

Átomos de Rydberg interactuando dentro de una cavidad óptica

Andrea Fernanda Rodríguez Rojas

«Universidad Nacional Autónoma de México»

Índice general

I	PREPARACIÓN TEÓRICA	3
1	Átomo cuántico interactuando con luz clásica	4
1.1.	Átomo libre	4
1.2.	Átomo en presencia de campo externo (Gerry-Knight)	4
1.3.	Átomo de 2 niveles (Orszag)	6
1.4.	Átomo de 3 niveles (Scully-Zubary) (sigue pendiente)	9
2	Teoría cuántica de la interacción átomo-campo	11
2.1.	Oscilador armónico cuántico (Cohen)	11
2.2.	Cuantización del campo externo	12
II	SIMULACIONES NUMÉRICAS	13
1	Introducción	14
1.1.	Operador densidad (Cohen)	14
2	Átomo de 2 niveles	16
	BIBLIOGRAFÍA	17

Parte I

PREPARACIÓN TEÓRICA

1

ÁTOMO CUÁNTICO INTERACTUANDO CON LUZ CLÁSICA

1.1. ÁTOMO LIBRE

Partimos del sistema más sencillo al suponer un átomo en ausencia de campos externos, cuyo Hamiltoniano está dado por

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 + V(r) \quad (1.1)$$

donde $V(r)$ es la interacción coulombiana del electrón con el núcleo, y en la representación de espacio $\hat{\mathbf{P}} = -i\nabla$ y $r = |\mathbf{r}|$. Además, como se trata de un átomo libre, podemos describir el sistema mediante la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi \quad (1.2)$$

cuyas soluciones son los estados estacionarios

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |n\rangle \quad (1.3)$$

o, expresados en la representación de espacio

$$\langle r | \Psi \rangle = \Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \quad (1.4)$$

donde $\langle r | n \rangle = \psi_n(\mathbf{r})$ es la parte espacial y representa a un átomo que se encuentra en un nivel de energía bien definido, llamada función de onda del estado $|n\rangle$, $e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$ es un factor de fase y E_n la energía del estado $|n\rangle$.

$|n\rangle$, $\psi_n(\mathbf{r})$ y E_n son los eigenestados, las eigenfunciones y los eigenvalores de H_0 , respectivamente

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 \psi_n(\mathbf{r}) &= E_n \psi_n(\mathbf{r}) \\ \hat{H}_0 |n\rangle &= E_n |n\rangle \end{aligned} \quad (1.5)$$

Y además las funciones de onda $\psi_n(\mathbf{r})$ y los estados $|n\rangle$ cumplen con la condición de ortonormalidad

$$\int d^3\mathbf{r} \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}) = \langle m | n \rangle = \delta_{nm} \quad (1.6)$$

por lo que son una base en el espacio de Hilbert.

1.2. ÁTOMO EN PRESENCIA DE CAMPO EXTERNO (GERRY-KNIGHT)

En presencia de un campo electromagnético externo, el Hamiltoniano de una partícula con carga e y masa m está dado por

$$\hat{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m} [\hat{\mathbf{P}} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2 - e\Phi(\mathbf{r}, t) + V(r) \quad (1.7)$$

donde $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ y $\Phi(\mathbf{r}, t)$ son los potenciales vectorial y escalar, respectivamente, tales que definen a los campos como

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= -\nabla\Phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1.8)$$

que son invariantes ante las transformaciones de gauge

$$\begin{aligned} \Phi'(\mathbf{r}, t) &= \Phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial\chi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \\ \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla\chi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1.9)$$

donde $\chi(\mathbf{r}, t)$ es una función escalar arbitraria. Por lo tanto, podemos definir el Hamiltoniano

$$\hat{H}' = \frac{1}{2m} [\hat{\mathbf{P}} + e\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t)]^2 - e\Phi'(\mathbf{r}, t) + V(r) \quad (1.10)$$

que deja invariante el comportamiento del átomo en el campo.

