entre átomo e campo,  $\Delta_g = \omega_{ge} - \omega_c$ , é negativa, conforme ilustrado na Fig. 5.3. Da cavidade  $C_1$  para a cavidade  $C_2$ , o estado  $\psi_g(x)$  evolui livremente durante um tempo  $2t_F$  e ganha uma fase quadrática positiva  $e^{2i\frac{mx^2}{2ht_F}}$  e um termo de fase de Gouy  $e^{-i\mu(t)}$ . Assim, no intervalo de tempo  $t_{L_c} < t < t_F$ , a fase quadrática total do estado  $\psi_g(x)$  é positiva e está diminuindo para o valor zero em  $t = t_F$ , o estado converge para o foco, conforme representado pelas linhas sólidas. No intervalo  $t_F < t < 2t_F$ , a fase quadrática total é positiva, o estado se expande a partir do foco. Ao passar pela cavidade  $C_2$  o estado  $\psi_g(x)$  ganha novamente uma fase quadrática total é positiva, o estado se expande a partir do foco. Ao

de Gouy, i.e.,

$$\psi_q(x) = \psi(x)e^{-i\mu(t)},$$
(5.14)

onde  $\mu(t)$  é a fase de Gouy do estado focalizado relativa ao estado não focalizado. Assim, o estado total após passar pela segunda lente pode ser escrito como

$$|\psi\rangle = \psi(x) \left(|g\rangle e^{-i\omega_g t} e^{-i\mu(t)} + |i\rangle e^{-i\omega_i t}\right).$$
(5.15)



Figura 5.4: Ilustração da operação das cavidades  $C_1 \in C_2$  como lentes finas para o feixe atômico. As linhas tracejadas representam a cintura do feixe atômico se as cavidades estiverem vazias. Se um campo estiver presente, a linha sólida representa a cintura de um feixe composto por átomos no estado  $|g\rangle$ . F representa a região focal. Por outro lado, se o feixe é composto por átomos no estado  $|i\rangle$ , a cintura não muda significativamente.

Se fizermos uma medida interferométrica em  $|g\rangle$  ou  $|i\rangle$  do estado (5.15) vemos que a fase de Gouy  $\mu(t)$  desaparece. Para que este termo de fase possa ser extraído no experimento, precisamos fazer uma "mistura" dos estados  $|i\rangle$ e  $|g\rangle$  em (5.15) antes de fazermos a medida. Tal mistura é feita na segunda zona de Ramsey  $R_2$  e o estado obtido é dado por

$$|\psi\rangle = \psi(x) \left[ \frac{(|g\rangle + |i\rangle)}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_g t} e^{i\frac{\omega_R}{2}t} e^{-i\mu(t)} + \frac{(|g\rangle - |i\rangle)}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_i t} e^{-i\frac{\omega_R}{2}t} \right], \quad (5.16)$$

onde  $\omega_R$  é a frequência proveniente do campo da zona de Ramsey.

Agora, fazendo uma medida em  $|g\rangle$  do estado (5.16) obtemos um resultado que depende da fase  $\mu(t)$ , i.e.,

$$\langle g|\psi\rangle = \frac{\psi(x)}{\sqrt{2}} \left( e^{-i\omega_g t} e^{i\frac{\omega_R}{2}t} e^{-i\mu(t)} + e^{-i\omega_i t} e^{-i\frac{\omega_R}{2}t} \right), \tag{5.17}$$

e a intensidade medida no detetor D da Fig. 5.2 é dada por

$$I = |\langle g | \psi \rangle|^2 = |\psi(x)|^2 \left[ 1 + \cos(\phi + \mu(z)) \right], \qquad (5.18)$$

onde  $\phi = -(\omega_{gi} - \omega_R)t$  [124] e  $z = v_z t$  [41].

