

# O salto quântico e a simulação de Monte Carlo da função de onda

Guilherme David Araujo

## I. INTRODUÇÃO

Neste trabalho, apresentamos o método da simulação de Monte Carlo da função de onda (MCWF) como alternativa para a evolução temporal de sistemas quânticos abertos através da função de onda. Esse tratamento é usualmente realizado com simulações da equação mestra envolvendo a evolução do operador de densidade do sistema. O método MCWF produz trajetórias estocásticas para a função de onda de um sistema individual constituídas de uma evolução não hermitiana pontuada por saltos descontínuos da função de onda; o método então calcula valores esperados de observáveis com o resultado médio de diversas trajetórias realizadas. A interpretação física da construção do método envolve o interessante conceito de salto quântico, cuja relativamente polêmica evolução teórica e observação será também abordada em uma contextualização didática.

## II. O SALTO QUÂNTICO

O salto quântico é compreendido como o colapso descontínuo da função de onda de um sistema quântico, seja pela emissão ou absorção de um fóton, pelo efeito de uma medida quântica, que perturba o sistema, ou qualquer outro processo que provoque uma aparente mudança abrupta no comportamento do sistema (pensamos intuitivamente em um salto entre estados ou misturas de estados). No começo do desenvolvimento da mecânica quântica, muitos cientistas não eram favoráveis à ocorrência real de saltos quânticos, pelos saltos serem uma intuição clássica. Os mecanismos a nível individual deveriam ser outros; além disso, eles não são incluídos na teoria pela dinâmica de Schroedinger ou pelas equações de Bloch. As discussões teóricas envolviam as controvérsias sobre variáveis ocultas e a incompletude da mecânica quântica.[1]

A princípio, tendo apenas experimentos quânticos envolvendo muitos átomos, não havia como saber se os saltos eram realizados pelos sistemas quânticos ou eram apenas frutos da nossa intuição dos processos. Mas com o avanço de tecnologias que permitiram experimentos observando transições em átomos individuais, hoje sabemos que os sistemas quânticos realmente realizam os saltos ao transicionar de um estado para outro, e o que sempre observamos em amostras de muitos átomos é sim consequência dos saltos no âmbito individual.

No meio da década de oitenta, os debates a cerca da ocorrência real de saltos quânticos se intensificaram com o surgimento de propostas teóricas que incluíam sua ocorrência como hipótese (como é o caso do próprio método MCWF, mas este foi desenvolvido depois). Em pouco tempo os debates chegaram a uma conclusão com a observação macroscópica de saltos quânticos em átomos individuais.[2]

A proposta experimental da observação possui um delineamento simples.[3] De forma simplificada, o que ocorre é o seguinte; um único íon é aprisionado em uma armadilha ótica, consideramos três estados, como mostra a figura 1. O estado 1 é o fundamental, o 3 é um estado excitado com alta taxa de decaimento e o 2 é um estado excitado metaestável, com baixa taxa de decaimento.

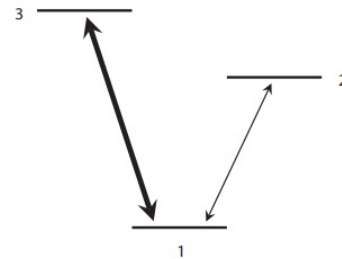


Figura 1: Esquema do átomo de três níveis do experimento da observação macroscópica do salto quântico. A transição 1-3 é "forte" e a transição 1-2 é "fraca".