Consideremos ahora una transformación de gauge muy particular, llamada transformación de Coulomb, con la cual se cumple $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ y $\Phi = 0$. Con esto hemos establecido que el potencial vectorial \mathbf{A} es puramente transversal (pues su divergencia es cero), y además podemos expresar \hat{H}' como

$$\hat{H}' = \frac{1}{2m} [\hat{\mathbf{P}} + e(\mathbf{A} + \nabla\chi)]^2 + e\frac{\partial\chi}{\partial t} + V(r) \quad (1.11)$$

Partiendo ahora de la ecuación de Ampere-Maxwell

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (1.12)$$

sustituimos \mathbf{B} y \mathbf{E} por sus expresiones en (1.8), y aplicamos la transformación de Coulomb

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) &= \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \left(-\nabla\Phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} \right) \\ \Rightarrow \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} &= \mu_0 \mathbf{J} - \mu_0 \varepsilon_0 \nabla \left(\frac{\partial\Phi}{\partial t} \right) - \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} \\ \Rightarrow \nabla^2 \mathbf{A} - \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} &= -\mu_0 \mathbf{J} \end{aligned} \quad (1.13)$$

Como estamos suponiendo que no hay fuentes cerca, entonces no hay densidad de corriente $\mathbf{J} = 0$, y lo que queda es la ecuación de onda homogénea

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.14)$$

cuya solución general es $\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + \mathbf{A}_0^* e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$.

Luego, de la expresión anterior consideremos a \mathbf{k} , el vector de propagación de la onda con longitud λ , cuya magnitud es $|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$; en óptica, λ tiene típicamente valores

de orden 10^{-7}m (la luz visible se encuentra entre 380-750 nm) y $|\mathbf{r}|$ tiene dimensiones atómicas, de orden 10^{-10}m , entonces $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \ll 1$ (aproximación dipolar), provocando que el potencial vectorial sea uniforme en el espacio alrededor del átomo, $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \approx \mathbf{A}(t)$.

Si ahora consideramos otra transformación de gauge, dada por $\chi(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{r}$, entonces

$$\begin{aligned}\nabla\chi(\mathbf{r}, t) &= -\mathbf{A}(t) \\ \frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{r}, t) &= -\mathbf{r} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t)\end{aligned}\quad (1.15)$$

por lo tanto

$$\hat{H}' = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(r) + e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t) \quad (1.16)$$

Y finalmente, después de considerar la expresión del momento dipolar $\mathbf{d} = -e\mathbf{r}$, causado por la separación entre el electrón y el núcleo del átomo, obtenemos el siguiente Hamiltoniano

$$\hat{H}' = \hat{H}_0 - \hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}(t) \quad (1.17)$$

En general, para una representación no especificada, el momento dipolar es un operador $\hat{\mathbf{d}}$. Para simplificar la notación, realizaremos un cambio de etiqueta a \hat{H}' y lo llamaremos simplemente \hat{H} , y al término $-\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}(t)$ le vamos a asociar el Hamiltoniano de interacción denotado por $\hat{H}_I(t)$.

$$\hat{H}_I(t) = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}(t) \quad (1.18)$$

Así, la expresión (1.17) queda reescrita como

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I(t) \quad (1.19)$$

1.3. ÁTOMO DE 2 NIVELES (ORSZAG)

El planteamiento y desarrollo del contenido de esta sección fue tomado del capítulo 2 del libro *Quantum optics: including noise reduction, trapped ions, quantum trajectories, and decoherence* (Orszag, 2008).

Hasta ahora no hemos hablado nada acerca de la naturaleza del campo electromagnético, si es considerado clásico o cuántico, y la expresión (1.17) es válida para ambos casos. En el modelo semiclásico de interacción, es decir aquel que considera al campo electromagnético clásico con un átomo cuántico, queremos explorar las consecuencias de que la frecuencia del campo casi coincida con la diferencia de energía entre un par de niveles atómicos (fenómeno de cuasirresonancia), al que llamaremos **átomo de 2 niveles**.