O termo de fase de Gouy pode colocar um deslocamento de  $\pi/2$  na fase total o que implica um deslocamento no padrão de interferência relativo ao padrão medido para o caso sem lente. Na Fig. 5.5, mostramos a curva de intensidade para o caso com lente e comparamos com a curva de intensidade para o caso sem lente, onde observamos um deslocamento de uma curva em relação à outra provocado pela diferença de  $\pi/2$  na fase total. É essa alteração na intensidade que esperamos que seja observada no experimento proposto.



Figura 5.5: Intensidade em função da fase  $\phi$ . Linha pontilhada representa a intensidade para um feixe atômico não focalizado e linha tracejada é a intensidade para um feixe focalizado.

Mencionamos anteriormente que apenas os átomos no estado  $|g\rangle$  sentiriam o efeito de lente ao passar pelas cavidades  $C_1 \in C_2$ , pois este nível está fortemente acoplado ao nível acima  $|e\rangle$ . O valor de dessintonia  $\Delta/(2\pi) =$ -30 MHz usado para calcular a distância focal na seção anterior corresponde à dessintonia da transição  $g \rightarrow e$  com o campo, i.e.,  $\Delta_g/(2\pi) = -30$  MHz, o que corresponde a uma constante de acoplamento efetiva igual a G = $2\Omega_0^2/|\Delta_q| = 36, 4$  kHz, mostrando que esta transição está fortemente acoplada com o campo. O limite dispersivo na região do feixe atômico é garantido, pois  $\bar{n} (\Omega_0/\Delta)^2 k^2 b_0^2 = 8 \times 10^{-4} \ll 1$ , onde k é o módulo do vetor de onda do campo. Portanto, os níveis estão acoplados com o campo, mas não haverá transição. Esta condição é essencial para termos o efeito de lente [13]. Para a transição  $i \to g$  ou  $i \to e$  deveremos ter um acoplamento fraco, pois os átomos que passarem pelas cavidades  $C_1$  e  $C_2$  no nível *i* não podem sentir o efeito de lente para que nossa proposta experimental seja viável. Esta exigência é satisfeita para os dados que vimos utilizando, pois a dessintonia da transição  $i \to g$  com o campo vale  $\Delta_i = \omega_{gi} - \omega_c = +3,2$  GHz, o que corresponde a uma constante de acoplamento efetiva da ordem de 107 Hz. Neste caso, as cavidades  $C_1 \in C_2$  funcionarão como uma lente divergente, produzindo uma distância focal da ordem de -11 m, para o feixe atômico composto de átomos no nível  $|i\rangle$ . Este valor de distância focal implica que o feixe atômico composto de átomos no nível  $|i\rangle$  não sente o efeito de lente no intervalo de distância que separa as cavidades  $C_1 \in C_2$ , cujo valor experimental é da ordem de 20 cm [124]. Este efeito é representado pelas linhas tracejadas na Fig. 5.4.

O tempo de vida dos estados excitados é da ordem de 30 ms [107, 124]. Assim, o tempo de voo dos átomos no experimento não pode ultrapassar este valor. Multiplicando este tempo pela velocidade atômica longitudinal  $v_z = 50$  m/s, obtemos a distância máxima permitida para a realização das medidas, i.e.,  $z \approx 1,5$  m. Como nossa distância focal é apenas 105 mm, uma distância de 1,5 m é mais que suficiente para realizarmos as medidas antes do átomo decair. De fato, se tomarmos uma distância de 21 cm, um valor razoável, pois é experimentalmente atingível para átomos de Rydberg [124], teremos um intervalo com aproximadamente 70 comprimentos de Rayleigh  $z'_0$ , que já é mais que suficiente para termos uma variação de  $\pi/2$  na fase de Gouy.

