

# Ecuaciones Ópticas de Bloch

En este capítulo daremos un paso más en el estudio de la interacción de la radiación electromagnética con la materia. Veremos cómo, en función de distintos parámetros, esta interacción puede darse un régimen dispersivo o coherente. Estos dos extremos ya los estudiamos previamente por separado cuando vimos la regla de oro de Fermi en el capítulo 20 y cuando vimos las oscilaciones de Rabi en el capítulo 7.

La pregunta que resolvemos en este capítulo cómo integrar estos dos regímenes en un formalismo que nos permita estudiar la frontera entre ellos y así describir más precisamente la interacción de la luz con la materia. Para hacer esto estudiaremos al átomo como un sistema cuántico abierto, que describiremos a través de una matriz densidad. Este tratamiento nos permitirá modelar con precisión varias situaciones que incluyen la forma en la que las oscilaciones de Rabi pierden coherencia, las distribución poblaciones atómicas y tasas de dispersión de luz por átomos así como el espectro de absorción de un gas en función de la potencia del campo que lo excita.

Los resultados que obtendremos fueron obtenidos por primera por Félix Bloch, quién estudiando la precesión de spines nucleares en campos externos desarrollo un conjunto ecuaciones que hoy conocemos como ecuaciones ópticas del Bloch (OBE).

## 22.1. Repaso matriz densidad

Comenzamos haciendo un repaso de la forma de la matriz densidad para un sistema de dimensión 2 representada por los estados  $\mathcal{B} = \{|0\rangle, |1\rangle\}$  para distintos casos. Esto nos permitirá genera un poco intuición que luego utilizaremos para escribir las ecuaciones de Bloch e interpretar los resultados.

Consideremos primero los dos estados puros  $|\psi\rangle = |0\rangle$  y  $|\psi\rangle = |+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ . Sus matrices densidad son escritas en forma matricial y de “ket-bras” respectivamente:

$$|\psi\rangle = |0\rangle \leftrightarrow \rho = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \equiv |0\rangle\langle 0| \quad (22.1)$$

$$|\psi\rangle = |+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \leftrightarrow \rho = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \equiv \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1|) \quad (22.2)$$

Estas matrices cumplen en ambos casos con que  $\text{Tr}(\rho) = \text{Tr}(\rho^2) = 1$ . Es decir, las probabilidades están normalizadas y tienen un autovalor que vale 1 y otro nulo. Esto último nos indica que para los estados puros existe una medida en la que podemos saber el resultado con certeza.

Consideremos en cambio un estado mixto. Imaginemos que tenemos un sistema que es preparado aleatoriamente en el estado  $|0\rangle$  o  $|1\rangle$  con igual probabilidad. Nos referimos a la mezcla estadística de estos estados, no a la superposición. Este estado se representa por la matriz densidad

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \equiv \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|). \quad (22.3)$$

En este caso seguimos cumpliendo con la condición de normalización  $\text{Tr}(\rho) = 1$ , pero ya no con la de pureza ya que  $\text{Tr}(\rho^2) = 1/2$ .

En el caso más general sabemos que debemos pedirle a la matriz densidad dos condiciones para que las probabilidades que de ella se deriven estén normalizadas y sean positivas. Estas dos condiciones equivalen respectivamente a pedir que  $\text{Tr}(\rho) = 1$  y que  $\rho$  sea semi-definida positiva. La segunda condición equivale a pedir que todos los autovalores sean mayores o igual a cero, o más sencillo, para dimensión 2, que  $\text{Tr}(\rho^2) \leq 1$ .

Resultará útil escribir estas condiciones para una matriz densidad de la forma más general. Para un espacio de dimensión dos escribimos:

$$\rho = \begin{bmatrix} \rho_{00} & \rho_{01} \\ \rho_{10} & \rho_{11} \end{bmatrix}. \quad (22.4)$$

De dónde, obtenemos las siguientes restricciones sobre los coeficientes:

$$\text{Tr}(\rho) = 1 \longrightarrow \rho_{00} + \rho_{11} = 1 \quad (22.5)$$

$$\text{Tr}(\rho^2) \leq 1 \longrightarrow \rho_{01}\rho_{10} \leq \rho_{00}\rho_{11}. \quad (22.6)$$

Interpretamos el segundo término de la siguiente manera. El producto de los elementos fuera de la diagonal, que llamaremos “coherencias” tiene que ser menor al producto de los términos en la diagonal, que llamaremos “poblaciones”. En este sentido, el estado puro representado por la ecuación 22.2 tiene coherencias mientras que el estado mixto de la ecuación 22.3 no tiene. Los lectores atentos notarán que, bajo esta definición, el estado puro correspondiente al vector  $|0\rangle$  de la ecuación 22.1 no “tiene coherencias”. Esto tal vez resulte raro, ya que es un estado puro

y escribiéndolo en otra base “tendría coherencias”. Es decir, la definición de coherencia depende de la base elegida. Hay un trasfondo físico a esta elección. En general la base predilecta será una en la que la interacción del entorno con el sistema sea “especial”. Por ejemplo, una base será especial porque un campo fija una base de cuantización para la energía, o porque el sistema decae radiativamente al estado  $|0\rangle$  o porque algún campo no uniforme y agrega fases aleatorias a algún de los autoestados o porque interactúa preferentemente respetando alguna simetría, etc. Sea por lo que fuera, podemos suponer que esta interacción marcará un estado o base especial que elijéremos para escribir las matrices densidad.