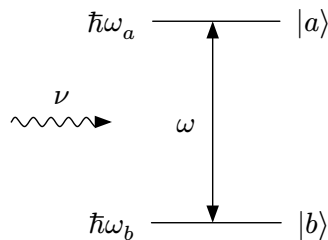


Figura 1.1

Diagrama de la interacción de un átomo de dos niveles con un campo eléctrico de frecuencia ν .

El átomo de 2 niveles se caracteriza por un estado base $|b\rangle$ y el estado excitado $|a\rangle$, con energías $\hbar\omega_b$ y $\hbar\omega_a$, respectivamente. Exploraremos el caso donde el átomo interactúa con un campo eléctrico dado por una onda senosoidal

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \cos(\nu t) \quad (1.20)$$

siendo ν la frecuencia de la radiación del campo y $\mathbf{E}_0 = \hat{\mathbf{e}}E_0$, donde $\hat{\mathbf{e}}$ es el vector unitario de polarización del campo.

Para simplificar la derivación, procederemos utilizando los estados sin considerar ninguna representación. Tomamos el Hamiltoniano (1.19) para la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo de la interacción

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = [\hat{H}_0 + \hat{H}_I(t)] |\Psi(t)\rangle \quad (1.21)$$

y usamos las soluciones (1.3) de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo del átomo libre como base conveniente para descomponer a la función de onda de la interacción

$$|\Psi(t)\rangle = C_a(t)e^{-i\omega_a t}|a\rangle + C_b(t)e^{-i\omega_b t}|b\rangle \quad (1.22)$$

con $\omega_i = \frac{E_i}{\hbar}$. Al sustituir (1.22) en (1.21) obtenemos del lado izquierdo

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle &= i\hbar \frac{d}{dt} (C_a(t)e^{-i\omega_a t}|a\rangle + C_b(t)e^{-i\omega_b t}|b\rangle) \\ &= i\hbar \left[\left(\frac{dC_a}{dt} - i\omega_a C_a \right) e^{-i\omega_a t}|a\rangle + \left(\frac{dC_b}{dt} - i\omega_b C_b \right) e^{-i\omega_b t}|b\rangle \right] \end{aligned} \quad (1.23)$$

Y del lado derecho, como \hat{H}_0 es un operador lineal que actúa solamente sobre los estados $|n\rangle$ y no sobre funciones de tiempo, entonces no afecta a los términos $C_n(t)$ ni $e^{-i\omega_n t}$. Además, $|a\rangle$ y $|b\rangle$ cumplen con la ecuación de eigenvalores de \hat{H}_0 (1.5), entonces

$$\begin{aligned} &[\hat{H}_0 + \hat{H}_I(t)] |\Psi(t)\rangle \\ &= \hat{H}_0 (C_a e^{-i\omega_a t}|a\rangle + C_b e^{-i\omega_b t}|b\rangle) + \hat{H}_I(t) (C_a e^{-i\omega_a t}|a\rangle + C_b e^{-i\omega_b t}|b\rangle) \\ &= E_a C_a e^{-i\omega_a t}|a\rangle + E_b C_b e^{-i\omega_b t}|b\rangle + \hat{H}_I(t) (C_a e^{-i\omega_a t}|a\rangle + C_b e^{-i\omega_b t}|b\rangle) \end{aligned} \quad (1.24)$$

Considerando que $E_n = \hbar\omega_n$, el término $i\hbar(-i\omega_n C_n)$ de (1.23) se convierte en $\hbar\omega_n C_n = E_n C_n$ y se cancela con los dos primeros términos de (1.24), dejándonos con

$$i\hbar \left(\frac{dC_a}{dt} e^{-i\omega_a t}|a\rangle + \frac{dC_b}{dt} e^{-i\omega_b t}|b\rangle \right) = \hat{H}_I(t) (C_a e^{-i\omega_a t}|a\rangle + C_b e^{-i\omega_b t}|b\rangle) \quad (1.25)$$