#### Possíveis Problemas Experimentais

A dispersão na velocidade longitudinal causa uma aberração no foco. Por exemplo, para uma dispersão de 2% na velocidade, i.e.,  $\Delta v_z = 0,02v_z$ , teremos uma dispersão na distância focal de 3,7%. Entretanto, esta aberração não atrapalha o efeito da fase de Gouy de deslocar as franjas de interferência, podendo apenas borrá-las. A flutuação no número de fótons na cavidade  $\Delta \bar{n} = \sqrt{\bar{n}} = 1732$ , produz uma dispersão na distância focal de apenas 0,095%, que também pode ser desconsiderado. Um efeito que pode aparecer e mascarar o efeito da fase de Gouy é a existência de um termo de fase devido ao fato de o mínimo do potencial criado pelo campo eletromagnético nas cavidades lentes  $C_1 \in C_2$  não ser zero, uma vez que este potencial é produzido pela interferência de campos contra-propagantes, onde a intensidade de campo dificilmente será zero no nó de campo elétrico para cavidades reais. Este efeito está ilustrado na Fig. 5.6, a fase dispersiva máxima que o átomo pode sentir é dada por  $\phi_{dis}^{max} = \bar{n}\Omega_{R_{max}}^2 t_{L_c}/\Delta$  e a fase dispersiva mínima será  $\phi_{dis}^{min} = \bar{n}\Omega_{R_{min}}^2 t_{L_c}/\Delta$ . Se a intensidade do campo no



Figura 5.6: Dependência do acoplamento com a posição transversa do átomo.

nó de campo elétrico da cavidade for 1% da intensidade do campo em um anti-nó, i.e.,  $\Omega_{R_{min}}^2 = 0,01\Omega_{R_{max}}^2$  (lembrando que  $\Omega_R(x) \propto E(x)$ ), tal efeito será grande o suficiente para mascarar o efeito da fase de Gouy, pois neste caso a fase acumulada devido à intensidade de campo no nó será igual a  $\phi_{dis}^{min} \approx -2906$  rad para os dados adotados para os átomos de Rydberg. Assim, para que este efeito seja desprezível em relação ao efeito da fase de Gouy é necessário que a intensidade do campo no nó seja menor que em um anti-nó por um fator da ordem de  $10^6$ , i.e.,  $\Omega_{R_{max}}^2 = 10^6 \Omega_{R_{min}}^2$ . Tal exigência pode ser atendida para cavidades com altíssimos fatores de qualidade, pois neste caso  $\Omega_R^{min} = \Omega_R^{max}/\sqrt{Q}$ , onde Q é o fator de qualidade da cavidade [124]. Por exemplo, se  $Q = 10^6$ , a fase dispersiva devido à passagem dos átomos pela região de mínimo será da ordem de -0, 3 rad. Assim, para que uma fase indesejada não mascare o efeito da fase de Gouy devemos ter  $Q > 10^6$ , o que pode ser experimentalmente obtido [112, 113, 124]. Os resultados deste capítulo estão submetidos para publicação na revista: *Phys. Rev. Lett.*, cuja cópia apresentamos em anexo.

Capítulo 6

# Conclusões

Concluímos sobre os resultados do capítulo 3, que uma fase de caráter geométrico (fase de Gouy) para ondas de matéria pode ser definida e mostramos que a mesma é compatível com dados experimentais existentes. Mostramos que o conteúdo físico dessa fase é a sua relação com a relação de incerteza generalizada, mais especificamente, os elementos fora da diagonal principal da matriz de covariância,  $\sigma_{xp}$ . Também mostramos que a existência dessa fase é compatível com dados experimentais envolvendo a difração de moléculas de fulereno. Vimos que a descrição quântica de um feixe de fulerenos é análoga à descrição de um feixe gaussiano de luz do tipo Schell, onde definimos um fator de qualidade para o feixe de fulerenos. Acreditamos que esses resultados encoragem os experimentais a implementar um experimento de medida direta dessa fase, uma vez que atualmente a fabricação de lentes capazes de focalizar feixes atômicos é possível [39]. Naturalmente, o experimento com moléculas de fulereno não é o melhor candidato para exibir a fase devido a sua incoerência na direção transversa. Nesse aspecto, experimento com nêutrons poderá exibir melhor a fase de Gouy para as ondas de matéria.