En la siguiente sección estudiaremos estos casos.

## 22.2. Dinámica de sistemas abiertos

Consideraremos en esta sección dos ejemplos de interacción de un sistema de dos niveles con un entorno. Construiremos así ecuaciones dinámicas que nos indicarán de qué modo estos sistemas pueden evolucionar en contacto con un entorno.

Para un sistema cerrado, sabemos escribir las ecuaciones dinámicas. En la representación de Heisenberg son, como vimos en el capítulo 7,  $\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[\mathbf{H}, \rho]$ . Lo que buscamos ahora es completar esta ecuación con más términos que den cuenta de la dinámica abierta del sistema. Podemos escribir, de forma general

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[\mathbf{H}, \rho] + \mathcal{E}(\rho), \quad (22.7)$$

dónde  $\mathcal{E}$  será un operador o superoperador que actúa sobre la matriz densidad y que deseamos determinar.

En particular, para el caso de dimensión 2 que estudiamos aquí, podemos escribir las ecuaciones diferenciales para cada una de las componentes de  $\rho$ .

$$\dot{\rho}_{ij} = -\frac{i}{\hbar}[\mathbf{H}, \rho]_{ij} + \sum_{kl} \mathcal{E}_{ij,kl} \rho_{kl} \quad (22.8)$$

En lo que sigue, determinaremos los coeficientes de estas ecuaciones y las integramos.

### 22.2.1. Desfasaje, depolarización o decoherencia

Estudiaremos primero la interacción de un sistema de dos niveles con un campo externo irregular. Veremos que esto produce una pérdida de pureza del estado sin modificar las poblaciones relativas en una base. Este proceso lleva el nombre de desfasaje, depolarización o simplemente decoherencia.

Imaginemos que un conjunto de átomos preparados todos inicialmente en estado  $|\phi\rangle = |+\rangle$  es dejado evolucionar libremente en con un hamiltoniano  $\mathbf{H} = \hbar\omega\sigma_z/2$ . Para cada átomo tendremos que su evolución es

$$|\psi_j(t)\rangle = |0\rangle + e^{-i\omega_j t}|1\rangle, \quad (22.9)$$

donde  $\omega_j$  es la frecuencia de Bohr de cada átomo. Si todos los átomos son iguales y sienten el mismo entorno, entonces todos los  $\omega_j$  serán iguales y la descripción del conjunto será igual a la de cada uno de ellos. Esto es raramente lo que ocurren en la realidad. En general cada átomo tendrá un hamiltoniano levemente distinto y tendremos una distribución de probabilidad  $p(\omega_j)$  asociada a cada frecuencia. Damos algunos ejemplos de esto: i) en una celda con átomos en estado gaseoso cada uno está en una posición distinta con respecto a un campo externo no perfectamente uniforme, ii) en un líquido cada núcleo atómico está cerca de otros átomos que modifican el campo magnético que siente cada uno, iii) un cristal los átomos están en distintos lugares que cambian levemente sus energías internas, iv) átomos artificiales construidos en semiconductores son levemente distintos unos de los otros por la irregularidad de la fabricación v) la distribución térmica de un conjunto de átomos hace que cada uno vea una onda electromagnética externa que interactúa con ellos en corrida en frecuencia por el efecto Doppler, y así.

En cualquiera de los casos descritos anteriormente, el estado del sistema conjunto será descrito por una matriz densidad donde cada término  $|\psi_j\rangle\langle\psi_j|$  aparecerá con probabilidad  $p(\omega_j)$ ,

$$\begin{aligned}\rho &= \sum_j p(\omega_j) |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \\ &= \frac{1}{2} \left( |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| + |0\rangle\langle 1| \sum_j p(\omega_j) e^{i\omega_j t} + |1\rangle\langle 0| \sum_j p(\omega_j) e^{-i\omega_j t} \right). \quad (22.10)\end{aligned}$$

Como adelantamos, las poblaciones no se ven afectadas por este efecto, pero las coherencias sí. El modo en que los términos  $\rho_{01}$  y  $\rho_{10}$  dependan del tiempo estará determinado por las distribuciones de probabilidad  $p(\omega_j)$ .