O átomo se encontra inicialmente no estado 1, então incidimos sobre ele um laser ressonante com a transição  $1 \rightarrow 2$ . O átomo pode ser levado para o estado 2 para permanecer lá durante o tempo de decaimento do estado metaestável, mas a princípio não sabemos se o laser conseguiu levá-lo. Então incidimos sobre o átomo um laser ressonante com a transição  $1 \rightarrow 3$  e detectamos os fótons emitidos pelo átomo. Se o primeiro laser levou o átomo para o nível 2, não esperamos que fótons sejam detectados. Se o átomo continua no nível 1, o segundo laser, enquanto aplicado, leva o átomo ao nível 3, que então decai novamente para o nível 1 emitindo um fóton; então o laser excita o átomo novamente, que então decai emitindo outro fóton (se o laser for suficientemente potente, podemos esperar até  $10^8$  emissões por segundo, neste caso). Percebemos então que no caso do átomo ter sido levado ao nível 2, o elétron da transição se encontra "guardado", indisponível para essa emissão direcionada pelo segundo laser (o nome do procedimento é "shelved-eletron detection"). Se então aplicamos os dois lasers simultaneamente, percebemos a ocorrência de duas situações detectadas, que chamamos de ligada e desligada. Na situação ligada, o átomo oscila com a transição 1-3, emitindo muitos fótons. Na situação desligada, o átomo não emite fótons e o elétron fica guardado no estado 2. A alternância entre as duas situações, detectada no experimento, ocorre em tempos aleatórios determinados pela permanência no estado metaestável e pelo evento de o

elétron ser guardado nesse estado. A detecção dessa alternância é a observação macroscópica dos saltos quânticos a nível atômico. Na figura 2 vemos os resultados das medidas desse experimento feito pelo NIST.

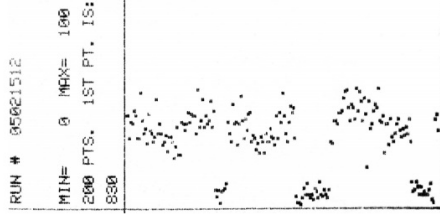


Figura 2: Uma das primeiras observações claras dos saltos quânticos em íons  $Hg^+$ . Escala em número de fótons por tempo, sem subtração de fundo.

Apesar dos avanços em observações, no que envolve a realidade objetiva por trás dos processos que percebemos como saltos quânticos, ainda há muito a ser investigado e ainda não temos uma resposta que possa elucidar o fenômeno, assim como muitos fenômenos quânticos ainda não possuem seus mecanismos mais fundamentais elucidados pelo panorama teórico.

Voltamos agora para a descrição dos sistemas abertos que iniciará o desenvolvimento do método MCWF. Veremos mais adiante com detalhes como os saltos quânticos fazem parte da construção teórica do método.

### III. SISTEMAS QUÂNTICOS ABERTOS

O interesse do método MCWF é simular a evolução de um sistema quântico aberto. Nesta seção apresentamos o tratamento mais usual da equação mestra para o operador de densidade.[4] Em particular, consideramos o sistema aberto como o sistema quântico visado estando em contato com um reservatório ( $S + R$ ), sujeito a uma dinâmica dissipativa (ou seja, temos um pequeno sistema em contato com um grande reservatório através de um acoplamento dissipativo). Consideramos a hipótese de markovianidade, ou seja, a evolução do operador de densidade depende apenas de seu valor instantâneo e o sistema não guarda memória dos instantes anteriores.

Definimos assim a classe de sistemas a serem abordados. Para estes sistemas que não se encontram em estados quânticos puros, a função que melhor representa o sistema em estados mistos desconhecidos (como é o caso dos sistemas abertos) não é a função de onda, mas sim o operador de densidade, definido por

$$\rho_S = \sum_i p_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| = \text{Tr}_R(\rho_{S+R}). \quad (1)$$