Concluímos sobre os resultados do capítulo 4, que a construção de uma lente quântica para átomos é possível a partir da interação dispersiva de um estado atômico inicialmente comprimido em momento e um campo estacionário produzido numa cavidade. Mostramos que os parâmetros de um feixe gaussiano de ondas de matéria após passar por uma lente quântica podem ser expressos em termos dos respectivos parâmetros antes da focalização, definindo a grandeza magnificação do feixe assim como acontece na focalização de um feixe gaussiano de luz. Outro resultado muito importante deste capítulo é a existência de uma anomalia de fase para ondas de matéria em torno do foco de uma lente quântica. O conhecimento de tais propriedades nos projeta rumo a uma proposta experimental para medir a fase usando arranjos experimentais semelhantes aos usados para medir a fase de Gouy para a luz.

Concluímos sobre os resultados do capítulo 5, que o deslocamento de fase de Gouy em ondas de matéria pode ser observado usando interferometria atômica Ramsey com estados atômicos de Rydberg focalizados. Devido a este efeito, a interferência de feixes atômicos focalizados tem que levar em conta a diferença de fase de Gouy que um estado atômico ganha em relação ao outro. Escolhemos os átomos de Rydberg ultrafrios como espécie atômica para medir a fase devido ao grande avanço tecnológico rumo a uma manipulação experimental coerente dessas espécies. Nossos cálculos também mostram que algumas quantidades, tais como foco e distâncias focais, são bem acessíveis experimentalmente para átomos de Rydberg ultrafrios.

### 6.1 Perspectivas

Obter a expressão para a fase de Gouy de um estado gaussiano misto a partir de propriedades geométricas, um resultado ainda não explorado na literatura. Acreditamos que a expressão teórica poderá ser facilmente confirmada com um experimento de medida de fase de Gouy com estados gaussianos de luz do tipo Schell.

Estudar possíveis aplicações da fase de Gouy para ondas de matéria no campo da interferometria atômica, informação quântica, transferência de momento angular orbital, microscopia eletrônica, etc.

Estudar este termo de fase em ondas evanescentes.

# Anexos

# BIBLIOGRAFIA

- [1] O. Nairz, M. Arndt, and A. Zeilinger, *Phys. Rev. A* 65, 032109 (2002).
- [2] N. Bohr, *Naturwissenschafter* **16**, 245 (1928).
- [3] N. Bohr, *Nature* **121**, 508 (1928).
- [4] M. O. Scully, B. G. Englert, and H. Walther, *Nature* **351**, 111 (1991).
- [5] B. G. Englert, M. O. Scully, and H. Walther, *Nature* **375**, 367 (1995).
- [6] E. P. Storey, S. M. Tan, M. J. Collett, and D. F. Walls, *Nature* **375**, 368 (1995).
- [7] H. M. Wiseman and F. Harrison, *Nature* **377**, 584 (1995).
- [8] H. M. Wiseman *et al.*, *Phys. Rev. A* 56, 55 (1997).
- [9] M. Arndt, O. Nairz, J. Vos-Andreae, C. Keller, G. van der Zouw, and A. Zeilinger, *Letters to Nature* 401, 680 (1999).
- [10] B. Zimmermann et al., Nature Physics 4, 648 (2008).
- [11] A. Yariv, Optical Electonics (Saunders College Publishers, Philadelphia, 1991).
- [12] A. W. Snyder and J. D. Love, Waveguide Theory (Chapman and Hall, London, 1991).
- [13] P. R. Berman, Atom Interferometry (Academic Press, San Diego, 1997).
- [14] M. A. M. Marte and S. Stenholm, *Phys. Rev. A* 56, 2940 (1997).