Consideraremos dos distribuciones, la gaussiana y la lorentziana y los estudiaremos en el límite al continuo de la suma, reemplazándola por una integral. Estos dos casos, que representan dos situaciones físicas típicas dan dos resultados notoriamente distintos. Veamos, las integrales en estos casos pueden evaluarse analíticamente ya que son transformadas de Fourier conocidas, tenemos:

$$p(\omega) = \frac{1}{2\gamma\sqrt{\pi}} e^{-\omega^2/4\gamma^2} \quad \longrightarrow \quad \rho_{10} = \frac{1}{2} e^{-t^2\gamma^2} \quad (22.11)$$

$$p(\omega) = \frac{2a}{\gamma^2 + \omega^2} \quad \longrightarrow \quad \rho_{10} = \frac{1}{2} e^{-t\gamma} \quad (22.12)$$

En ambos casos ocurre un decaimiento de las coherencias que inicialmente son máximas y decrecen hasta cero. En un caso con una dependencia Gaussiana y en otro caso como un decaimiento exponencial. De este modo, la naturaleza del proceso, que determina la distribución de probabilidad  $p(\omega)$ , a su vez, determina cómo decaen los términos  $\rho_{10}$  y  $\rho_{01}$ .

Estos dos procesos cumplen con las condiciones de positividad y de preservación de traza, como puede verificarse utilizando la ecuación 22.6.

A partir de la solución que obtuvimos, podemos escribir las ecuaciones diferenciales para este proceso, que nos servirán para armar las ecuaciones ópticas de Bloch de la forma 22.8 más adelante. Podríamos llamar estas proto-ecuaciones ópticas de Bloch. Describen un proceso de decoherencia. Las escribimos en particular para el caso de un entorno lorentziano:

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_{00} &= \dot{\rho}_{11} = 0 \\ \dot{\rho}_{01} &= -\gamma\rho_{01} \\ \dot{\rho}_{10} &= -\gamma\rho_{10}\end{aligned}\tag{22.13}$$

### 22.2.2. Decaimiento

Un átomo o casi cualquier sistema cuántico en algún estado que no sea el fundamental, puede decaer a estados de menor energía. El modo en que lo hace y la probabilidad de que este evento ocurra depende de la simetría de los niveles, de la manera en que acoplan con los campos, etc. En muchos de estos casos, podremos aproximar este proceso como estocástico y asignarle una probabilidad  $\gamma$  o equivalentemente una vida media  $\tau = 1/\gamma$ . Es decir el estado  $\rho_{11}$  decae en  $\rho_{00}$  con una probabilidad por unidad de tiempo  $\gamma$ .

Más específicamente, por ejemplo, para el decaimiento radiativo electromagnético entre dos estados atómicos, vimos en el capítulo 20 que esta probabilidad vale

$$\gamma = \frac{d^2 w_0^3}{3\epsilon_0 \hbar c^3}.\tag{22.14}$$

En cualquier caso, si suponemos un proceso estocástico podemos escribir las siguientes ecuaciones diferenciales para las poblaciones:

$$\dot{\rho}_{11} = -\gamma\rho_{11} \quad ; \quad \dot{\rho}_{00} = \gamma\rho_{11}\tag{22.15}$$

Estas ecuaciones se integran directamente y obtenemos:

$$\rho_{11}(t) = \rho_{11}(0)e^{-\gamma t} \quad ; \quad \rho_{00} = (1 - \rho_{11}(0)e^{-\gamma t})\tag{22.16}$$

Es decir, la población decae de manera exponencial del estado excitado  $\rho_{11}$  al estado fundamental  $\rho_{00}$ .

Nos preguntamos ahora. ¿Qué pasa con la coherencias? ¿No decaen también? Si decaen, ¿de qué modo lo hacen?

Veamos un primer ejemplo para convencernos que las coherencias deben decaer también. Consideremos el estado inicial  $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$ . Si las coherencias no decayeran junto con las poblaciones el estado final sería

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad \leftarrow \text{sin sentido}$$

que no tiene sentido físico ya que tiene su tiene un autovalor negativo.

Debemos entonces incluir un término que de cuenta del decaimiento de los términos no diagonales  $\rho_{01}$  y  $\rho_{10}$ . Para hacerlo utilizaremos las ecuaciones que definen la condiciones de traza y semi-positividad (ecuaciones 22.5 y 22.6) así como las ecuaciones diferenciales para las poblaciones (ecuaciones 22.15). Eso no es todo, propondremos una solución, y veremos si tiene sentido y cuanto puede valer el parámetro que introduciremos. En particular propondremos que los términos no diagonales decaerán exponencialmente, es decir, proporcionalmente a su valor con una constante de tiempo que debemos determinar y llamamos  $\bar{\gamma}$ . En las palabras de la sección anterior, introduciremos un término de decoherencia para los coeficientes no diagonales. Las ecuaciones diferenciales para los términos no diagonales son entonces:

$$\dot{\rho}_{01} = -\bar{\gamma}\rho_{01} \quad ; \quad \dot{\rho}_{10} = -\bar{\gamma}\rho_{10}. \quad (22.17)$$