Temos que  $\Psi_i$  e  $p_i$  são os estados puros e suas respectivas probabilidades associadas. Tendo  $\rho_S$ , calculamos o valor esperado de qualquer observável no sistema através da equação

$$\langle A(t) \rangle = \text{Tr}(\rho_S(t)A). \quad (2)$$

No sistema misto aberto, não conhecemos esses parâmetros de estado puro para construir explicitamente  $\rho_S$ . Fazemos sua evolução temporal diretamente com a equação mestra

$$\dot{\rho}_S = (i/\hbar)[\rho_S, H_S] + V_D(\rho_S), \quad (3)$$

em que  $V_D$  é o potencial de interação com o reservatório, sendo a fonte de dissipação na dinâmica. Vamos considerar a seguinte forma do potencial de dissipação:

$$V_D(\rho_S) = \sum_n \left( C_n \rho_S C_n^\dagger - \frac{1}{2} (\rho_S C_n^\dagger C_n + C_n^\dagger C_n \rho_S) \right). \quad (4)$$

A hipótese de markovianidade garante que  $\rho_S$  e  $\rho_R$  sejam sempre decorrelacionados; a influência do reservatório no sistema (e a fonte de dissipação) se dá através dos operadores  $C_n$  que atuam somente no sistema e podem variar em número, indo de um até infinito, dependendo do problema em questão.

Temos agora uma descrição suficiente do contexto de aplicação do método MCWF; vamos agora nos voltar ao método, primeiramente introduzindo a forma algorítmica de métodos de Monte Carlo em geral.

### IV. MÉTODO DE MONTE CARLO

O método de Monte Carlo consiste basicamente em se utilizar de eventos aleatórios em um algoritmo para a determinação de parâmetros que podem ser tanto probabilísticos, como uma simulação estocástica, quanto determinísticos, como uma integração numérica. A caracterização do método pode ser entendida da seguinte maneira; definimos domínios representando eventos diferentes, então geramos um (ou mais de um, dependendo do problema) número aleatório seguindo uma distribuição de probabilidades apropriada ao problema. Tomamos um critério para determinar através do número aleatório qual dos eventos é escolhido para ocorrer, então atualizamos o sistema em questão de acordo com esse evento. Depois de sucessivas ocorrências, conseguimos determinar algo através do padrão aleatório de evolução seguindo os eventos determinados.

Como exemplo, considere o sistema ilustrado na figura 3. O objetivo é calcular o valor de  $\pi$  usando o método em uma integração numérica, ou seja, pra calcular a "área abaixo da curva" representada pelo setor circular contido no quadrado. Temos dois domínios, dentro ou fora do setor circular. A cada passo, geramos um número aleatório uniformemente distribuído na área do quadrado, então a chance de cair dentro ou fora é proporcional às áreas de dentro e fora, respectivamente. Dessa forma, o número gerado aleatoriamente determina qual dos dois eventos ocorre, se um ponto vai ser gerado dentro ou fora. Depois de muitos passos, a razão entre o número de eventos dentro e o número total de eventos é a razão entre as áreas do setor circular e o quadrado,  $\pi/4$  e 1. Na verdade, a cada iteração, atualizamos a função pertinente  $f(n_{in}) = n_{in}/(n_{in} + n_{out}) = n_{in}/n$ . No final de  $n$  iterações, usamos o valor aproximado em que chegamos. É possível e interessante fazer esse mesmo cálculo de  $\pi$  por Monte Carlo desenhando as áreas no chão com um compasso e jogando

feijões aleatoriamente sobre o desenho (tomando cuidado para se aproximar de um lançamento uniforme); o resultado é surpreendente.

Na próxima seção, vamos desenvolver o método MCWF segundo o mesmo formato de algoritmo explicado nesta seção.

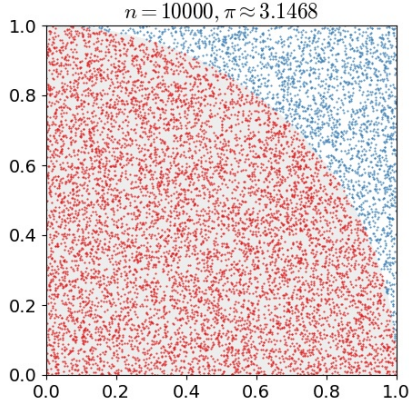


Figura 3: Ilustração do método de Monte Carlo aplicado na determinação do valor de  $\pi$ . A imagem mostra o valor aproximado de  $\pi$  depois de  $n = 10000$  eventos aleatórios.