- [15] I. G. da Paz, Ondas de Matéria e Propagação Paraxial da Luz (Dissertação de Mestrado, UFMG, 2006).
- [16] J. Yang and H. G. Winful, *Opt. Lett.* **31**, 104 (2006).
- [17] G. Gouy, C. R. Acad. Sci. Paris **110**, 1251 (1890).
- [18] G. Gouy, Ann. Chim. Phys. Ser. 6, 24, 145 (1891).
- [19] B. E. A. Saleh and M. Teich, Fundamentals of Photonics (John Wiley Sons, New York, 1991).
- [20] A. E. Siegman, *Lasers* (University Science Books, 1986).
- [21] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics* (Cambridge University Press, Cambridge 7ed, 1999).
- [22] L. Mandel and E. Wolf, Optical Coherence and Quantum Optics (Cambridge, New York, 1995).
- [23] O. Svelto, *Principles of Lasers* (Springer, New York 4ed, 1998).
- [24] R. W. Boyd, J. Opt. Soc. Am. 70, 877 (1980).
- [25] R. Simon and N. Mukunda, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 880 (1993).
- [26] P. Hariharan and P. A. Robinson, J. Mod. Opt. 43, 219 (1996).
- [27] S. Feng, H. G. Winful, and R. W. Hellwarth, *Opt. Lett.* 23, 385 (1998).
- [28] S. Feng and H. G. Winful, *Opt. Lett.* **26**, 485 (2001).
- [29] R. Simon, E. C. G. Sudarshan, and N. Mukunda, *Phys. Rev. A* 37, 3028 (1988).
- [30] H. C. Kandpal, S. Raman and R. Methrotra, Optics and Lasers in Eng., 45, 249 (2007).
- [31] A. B. Ruffin *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3410 (1999).
- [32] F. Lindner *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 113001 (2004).
- [33] D. Kawase et al., Phys. Rev. Lett. 101, 050501 (2008).

- [34] L.A.P. Filpi, M.V.C. Pereira, and C.H. Monken, *Measurement of the Gouy phase anomaly on a fourth-order correlation beam* (a ser publicado).
- [35] D. Chauvat, O. Emile, M. Brunel, and A. L. Floch, Am. J. Phys. 71, 1196 (2003).
- [36] N. C. R. Holme, B. C. Daly, M. T. Myaing, and T. B. Norris, Appl. Phys. Lett. 83, 392 (2003).
- [37] W. Zhu, A. Agrawal and A. Nahata, Opt. Express 15, 9995 (2007).
- [38] T. Feurer, N. S. Stoyanov, D. W. Ward, and K. A. Nelson, *Phys. Rev. Lett.* 88, 257402 (2002).
- [39] I. G. da Paz *et al.*, *Phys. Lett. A* **374**, 1660 (2010).
- [40] I. G. da Paz, M.C. Nemes, and J.G. Peixoto de Faria, J. Phys.: Conference Series 84, 012016 (2007).
- [41] I. G. da Paz, P. L. Saldanha, M.C. Nemes, and J. G. Peixoto de Faria, Experimental proposal for measuring the Gouy phase for matter waves (a ser publicado).
- [42] I. G. da Paz *et al.*, *Quantum lens and Gouy phase for matter waves* (em preparação).
- [43] I. G. da Paz, M. C. Nemes, and J. G. Peixoto de Faria, Book Electromagnetic Waves ISBN 978-953-307-174-9 (chapter Gouy Phase and Matter Waves) (InTech, 2011).
- [44] Z. L. Horváth and Zs. Bor, *Phys. Rev. E* **60**, 2337 (1999).
- [45] Z. L. Horváth, J. Vinkó, Zs. Bor, D. von der Linde, Appl. Phys. B 63, 481 (1996).
- [46] G. Gbur, T. D. Visser, and E. Wolf, *Phys. Rev. Lett.* 88, 013901 (2002).
- [47] L. Allen, M. W. Beijersbergen, R. J. C. Spreeuw, and J. P. Woerdman, *Phys. Rev. A* 45, 8185 (1992).
- [48] M. W. Beijersbergen, L. Allen, H. E. L. O. van der Veen, and J. P. Woerdman, *Opt. Comm.* 96, 123 (1993).