Ahora bien, si proyectamos sobre el estado $|a\rangle$, es decir, multiplicamos toda la ecuación por $\langle a|$, tenemos

$$i\hbar \frac{dC_a}{dt} e^{-i\omega_a t} = C_a e^{-i\omega_a t} \langle a|\hat{H}_I(t)|a\rangle + C_b e^{-i\omega_b t} \langle a|\hat{H}_I(t)|b\rangle \quad (1.26)$$

Recordemos que

$$\hat{H}_I(t) = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}(t) = -eE_0(\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{e}}) \cos \nu t \quad (1.27)$$

y, además, por paridad de las funciones de onda, el elemento diagonal $\langle a | \hat{H}_I(t) | a \rangle$ es cero. Por lo tanto

$$i\hbar \frac{dC_a}{dt} e^{-i\omega_a t} = C_b e^{-i\omega_b t} \langle a | \hat{H}_I(t) | b \rangle \quad (1.28)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow i\hbar \frac{dC_a}{dt} &= C_b e^{i\omega_a t} e^{-i\omega_b t} \langle a | \hat{H}_I(t) | b \rangle = C_b e^{-(\omega_a - \omega_b)t} \langle a | \hat{H}_I(t) | b \rangle \\ &= C_b e^{-i\omega t} (-E_0 \cos \nu t) e \langle a | \mathbf{r} | b \rangle \cdot \hat{\mathbf{e}} \\ &\equiv C_b e^{i\nu t} (-d_{ab} E_0 \cos \nu t) \end{aligned} \quad (1.29)$$

Donde definimos el elemento de matriz dipolar $d_{ab} = e \langle a | \mathbf{r} | b \rangle \cdot \hat{\mathbf{e}} = d_{ba}^*$. Finalmente, aplicamos la expansión del coseno $\cos \nu t = \frac{e^{i\nu t} + e^{-i\nu t}}{2}$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC_a}{dt} &= -\frac{d_{ab} E_0}{2} C_b(t) e^{-i\omega t} (e^{i\nu t} + e^{-i\nu t}) \\ &= -\frac{d_{ab} E_0}{2} C_b(t) [e^{i(\omega+\nu)t} + e^{i(\omega-\nu)t}] \end{aligned} \quad (1.30)$$

Realizando un procedimiento análogo en donde proyectamos la ecuación (1.25) sobre el estado $|b\rangle$, obtenemos el siguiente par de ecuaciones diferenciales acopladas

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC_b}{dt} &= -\frac{d_{ab} E_0}{2} C_a(t) [e^{-i(\omega+\nu)t} + e^{-i(\omega-\nu)t}] \\ i\hbar \frac{dC_a}{dt} &= -\frac{d_{ab} E_0}{2} C_b(t) [e^{i(\omega+\nu)t} + e^{i(\omega-\nu)t}] \end{aligned} \quad (1.31)$$

en donde aparecen términos que oscilan muy rápido (a frecuencias $\omega + \nu$) y términos que oscilan lentamente (a frecuencias $\omega - \nu$). La **Aproximación de Onda Rotante (RWA)** consiste en ignorar los términos que oscilan rápidamente, ya que su efecto promedio sobre largos periodos de tiempo es casi nulo, y nos quedamos solo con los términos de oscilación lenta.

Bajo esta aproximación, definimos

$$\begin{aligned} c_b(t) &= \frac{C_b(t)}{2} e^{-i\Delta t} \\ c_a(t) &= \frac{C_a(t)}{2} e^{i\Delta t} \end{aligned} \quad (1.32)$$

donde

$$\Delta \equiv (\omega_a - \omega_b) - \nu = \omega - \nu \quad (1.33)$$

es la **desintonía** entre la diferencia de energía entre los niveles, y la frecuencia de radiación del campo; y la **Frecuencia de Rabi**,

$$\Omega_R = \left| \frac{-d_{ab} E_0}{2} \right| \quad (1.34)$$

obteniendo

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}c_b(t) &= -\frac{i}{2}[-\Delta c_a(t) + \Omega_R c_a(t)] \\ \frac{d}{dt}c_a(t) &= -\frac{i}{2}[\Delta c_a(t) + \Omega_R c_b(t)]\end{aligned}\quad (1.35)$$