## V. MÉTODO MCWF

Consideramos um sistema como o descrito na seção III. Ao invés de caracterizar o sistema pelo operador de densidade  $\rho_S$  e em contato com um reservatório, vamos caracterizá-lo como se estivesse isolado, em um estado descrito por sua função de onda normalizada  $|\phi(t)\rangle$ , com a hamiltoniana efetiva não hermitiana:

$$H = H_S - \frac{i\hbar}{2} \sum_n C_n^\dagger C_n. \quad (5)$$

Mas a evolução do sistema será dada da seguinte forma:[5] como descrito no algoritmo básico do método de Monte Carlo, vamos sortear um número real aleatório  $\epsilon$  uniformemente distribuído no intervalo  $[0, 1]$ . Separamos a evolução temporal em passos de tamanho  $\delta t$  (que deve ser escolhido de forma a ser maior que o tempo de correlação do reservatório  $\tau_c$ ). Vamos adotar um critério tal que, se  $\epsilon$  for maior que certo valor, a função de onda evolui de acordo com a hamiltoniana dada. Se  $\epsilon$  for menor que o valor estipulado, ocorrerá um salto quântico. Então realiza-se mais um passo. Temos então descritos os dois eventos possíveis a serem escolhidos pelo resultado do sorteio de  $\epsilon$ . Vamos agora trabalhar com o sistema de forma a quantificar o procedimento.

Vamos supor que no primeiro passo não haja um salto. Então temos a seguinte evolução para a função de onda:

$$|\phi(t + \delta t)\rangle = e^{-iH\delta t/\hbar} |\phi(t)\rangle = \left(1 - \frac{iH\delta t}{\hbar}\right) |\phi(t)\rangle, \quad (6)$$

em que consideramos o fato de  $\delta t$  ser muito pequeno. Uma vez que  $H$  não é hermitiano, ele não preserva a norma de  $|\phi(t)\rangle$ . Consideramos a norma do estado evoluído:

$$\langle\phi(t + \delta t)|\phi(t + \delta t)\rangle = \langle\phi(t)| \left(1 + \frac{iH^\dagger\delta t}{\hbar}\right) \left(1 - \frac{iH\delta t}{\hbar}\right) |\phi(t)\rangle. \quad (7)$$

Então definimos esse valor como sendo igual a  $(1 - \delta p)$ , de forma que

$$\delta p = \frac{i\delta t}{\hbar} \langle\phi(t)| (H - H^\dagger) |\phi(t)\rangle = \sum_n \delta p_n, \quad (8)$$

com

$$\delta p_n = \delta t \langle\phi(t)| (C_n^\dagger C_n) |\phi(t)\rangle \geq 0. \quad (9)$$

Para manter  $\delta t$  pequeno, precisamos que  $\delta p \ll 1$ . Temos que cada  $\delta p_n$  é a amplitude associada ao operador  $C_n$ , que, sendo responsável pelo salto no método, pode ser considerado como um operador de salto. Então, o valor que divide os eventos através de  $\epsilon$  é  $\delta p$ , que é a amplitude de probabilidade somada de ocorrência dos possíveis saltos rotulados por  $n$ . Ou seja, se  $\epsilon > \delta p$ , não ocorrem saltos e a função de onda evolui na forma mostrada acima. Portanto, a função de onda no próximo passo, normalizada, torna-se

$$|\phi(t + \delta t)\rangle = \frac{\left(1 - \frac{iH\delta t}{\hbar}\right) |\phi(t)\rangle}{(1 - \delta p)}. \quad (10)$$