- [49] K. Y. Bliokh et al., Phys. Rev. Lett. 99, 190404 (2007).
- [50] M. Uchida, and A. Tonomura, *Nature* **464**, 737 (2010).
- [51] B. J. McMorran *et al.*, *Science* **331**, 192 (2011).
- [52] J. F. Riou at al., *Phys. Rev. A* 77, 033630 (2008).
- [53] O. Nairz, M. Arndt, and A. Zeilinger, Am. J. Phys. 71, 319 (2003).
- [54] A. Viale, M. Vicari, and N. Zanghì, *Phys. Rev. A* 68, 063610 (2003).
- [55] D. Stoler, J. Opt. Soc. Am. **71**, 334 (1981).
- [56] A. F. R. T. Piza, *Mecânica Quântica* (Edusp, São Paulo, 2003).
- [57] A. C. Schell, *The Multiple Plate Antenna* (PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, September 1956).
- [58] F. Gori, *Optica Acta* **27**, 1025 (1980).
- [59] R. Borghi and M. Santarsiero, *IEEE Journal of Quantum Eletronics* 35, 745 (1999).
- [60] J. C. Dainty, Laser Speckle and Related Phenomena (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, New York, 1975).
- [61] A. E. Siegman, *IEEE Journal of Quantum Eletronics* 27, 1146 (1991).
- [62] A. E. Siegman and S. W. Townsend, *IEEE Journal of Quantum Eletron*ics 29, 1212 (1993).
- [63] C. Palma, G. Cincotti, and G. Guattari, *IEEE Journal of Quantum Eletronics* 34, 378 (1998).
- [64] I. G. S. Jorge and E. F. M. Francisco, *Optik* **114**, 343 (2003).
- [65] R. Gase, J. Opt. Soc. Am. A **11**, 2121 (1994).
- [66] Y. Qiu, J. Liu, and Z. Chen, Optics Communications 282, 69 (2009).
- [67] S. Zheng and Y. Huan-Xiong, Acta Physica Sinica 8, 81 (1999).
- [68] P. Jixiong, J. Optics **22**, 157 (1991).

- [69] G. Gbur and E. Wolf, J. of Modern Optics 48, 1735 (2001).
- [70] G. Glionna *et al.*, *Physica A* **387**, 1485 (2008).
- [71] O. Nairz, M. Arndt, and A. Zeilinger, J. Modern Optics 47, 2811 (2000).
- [72] L. de Broglie, *Nature* **112**, 540 (1923).
- [73] C. Davisson and L. H. Germer, *Nature* **119**, 558 (1927).
- [74] R. Gähler and A. Zeilinger, Am. J. Phys. 59, 316 (1991).
- [75] I. Estermann and O. Stern, Z. Phys. **61**, 95 (1930).
- [76] C. Jönsson, Am. J. Phys. 42, 4 (1974).
- [77] A. Zeilinger et al., Rev. Mod. Phys. 60, 1067 (1988).
- [78] O. Carnal and J. Mlynek, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2689 (1991).
- [79] R. P. Feynman and G. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals (Mac-Graw-Hill, New York, 1965).
- [80] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. OBrien, R. F. Curl, and R. E. Smalley, *Nature* **318**, 162 (1985).
- [81] W. H. Zurek, Rev. Mod. Phys. 75, 715 (2003).
- [82] L. E. Ballentine, *Quantum Mechanics* (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, 1998).
- [83] M. O. Scully and M. S. Zubairy, *Quantum Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [84] U. Fano, Rev. Mod. Phys. 29, 74 (1957).
- [85] E. Hecht, *Optics* (Adisson Wesley, San Francisco, 4nd edition, 2002).
- [86] R. Brühl et al., Europhys. Lett. 59, 357 (2002).
- [87] R. E. Grisenti, W. Schöllkopf, and J. P. Toennies, *Phys. Rev. Lett.* 83, 1755 (1999).
- [88] E. M. Lifshtz, Sov. Phys. JETP. 2, 73 (1961).