Podemos escribir (1.35) en su forma matricial

$$\frac{d}{dt}\begin{bmatrix} c_b(t) \\ c_a(t) \end{bmatrix} = -\frac{i}{2}\begin{bmatrix} -\Delta & \Omega_R \\ \Omega_R^* & \Delta \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_b(t) \\ c_a(t) \end{bmatrix}\quad (1.36)$$

cuyos eigenvalores de (1.36) son $\mp\Omega$, donde

$$\Omega = \sqrt{\Delta^2 + \Omega_R^2}\quad (1.37)$$

es la **Frecuencia de Rabi generalizada**, la cual notemos que incluye el efecto de desintonía Δ . La solución del sistema (1.36) es

$$\begin{bmatrix} c_b(t) \\ c_a(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\frac{\Omega t}{2}) + \frac{i\Delta}{\Omega} \sin(\frac{\Omega t}{2}) & -\frac{i(E_0 d_{ba})}{\Omega \hbar} \sin(\frac{\Omega t}{2}) \\ -\frac{i(E_0 d_{ba})}{\Omega \hbar} \sin(\frac{\Omega t}{2}) & \cos(\frac{\Omega t}{2}) - \frac{i\Delta}{\Omega} \sin(\frac{\Omega t}{2}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_b(0) \\ c_a(0) \end{bmatrix}\quad (1.38)$$

Y si establecemos las condiciones iniciales como $c_b(0) = 1$, $c_a(0) = 0$ (esto es, el sistema se encuentra inicialmente en el estado base), la probabilidad de transición entre estados, de $|b\rangle$ a $|a\rangle$ es

$$|c_a(t)|^2 = \left(\frac{\Delta^2 - \Omega_R^2}{\Omega^2} \right) \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)\quad (1.39)$$

1.4. ÁTOMO DE 3 NIVELES (SCULLY-ZUBARY) (SIGUE PENDIENTE)

Para estudiar el caso del átomo de 3 niveles, obtendremos el Hamiltoniano RWA como una generalización del Hamiltoniano del átomo de 2 niveles interactuando con un campo clásico a una sola frecuencia, presentado en la sección anterior, y lo aplicaremos para analizar un átomo de 3 niveles interactuando con un campo clásico a dos frecuencias distintas, considerando sus tres configuraciones posibles: cascada, lambda (Λ) y Vee (V).

Para ello, tomemos el Hamiltoniano de la Sección 1.2.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I(t)\quad (1.40)$$

Usando la relación de completez $|a\rangle\langle a| + |b\rangle\langle b| = \mathbb{1}$, escribimos \hat{H}_0 como

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= (|a\rangle\langle a| + |b\rangle\langle b|)\hat{H}_0(|a\rangle\langle a| + |b\rangle\langle b|) \\ &= \hbar\omega_a|a\rangle\langle a| + \hbar\omega_b|b\rangle\langle b|\end{aligned}\quad (1.41)$$

donde usamos la propiedad $\hat{H}_0|a\rangle = \hbar\omega_a|a\rangle$ y $\hat{H}_0|b\rangle = \hbar\omega_b|b\rangle$. De forma similar, escribimos a $\hat{H}_I(t)$ como

$$\begin{aligned}\hat{H}_I(t) &= -e(|a\rangle\langle a| + |b\rangle\langle b|)\mathbf{r}(|a\rangle\langle a| + |b\rangle\langle b|)\mathbf{E}(t) \\ &= -(d_{ab}|a\rangle\langle b| + d_{ba}|b\rangle\langle a|)\mathbf{E}(t)\end{aligned}\quad (1.42)$$