Se  $\epsilon < \delta p$ , um salto ocorre nesse passo temporal. Observe que, por  $\delta p \ll 1$ , a probabilidade de ocorrência de um salto é muito baixa, então o sistema evolui por diversos passos entre a ocorrência de saltos (em muitas ocasiões é pertinente calcular o tempo de espera entre saltos). Neste caso, também precisamos determinar qual salto ocorre; cada salto possui uma probabilidade  $\delta p_n/\delta p$  de ocorrer, então escolhemos aleatoriamente segundo esta proporção. Assim, dado que o  $n$ -ésimo salto ocorre, temos a função de onda atualizada por

$$|\phi(t + \delta t)\rangle = \left(\frac{\delta p_n}{\delta p}\right)^{1/2} C_n |\phi(t)\rangle. \quad (11)$$

O fator de normalização vem da relação de definição de  $\delta p_n$  acima. Se há somente um possível salto para o sistema, como no caso da emissão espontânea de dois níveis (neste caso, existe somente um operador  $C$ ), não há necessidade de computar este último passo que escolhe aleatoriamente o salto a ser feito. É bom lembrar também que cada  $\delta p_n$  depende de  $t$ , então devem ser recalculados a cada iteração.

Caracterizamos as duas formas possíveis da função de onda evoluir em um passo temporal, com ou sem salto; o restante do procedimento é iterar repetidas vezes os passos acima até evoluir o sistema durante o intervalo necessário, produzindo assim a dinâmica temporal da função de onda do sistema. No fim, teremos uma trajetória amostrada para a função de onda, que possui natureza estocástica. O resultado do método vem de se calcular os valores esperados de observáveis para cada dinâmica amostrada e então tomar a média para um número suficiente de amostras. Ou seja, se rotularmos cada função

de onda amostrada por  $i$ , de forma que na  $i$ -ésima dinâmica construímos a trajetória da função  $|\phi^i(t)\rangle$ , podemos calcular o valor esperado de um observável por

$$\langle A(t) \rangle^i = \langle \phi^i(t) | A(t) | \phi^i(t) \rangle. \quad (12)$$

O valor esperado real desse observável aproximado pelo método é obtido pela média por todas as trajetórias rotuladas por  $i$ . Se levantamos  $N$  trajetórias para a função de onda, temos

$$\langle A(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle A(t) \rangle^i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \phi^i(t) | A(t) | \phi^i(t) \rangle. \quad (13)$$

Um bom valor de  $N$  para que a aproximação seja boa o suficiente depende do observável. O erro na determinação de  $\langle A(t) \rangle$  é dado por

$$\delta A = \sqrt{\frac{\langle A^2 \rangle - (\langle A \rangle)^2}{N}}. \quad (14)$$

Aqui também fazemos a correspondência com o tratamento usual da equação mestra para o operador de densidade. O valor médio do observável obtido pela média das  $N$  trajetórias da função de onda converge para aquele obtido acima através do operador de densidade à medida que  $N$  cresce, ou seja, os dois valores diferem apenas por  $\delta A$ . Além disso, temos a seguinte correspondência para o operador de densidade que se torna exata à medida que  $N$  cresce (veja a figura 4):

$$\rho_S(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\phi^i(t)\rangle \langle \phi^i(t)|. \quad (15)$$

Dado que haja essa equivalência para um instante inicial, ela existe para todos os instantes posteriores.

Consideramos agora duas razões para a aplicação do método MCWF. A primeira diz respeito à viabilidade computacional, uma vez que o tratamento com o operador de densidade envolve  $K^2$  componentes enquanto a respectiva função de onda possui apenas  $K$ . Em algum sentido, o método quebra a simulação de  $K^2$  componentes em  $N$  simulações de  $K$  componentes.