- [89] B. I. Lundqvist et al., Progress in Surface Science 59, 149 (1998).
- [90] R. R. Zope, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 40, 3491 (2007).
- [91] B. Brezger *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 100404-1 (2002).
- [92] M. V. Berry, Proc. R. Soc. Lond. A **392**, 45 (1984).
- [93] E. M. Rabei, Arvind, N. Mukunda, and R. Simon, Phys. Rev. A 60, 3397 (1999).
- [94] J. G. P. de Faria, Aspectos do Entrelaçamento em Sistemas Quânticos Abertos (Tese de Doutorado, UFMG, 2001).
- [95] C. Gerry and P. Knight, *Introductory Quantum Optics* (Cambridge University Press: The Edinburgh Building, Cambridge, CB2 2RU, UK, 2005).
- [96] W. P. Schleich, *Quantum Optics in Phase Space* (Berlin: Wiley-VCH, 2001).
- [97] R. R. Puri, Mathematical Methods of Quantum Optics (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, New York, 2001).
- [98] D. F. V. James, Fortschr. Phys. 48, 823 (2000).
- [99] A. Ashkin, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 156 (1970).
- [100] I. Lesanovsky, Quantum dynamics of ultracold atoms in inhomogeneous magnetic fields (PhD thesis, Combined Faculties for the Natural Sciences and for Mathematics of the Ruperto-Carola University of Heidelberg, Germany, April 2006).
- [101] P. Treutlein, Coherent Manipulation of Ultracold Atoms on Atom Chips (PhD thesis, Ludwig-Maximilians-Universität München and Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Germany, April 2008).
- [102] I. S. Averbukh, V. M. Akulin and W. P. Schleich, *Phys. Rev. Lett.* 72, 437 (1994).
- [103] B. Rohwedder and M. Orszag, *Phys. Rev. A* 54, 5076 (1996).

- [104] J. S. Peng and G. X. Li, Introduction to Modern Quantum Optics (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, 1998).
- [105] I. Bialynicki-Birula, Acta Phys. Pol. B29, 3569 (1998); id., Frontier Tests of QED and Physics of the Vacuum, eds. E. Zavattini, D. Bakalov, and C. Rizzo, (Heron Press, Sofia, 1998).
- [106] D. A. Steck, *Cesium D Line Data* (Oregon Center for Optics and Department of Physics, University of Oregon).
- [107] R. Ejnisman and P. Nussenzveig, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **19**, 90 (1997).
- [108] P. Nussenzveig et al., Phys. Rev. A 48, 3991 (1993).
- [109] T. F. Gallagher, *Rydberg Atoms* (Cambridge University Press, Cambridge, 1994).
- [110] L. Davidovich et al., Phys. Rev. A 45, 5193 (1992).
- [111] N. Zagury et al., Phys. Rev. Lett. 65, 976 (1990).
- [112] S. Gleyzes et al., Nature 446, 297 (2007).
- [113] G. Nogues *et al.*, *Nature* **400**, 239 (1999).
- [114] P. Goy et al., Phys. Rev. Lett. 50, 1903 (1983).
- [115] R. Hulet, E. S. Hilfer, *Phys. Rev. Lett.* 55, 2137 (1985).
- [116] D. J. Heinzen et al., Phys. Rev. Lett. 58 1320 (1987).
- [117] W. Jhe et al., Phys. Rev. Lett. 58, 666 (1987).
- [118] R. J. Thompson, G. Rempe and H. J. Kimble, Phys. Rev. Lett. 68, 1132 (1992).
- [119] M. Bruce et al., Phys. Rev. Lett. 72, 3339 (1994).
- [120] K. An, J. Childs, R. R. Dasari and M. S. Feld, *Phys. Rev. Lett.* 73 3375 (1994).
- [121] M. Bruce et al., Phys. Rev. Lett. 76, 1800 (1996).
- [122] J. Fortágh and C. Zimmermann Rev. Mod. Phys. **79**, 235 (2007).

- [123] J. I. Kim et al., Phys. Rev. Lett. 82, 4737 (1999).
- [124] J. M. Raimond, M. Brune, and S. Haroche, Rev. Mod. Phys. 73, 565 (2001).
- [125] H. M. Nussenzveig, Curso de Física Básica Vol. 4 (Edgard Blücher, 2002).

\_\_\_