Veamos si esto tiene sentido y cuánto puede valer  $\bar{\gamma}$ . Para revisar esto utilizaremos primero la condiciones de positividad que derivaremos con respecto al tiempo y haremos los correspondiente reemplazos. Tenemos:

$$\begin{aligned} \rho_{01}\rho_{10} &\leq \rho_{00}\rho_{11} \\ \dot{\rho}_{01}\rho_{10} + \rho_{01}\dot{\rho}_{10} &\leq \dot{\rho}_{00}\rho_{11} + \rho_{00}\dot{\rho}_{11} \\ -2\bar{\gamma}\rho_{01}\rho_{10} &\leq \gamma(\rho_{11}\rho_{11} - \rho_{00}\rho_{11}) \\ 2\bar{\gamma}\rho_{01}\rho_{10} &\geq \gamma(\rho_{00}\rho_{11} - \rho_{11}\rho_{11}) \\ 2\bar{\gamma}\rho_{01}\rho_{10} &\geq \gamma\rho_{00}\rho_{11}, \end{aligned} \quad (22.18)$$

dónde en el último paso descartamos el término  $\rho_{11}^2$  por ser siempre positivo. Utilizando una vez más la condición de positividad sobre la última sentencia obtenemos el resultado buscado:

$$2\bar{\gamma} \geq \gamma. \quad (22.19)$$

Es decir, un decaimiento con una tasa  $\gamma$  viene siempre acompañado de decoherencia a una tasa de al menos  $\gamma/2$ . De hecho, no lo demostraremos aquí, pero si el proceso es puramente un decaimiento la desigualdad se satura y  $\bar{\gamma} = \gamma/2$ . Hay otros factores que hacen que la tasa de decaimiento pueda ser más grande, como el tipo de decoherencias que vimos en la sección anterior. En lo que sigue, por simplicidad, consideraremos el caso en que  $\bar{\gamma} = \gamma/2$ . Escribimos para este caso, el del decaimiento, unas segundas proto-ecuaciones ópticas de Bloch del siguiente modo:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{00} &= +\gamma\rho_{11} \\ \dot{\rho}_{11} &= -\gamma\rho_{11} \\ \dot{\rho}_{01} &= -\frac{\gamma}{2}\rho_{01} \\ \dot{\rho}_{10} &= -\frac{\gamma}{2}\rho_{10} \end{aligned} \quad (22.20)$$

Hasta aquí hemos tratado la interacción del átomo con su entorno natural, o con las irregularidades propias de cualquier sistema físico real. En lo que sigue

revistaremos el comportamiento de un átomo en presencia de un campo externo oscilante y lo incluiremos dentro de este formalismo. Así encontraremos ecuaciones realistas que describan la interacción de un átomo con un campo y su entorno.

### 22.2.3. Ecuación de Lindblad

Las ecuaciones dinámicas que describimos en las secciones anteriores son formas particulares de una ecuación más general que sirve para describir sistemas cuánticos abiertos. Cuando el entorno con el que estos sistemas interactúan cumple la condición de marcovianidad, la dinámica puede ser descrita por una ecuación que llamamos de Lindblad.

Escribimos y comentamos aquí su forma sin demostrar su validez.

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[\mathbf{H}, \rho] + \sum_u \left( L_u \rho L_u^\dagger - \frac{1}{2} L_u^\dagger L_u \rho - \frac{1}{2} \rho L_u^\dagger L_u \right) \quad (22.21)$$

Como vemos, el primer término corresponde a la ecuación de Heisenberg, que para los casos anteriores era nulo, pero para los siguientes no lo será. Los operadores “de Lindblad”  $L_u$  son operadores que describen las posibles distintas interacciones con el entorno. Puede ser uno o más, pero siempre hay que incluir los tres términos indicados. Los casos anteriores pueden ser descritos con un único operador cada uno. Dejamos a los lectores verificar que para la decoherencia  $L = \sqrt{\gamma} \sigma_x$  y que para el decaimiento  $L = \sqrt{\gamma} \sigma^-$ .

## 22.3. Dinámica con campos externos oscilantes

Queremos ahora incluir la acción de un potencial externo oscilante que puede generar transiciones coherentes entre dos estados cuánticos. Este problema fue tratado previamente en el contexto de las oscilaciones de Rabi descritas en el capítulo 7 y en la interacción de átomos de Rydberg con campos oscilantes en el capítulo 15. En este caso, extenderemos los resultados que allí obtuvimos escribiendo la dinámica del átomo como un sistema abierto, utilizando el formalismo de la matriz densidad.