Outra razão é o ganho em interpretação física, pois o método explicita a ocorrência de saltos quânticos e produz um ensemble de trajetórias individuais, ao invés de trabalhar com uma trajetória que compacta em si um ensemble de estados (como é o caso do operador de densidade). Se imaginarmos o tratamento da emissão espontânea em dois níveis, o método MCFW simula diversas trajetórias do decaimento dos átomos individualmente, e pode determinar as dinâmicas individuais entre os estados excitado e fundamental. O método produz resultados que mostram que um átomo de dois níveis começando em um estado de superposição entre os estados excitado e fundamental sofre uma rotação da função de onda (pelo termo não hermitiano da hamiltoniana) que faz com que o estado fundamental vá aumentando em proporção até que assintoticamente o átomo caia sem emitir; tudo isso caso não ocorram saltos no processo. Ou seja, existe uma probabilidade

de que o sistema decaia sem que ocorram saltos quânticos. Isso está de acordo com a observação, pois um sistema assim que seja preparado com amplitude de excitação mínima deve ter uma alta probabilidade de não emitir ao longo do tempo (o contrário seria conseguirmos esperar até que o átomo emita, com certeza, mesmo que essa amplitude seja infinitesimal).

Observamos brevemente que, neste caso do sistema para emissão espontânea entre dois níveis, existe apenas um operador de salto, que é dado por  $C = \sqrt{\Gamma} \sigma^- = \sqrt{\Gamma} |g\rangle \langle e|$  (esses estados sendo o excitado e o fundamental).

O salto quântico nesse cenário pode ser interpretado como a projeção da função de onda associada a uma medida quântica, o reservatório neste caso sendo o próprio instrumento de medida. Assim, a ocorrência do salto se torna equivalente à detecção de um fóton, por exemplo, em um aparato de medida. É dessa forma que o método MCWF pode ser entendido como um tratamento da observação macroscópica do salto quântico, descrita na primeira seção.

O método também pode ser aplicado em diversos contextos específicos, como por exemplo sistemas em contato com reservatórios de temperatura, emissão espontânea com degeneração por efeito Zeeman, esfriamento Doppler, movimento browniano, etc.

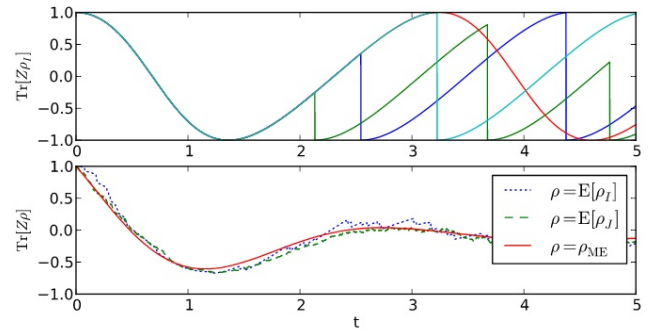


Figura 4: Simulação de um átomo de dois níveis acoplado a um campo eletromagnético e sujeito a oscilações amortecidas de Rabi. O primeiro gráfico mostra diferentes trajetórias do método MCWF e o segundo gráfico mostra a comparação entre a média de apenas 32 trajetórias (em azul) e a simulação direta da equação mestra (em vermelho).

## REFERÊNCIAS

- [1] Bell, John S. "Are there quantum jumps?." *Quantum Mechanics, High Energy Physics And Accelerators: Selected Papers Of John S Bell (With Commentary)*. 1995.
- [2] Itano, Wayne M., James C. Bergquist, and David J. Wineland *Early observations of macroscopic quantum jumps in single atoms*. *International Journal of Mass Spectrometry* 377 (2015): 403-409.
- [3] H. Dehmelt, *Proposed  $10^{14} \delta v/v < v$  laser fluorescence spectroscopy on  $Tl^+$  mono-ion oscillator II*. *Bull. Am. Phys. Soc.* 20(1975)60.
- [4] Scully, Marlan O., and M. Suhail Zubairy *Quantum optics*. 1999.
- [5] Mølmer, Klaus, Yvan Castin, and Jean Dalibard *Monte Carlo wave-function method in quantum optics*. *JOSA B* 10.3 (1993): 524-538.