1.4.1. *Lambda* Λ

En el átomo de 3 niveles en configuración Lambda, tenemos dos estados base, $|b\rangle$ y $|c\rangle$, y un estado excitado $|a\rangle$. Este átomo presenta superposición coherente, es decir, puede existir en un estado que es una superposición de sus niveles base

$$|\Psi_{\text{coherente}}\rangle = c_b|b\rangle + c_c|c\rangle \quad (1.43)$$

y donde la relación de fase entre los coeficientes c_b y c_c está bien definida y se mantiene estable en el tiempo. Esto quiere decir que es un único estado cuántico donde el átomo está, en cierto sentido, en ambos estados a la vez y con una fase relativa fija.

Ahora tomemos nuestro átomo Λ y consideremos dos campos con respectivas frecuencias ν_1 y ν_2

2

TEORÍA CUÁNTICA DE LA INTERACCIÓN ÁTOMO-CAMPO

En el tratamiento semiclásico de la interacción luz-materia, hemos modelado al átomo como un sistema cuántico discreto, pero hemos tratado al campo electromagnético como una onda clásica externa $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \cos(\nu t)$. Si bien este enfoque nos ha permitido observar resultados como las oscilaciones de Rabi, no es capaz de explicar fenómenos como la emisión espontánea, donde un átomo excitado decae emitiendo un fotón incluso en ausencia de un campo externo.

Para ello, nuestro siguiente paso es la cuantización del campo externo. Discutiremos la interacción de un campo de radiación cuántica con el sistema del átomo de dos niveles, descrito por el Hamiltoniano con aproximación dipolar, expresado en la ecuación (1.19).

2.1. OSCILADOR ARMÓNICO CUÁNTICO (COHEN)

Como la idea central de la cuantización del campo electromagnético es que en cada modo éste se comporta exactamente como un oscilador armónico cuántico independiente, comenzaremos con explicar algunos conceptos importantes de este sistema.

Partimos del Hamiltoniano de un oscilador armónico clásico unidimensional de masa m y frecuencia ω ,

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (2.1)$$

que puede ser cuantizado simplemente *convirtiendo* la posición x y momento p en operadores hermitianos, \hat{X}' y \hat{P}' , cuya relación de conmutación es $[\hat{X}', \hat{P}'] = i\hbar$. Así, el Hamiltoniano cuántico se convierte en

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}'^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{X}'^2 \quad (2.2)$$

o, escrito de otra forma,

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad (2.3)$$

donde $\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{X}'$ y $\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{P}'$ son los operadores adimensionales asociados. Como \hat{H} no depende del tiempo, la solución se reduce a simplemente resolver la ecuación de eigenvalores $\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$.

Para resolverla, se introducen los operadores (no hermitianos) \hat{a} y \hat{a}^\dagger , como combinaciones lineales de \hat{X} y \hat{P}

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) \\ \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) \end{aligned} \quad (2.4)$$

cuyo conmutador es $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ y además se satisface que $\hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - 1)$, por lo tanto, el Hamiltoniano queda escrito como

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right) \quad (2.5)$$

Esta forma notablemente simple del Hamiltoniano nos va a permitir encontrar el espectro de energía. Si ahora definimos el operador hermitiano $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$, entonces

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) \quad (2.6)$$

Se puede demostrar que los eigenestados del operador \hat{N} son los estados de Fock denotados por $|n\rangle$, y sus eigenvalores son los enteros no negativos $n = 0, 1, 2, \dots$. Por lo tanto, los niveles de energía permitidos del oscilador armónico cuántico son

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (2.7)$$

y la separación entre niveles es simplemente $\Delta E = \hbar\omega$. Con esto, hemos expresado que en la mecánica cuántica, la energía del oscilador armónico está cuantizado y no puede tomar valores arbitrarios.