En primer lugar, supondremos, como en todo este capítulo, que tenemos un sistema cuántico que podemos estudiar como un sistema de dos niveles. Estos dos niveles están separados por una energía  $\hbar\omega_0$ . El hamiltoniano libre de estos sistemas es entonces:

$$\mathbf{H}_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z \quad (22.22)$$

Estudiaremos a este sistema frente a una excitación oscilante con frecuencia angular  $\omega$  que acopla los estados atómicos  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ , con una constante de tiempo característica  $\Omega$ . Sin entrar en detalle del sistema físico exacto, el hamiltoniano de interacción puede escribirse de modo general como:

$$\mathbf{H}_{int} = \hbar\Omega \sigma_x \cos \omega t \quad (22.23)$$

La frecuencia de Rabi  $\Omega$  contiene toda la información del detalle de la situación física, como por ejemplo qué estados están conectados, que tipo de campo los conecta etc. Por ejemplo, para el caso de dos estados atómicos, conectados por una transición dipolar eléctrica, esta será  $\Omega = E \cdot d/\hbar$ , donde  $E$  es la amplitud del campo y  $d$  es el momento dipolar entre los estados atómicos. Para otros campos y otras transiciones la forma de  $\Omega$  cambiará, pero la forma general de la interacción no. Como es usual, para campos electromagnéticos que oscilan en frecuencias de MHz y hasta PHz, estudiaremos esta interacción haciendo la aproximación de onda rotante. Esta implica que  $2\omega$  es una frecuencia más rápida que cualquiera que uno pueda ver en el experimento y por lo tanto podemos obviar estas oscilaciones rápidas. En tal caso el término de interacción es:

$$\mathbf{H}_{int} = \frac{\hbar\Omega}{2} (\sigma^+ e^{-i\omega t} + \sigma^- e^{+i\omega t}) \quad (22.24)$$

Juantando ambos términos, escribimos el hamiltoniano total como:

$$\mathbf{H} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} \omega_0 & \Omega e^{+i\omega t} \\ \Omega e^{-i\omega t} & -\omega_0 \end{bmatrix} \quad (22.25)$$

Las dependencias temporales explícitas de este hamiltoniano, hacen que la resolución de las ecuaciones dinámicas puedan ser bastante complicadas. Sin embargo, podemos utilizar una herramienta que nos resuelve esta dificultad. Podemos escribir la dinámica en un marco rotante, tal como se describió en el capítulo 7. En este caso, la inspección del hamiltoniano, nos indica que el marco adecuado, es aquél que rota con frecuencia  $\omega$ . Es decir, un marco que rota como el campo externo descripto por el operador

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \Omega e^{-i\omega t} & 0 \\ 0 & \Omega e^{+i\omega t} \end{bmatrix} \quad (22.26)$$

El hamiltoniano que buscamos, en el marco rotante se calcula mediante  $\mathbf{H}' = \mathbf{U}\mathbf{H}\mathbf{U}^* - i\hbar\mathbf{U}\frac{d\mathbf{U}^*}{dt}$  y vale

$$\mathbf{H} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} \delta & \Omega \\ \Omega & -\delta \end{bmatrix}, \quad (22.27)$$

dónde  $\delta = \omega_0 - \omega$ . Este hamiltoniano, ahora si, resultará más sencillo para resolver las ecuaciones de la dinámica. En la representación de Heisenberg tenemos que  $i\hbar\dot{\rho} = [\mathbf{H}, \rho]$ , con lo que podemos escribir las ecuaciones diferenciales para cada componente.

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{00} &= +i\frac{\Omega}{2}(\rho_{10} - \rho_{10}) \\ \dot{\rho}_{11} &= -i\frac{\Omega}{2}(\rho_{10} - \rho_{10}) \\ \dot{\rho}_{01} &= -i\delta\rho_{01} + i\frac{\Omega}{2}(\rho_{11} - \rho_{00}) \\ \dot{\rho}_{10} &= +i\delta\rho_{10} - i\frac{\Omega}{2}(\rho_{11} - \rho_{00}) \end{aligned} \quad (22.28)$$



Estas ecuaciones puede ser resueltas de modo exacto, como se hizo en los capítulos 7 y 15, pero no nos detendremos en eso ahora. Lo interesante de esta forma de escribir estas ecuaciones que nos permite sumarlas a las obtenidas cuándo consideramos sistemas cuánticos abiertos en la sección anterior, más precisamente con las ecuaciones 22.20.

## 22.4. Ecuaciones Ópticas de Bloch

Estamos ahora en condiciones de unir los dos conceptos que venimos desarrollando: una evolución coherente dada por las ecuaciones 22.28 y una evolución disipativa dada por las ecuaciones 22.20. Si consideramos que ambos procesos son independientes al menos a primer orden en las derivadas temporales, podemos simplemente sumar ambas soluciones obteniendo las famosas *ecuaciones ópticas de Bloch* (OBE, por sus siglas en inglés):

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}_{00} &= +\gamma\rho_{11} + i\frac{\Omega}{2}(\rho_{10} - \rho_{10}) \\
 \dot{\rho}_{11} &= \gamma\rho_{00} - i\frac{\Omega}{2}(\rho_{10} - \rho_{10}) \\
 \dot{\rho}_{01} &= -\left(\frac{\gamma}{2} + i\delta\right)\rho_{01} + i\frac{\Omega}{2}(\rho_{11} - \rho_{00}) \\
 \dot{\rho}_{10} &= -\left(\frac{\gamma}{2} - i\delta\right)\rho_{10} - i\frac{\Omega}{2}(\rho_{11} - \rho_{00})
 \end{aligned} \tag{22.29}$$

Estas ecuaciones pueden ser escritas de un modo más sencillo, ya que no todas son independientes. De hecho, utilizando las condiciones  $\rho_{00} + \rho_{11} = 1$  y  $\rho_{10} = \rho_{01}^*$  y definiendo el coeficiente de inversión  $w = \rho_{11} - \rho_{00}$  podemos reescribir las OBE como:

$$\begin{aligned}
 \dot{w} &= -\gamma(w + 1) - i\frac{\Omega}{2}(\rho_{10} - \rho_{10}) \\
 \dot{\rho}_{10} &= -\left(\frac{\gamma}{2} - i\delta\right)\rho_{10} - i\frac{\Omega}{2}w
 \end{aligned} \tag{22.30}$$

La solución de estas ecuaciones ya no puede hacerse de modo exacto, sin embargo tanto su resolución numérica, como su solución de equilibrio nos darán mucha información. Veamos cada una.

### 22.4.1. Soluciones Dinámicas

El análisis numérico de las ecuaciones 22.30 es una técnica usual para modelar este tipo de sistemas y puede hacerse de modo relativamente sencillo con casi cualquier lenguaje de programación. Su estudio nos servirá para entender distintos regímenes y sacar conclusiones generales sobre la dinámica.

En el la figura 22.1 se muestran los resultados para la inversión de población  $w$  en función del tiempo para varios valores de los parámetros  $\Omega$  y  $\gamma$  siempre para

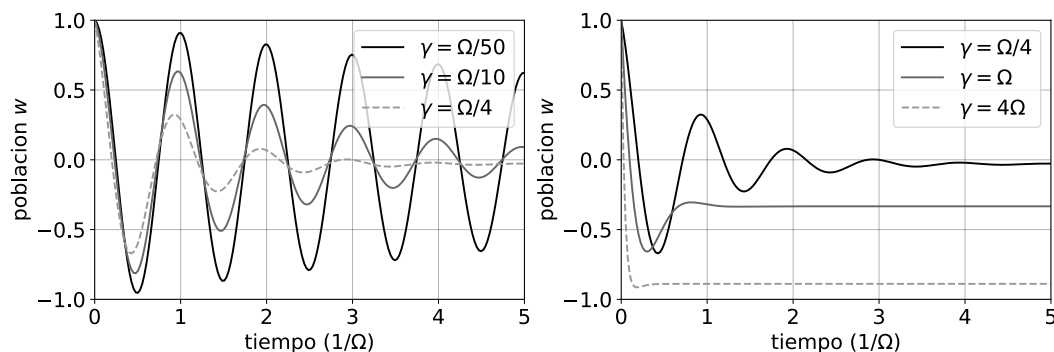


Figura 22.1: Evolución de la población de un sistema cuántico de dos niveles con un campo externo oscilante y decaimiento según las ecuaciones ópticas de Bloch 22.30. En todos los casos  $\delta = 0$ .

$\delta = 0$ . Las simulaciones fueron hechas utilizando la librería para Python QuTip <sup>1</sup>. Vemos con claridad dos regímenes.

En la figura de la izquierda, cuándo  $\gamma \ll \Omega$ , se producen oscilaciones de la población, pero estas decaen. Cuánto más grande es  $\gamma$  más rápido decaen. Es decir, el decaimiento genera decoherencia en las oscilaciones de Rabi. En este régimen las poblaciones tienden a igualarse  $w \rightarrow 0$ .

Si, en cambio,  $\gamma \gtrsim \Omega$ , como en el panel de la derecha, se ve que las poblaciones tienden al equilibrio, casi sin oscilar. El valor al que tienden, en este caso, depende fuertemente del valor de  $\gamma$  y  $\Omega$ . En la sección que sigue, estudiaremos este límite con más cuidado.