Una propiedad importante de los operadores \hat{a}^\dagger y \hat{a} , es que actúan como una *escalera*, esto es, conectan los niveles de energía mediante las propiedades

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ \hat{a} |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle \end{aligned} \quad (2.8)$$

y es por eso que \hat{a}^\dagger recibe el nombre de operador **creación** y \hat{a} de operador **aniquilación**, pues su acción sobre un eigenestado de \hat{N} hace a un cuanto de energía $\hbar\omega$ aparecer o desaparecer.

2.2. CUANTIZACIÓN DEL CAMPO EXTERNO

Parte II

SIMULACIONES NUMÉRICAS

1

INTRODUCCIÓN

1.1. OPERADOR DENSIDAD (COHEN)

Para poder proceder con las simulaciones numéricas tomaremos algunas consideraciones previas. Si consideramos un sistema cuyo vector de estado en el instante t es

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (1.1)$$

los coeficientes $c_n(t)$ satisfacen

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = 1 \quad (1.2)$$

lo cual implica que $\Psi(t)$ está normalizada.

Sea \hat{H} en Hamiltoniano del sistema, que es un observable, sus elementos de matriz están dados por

$$\langle m | \hat{H} | n \rangle = H_{mn} \quad (1.3)$$

y el valor promedio de \hat{H} en el instante t es

$$\langle \hat{H} \rangle (t) = \langle \Psi(t) | \hat{H} | \Psi(t) \rangle = \sum_{m,n} c_m^*(t) c_n(t) H_{mn} \quad (1.4)$$

lo cual introduce el concepto del operador densidad, definido como

$$\rho(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| \quad (1.5)$$

cuya matriz, llamada **matriz de densidad**, está representada en la base $\{|n\rangle\}$ y sus elementos son

$$\rho_{mn}(t) = \langle m | \rho(t) | n \rangle = c_m^*(t) c_n(t) \quad (1.6)$$

Con esta nueva definición, podemos expresar las ecuaciones (1.2) y (1.4) en términos del operador $\rho(t)$, tales que

$$\begin{aligned} \sum_n |c_n(t)|^2 &= \sum_n \rho_{nn}(t) = \text{Tr } \rho(t) = 1 \\ \langle \hat{H} \rangle (t) &= \text{Tr}(\rho(t) \hat{H}) \end{aligned} \quad (1.7)$$

y, finalmente, la evolución temporal del operador $\rho(t)$ conocida como ecuación de Von Neumann, es

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \rho(t)] \quad (1.8)$$

Por lo tanto, para determinar la evolución temporal de $\rho(t)$, basta con conocer la evolución de sus elementos de matriz expresados en (1.6), lo que nos lleva a trabajar con un sistema de $(2n^2)^1$ ecuaciones diferenciales acopladas.

$$\frac{d}{dt}\rho_{mn}(t) = \langle m | [\hat{H}, \rho(t)] | n \rangle \quad (1.9)$$

¹En general, tendríamos n^2 ecuaciones que se duplican a $2n^2$ al considerar números complejos.

2

ÁTOMO DE 2 NIVELES

Teniendo en cuenta estas consideraciones, para poder simular las amplitudes de probabilidad $|c_n(t)|^2$ del átomo de 2 niveles (y en general cualquier sistema cuántico) debemos expresar su Hamiltoniano en términos de la base $\{|n\rangle\}$.

Tomaremos la matriz Hamiltoniana de (1.36) y, para realizar el código escrito en Python, representaremos al estado base como $|0\rangle$ y el estado excitado $|1\rangle$. Así, el Hamiltoniano queda reescrito como

```
rabi = 1/2 #frecuencia de Rabi
delta = 1 #detuning
base = [Ket(0), Ket(1)]
rho = Operator("rho")

H = h/2 * (-delta*Ket(0)*Bra(0) + -rabi*Ket(0)*Bra(1) + -rabi*Ket(1)*Bra(0)
+ delta*Ket(1)*Bra(1))
```


Parte 2.2

BIBLIOGRAFÍA

- [1] M. Orszag, *Quantum Optics: Including Noise Reduction, Trapped Ions, Quantum Trajectories, and Decoherence*, 2nd ed. Berlin ; New York: Springer, 2008.