El método numérico sirve para analizar casi cualquier tipo de ecuaciones de Bloch. Dejamos los lectores que exploren otro tipo de ecuaciones similares u otros límites. Por ejemplo, que pasa si la desafinación es no nula, o si, como mencionamos en la primera sección, la decoherencia es más grande que el decaimiento  $\bar{\gamma} > \gamma$ , o si solo hay decoherencia. Dependiendo de la complejidad y resolución requerida puede requerir muchos recursos computacionales, pero estos ejemplos sencillos se corren en menos tiempo de lo que tardamos en pestañear.

## 22.4.2. Soluciones de Equilibrio

Estudiamos ahora las soluciones de equilibrio de las OBE <sup>2</sup>. Independientemente de una condición inicial, podemos imaginar que, debido a la disipación, las soluciones a las OBE tenderán a un equilibrio en el que las poblaciones de los distintos estados no cambian. Es decir, si  $t \gg 1/\gamma$  buscaremos soluciones planteando la condición  $\dot{\rho} = 0$ . En este caso, si resolvemos para la inversión de población  $w$ , obtenemos

$$w = -\frac{1}{1+S} \quad ; \quad S = \frac{\Omega^2/2}{\delta^2 + \gamma^2/4} \quad (22.31)$$

<sup>1</sup><http://qutip.org>

<sup>2</sup>Esta sección está inspirada y sigue de cerca el razonamiento que Immanuel Bloch (no Felix) hace en sus notas “Licht-Atom Wechselwirkung im Zwei-Niveau System”.

El número  $S$  se conoce como *parámetro de saturación*. Cuantifica, de algún modo, el cociente entre la frecuencia de Rabi (de oscilaciones coherentes) y la tasa de decaimiento. O, dicho de otro modo, que tan fuerte es el campo que excita la transición en comparación con qué tan rápido decae el estado excitado.

Estudiemos algunos extremos. Si el campo externo es muy pequeño,  $S \approx 0$ , tenemos que  $w \approx -1$ , es decir, la población está principalmente en el estado fundamental  $\rho_{00}$ . En el otro extremo, para un campo muy intenso,  $S \rightarrow \infty$ , tenemos que  $w \approx 0$ , que implica que las poblaciones son prácticamente iguales  $\rho_{00} \approx \rho_{11}$ . Es decir, a campos intensos la población está repartida aproximadamente por igual entre el estado excitado y el fundamental.

Es interesante notar que  $S$  es siempre positivo. Por eso, la solución de equilibrio no admite que la población del estado excitado sea mayor que la del fundamental:  $\rho_{11} > \rho_{00}$ . Es decir, en equilibrio, en un sistema de dos niveles, no podemos tener inversión de población. Una condición fundamental para, por ejemplo, el funcionamiento de un láser, que resuelve esta limitación o con más niveles, o con dinámica fuera del equilibrio.

**Intensidad de Saturación.** En resonancia,  $\delta = 0$ , el parámetro de saturación vale  $S_0 = 2\Omega^2/\gamma^2$ . Es común reexpresar  $\Omega_0$  en función de la intensidad del campo que lo excita. Para una transición dipolar excitada por un campo de amplitud  $E$ , recordamos que  $\Omega = Ed/\hbar$ , que  $\gamma$  viene dada por la expresión 22.14 y que la intensidad del campo es  $I = c\epsilon_0 E^2/2$ . Obtenemos entonces:

$$S_0 = \frac{I}{I_{sat}} \quad ; \quad I_{sat} = \frac{\pi\hbar c}{3\lambda\tau}, \quad (22.32)$$

dónde hemos definido la intensidad de saturación, como aquella que hace que  $S_0 = 1/2$  y hemos usado que la vida media del estado es  $\tau = 1/\gamma$  y que la longitud de onda emitida es  $\lambda = c/2\pi\omega$ .

Cada transición atómica estará caracterizada pues, por una longitud de onda  $\lambda$ , y una vida media  $\tau$ . Estas, a su vez, son los únicos parámetros que determinan cómo se comportará este átomo cuándo se lo someta a un campo externo resonante, o cuasi resonante.

Típicamente la intensidad de saturación  $I_{sat}$  para transiciones dipolares en átomos alcalinos (del grupo uno, que tienen un único electrón en la última capa) la intensidad de saturación es de entre 1 y 10 mW/cm<sup>2</sup>.

**Tasa de dispersión/emisión.** Es interesante calcular cuál es la tasa de emisión  $\Gamma$  de un único átomo cuando es expuesto a un campo externo. Es decir, calcular cuántos fotones dispersará un átomo por unidad de tiempo en función de la intensidad del campo externo. La tasa de emisión será proporcional a la probabilidad de que el átomo esté en el estado excitado  $\rho_{11}$  multiplicada por la probabilidad que emita  $\gamma$ . Es decir  $\Gamma = \gamma\rho_{11} = \gamma(1+w)/2$ , de dónde escribimos su forma general como,

$$\Gamma = \frac{\gamma}{2} \frac{S_0}{1 + S_0 + 4\delta^2/\gamma^2}. \quad (22.33)$$

Vemos un primer resultado sorprendente. La tasa de emisión satura para valores grande de  $S_0$  y vale  $\Gamma^{max} = \gamma/2$ . Podemos entender este resultado de la siguiente manera. Para emitir un fotón, un átomo tiene que absorberlo del campo y luego remitirlo. Cada uno de estos eventos tendrá un tiempo característico  $\tau = 1/\gamma$ . Por lo que absorber y emitir debe tardar el doble, o sea, la tasa es, como obtuvimos  $\Gamma^{max} = \gamma/2$ .

**Espectro de dispersión.** A partir de la expresión anterior podemos preguntarnos que forma tendrá la línea espectral de dispersión de un átomo como el que describimos. La pregunta es, como depende la tasa de dispersión en función de de la frecuencia del campo que excita la transición. O mejor, en función de desafinación  $\delta$  con respecto a la resonancia.

Estamos imaginado la siguiente situación: un átomo es excitado por un campo oscilante con frecuencia variable y los fotones dispersados son colectados en un detector, tal como se indica en la figura 22.2. Este tipo de configuración se da en un sinnúmero de situaciones. Por ejemplo, nombramos unos pocos, la detección óptica de un test PCR para identificar secuencias genéticas, en un detector de gases (como algunos alcoholemia, o de metano), en la interacción de luz emitida por supernovas distantes con el gas que se encuentra en el camino, o en un único átomo atrapado que forma parte de una computadora cuántica.

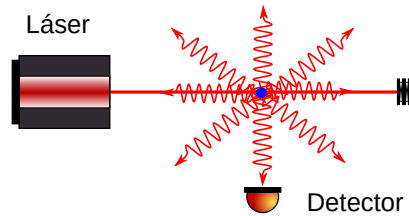


Figura 22.2: Esquema en el que un láser excita una transición en un átomo (punto azul) que decae emitiendo luz en distintas direcciones. Parte de la luz dispersada es medida en el detector.

Para esto es útil reescribir la ecuación anterior de la siguiente manera:

$$\Gamma = \frac{S_0}{1 + S_0} \frac{\gamma/2}{1 + 4\delta^2/(1 + S_0)}. \quad (22.34)$$

Vemos en esta expresión que el primer término depende exclusivamente de el parámetro de saturación mientras que el segundo es una función lorenziana con un ancho característico que depende del parámetro de saturación. Es decir, el espectro se vuelve más ancho a medida que se incrementa la potencia. Tiene un ancho mínimo que viene dado por el factor de decaimiento  $\gamma$ , pero a medida que se incrementa la potencia se vuelve más ancho. Este efecto se llama “ensanchamiento por potencia” y se ilustra en la figura 22.3.

**Absorción.** Por último, estudiamos la absorción de el campo que genera la excitación en una muestra grande de átomos. Imaginemos que tenemos una celda

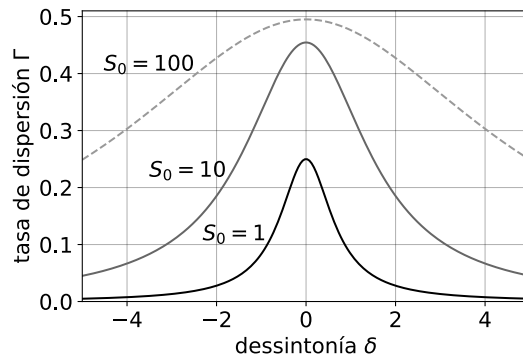


Figura 22.3

con un gas de átomos y que el campo que lo excita es un láser que atraviesa esta celda con densidad atómica  $n$ . La pregunta que nos hacemos es, ¿cómo depende la intensidad del campo a medida que avanza por la celda?

Cada vez que un fotón es dispersado el haz pierde una energía/intensidad en una cantidad  $dI = \hbar\omega_0$ . Esto ocurrirá a una tasa que es el producto de la probabilidad de dispersión  $\Gamma$  y de la densidad. Es decir

$$\frac{dI}{dz} = -\hbar\omega_0\Gamma n. \quad (22.35)$$

Para el caso resonante y para parámetro de saturación pequeño obtenemos que esta ecuación puede ser escrita en la forma de la ley de absorción de Beer-Labert. En efecto tenemos en este límite que

$$\frac{dI}{dz} \approx -\sigma_{01}nI \quad ; \quad \sigma_{01} = \frac{3\lambda^2}{2\pi}. \quad (22.36)$$

Dónde  $\sigma_{01}$  es la sección eficaz de dispersión. De este modo, la intensidad al atravesar la celda tendrá la típica forma exponencial decreciente:

$$I(z) = I(0)e^{-\sigma_{01}nz}. \quad (22.37)$$