Física Teórica 2 - Atomos y campos e.m. en cavidades (QCED)

Vladimir Daniel Rodríguez Chariarse

8 de junio de 2022

1. Problema 3

El modelo de Jaynes–Cummings. Considere un átomo de dos niveles $|g\rangle$ y $|e\rangle$ cuyo Hamiltoniano puede tomarse como

$$H_A = \frac{\hbar\omega_a}{2}(|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|) = \frac{\hbar\omega_a}{2}\sigma_z,$$

donde $\sigma_z = |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|$ y $\hbar\omega_a = E_e - E_g$ es el gap entre los niveles del átomo. El átomo interactúa con un único modo del campo electromagnético cuantizado en el interior de una cavidad. El Hamiltoniano del modo de campo electromagnético es

$$H_C = \hbar\omega_c\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right),$$

donde $a^\dagger$ y a son operadores de creación y destrucción de fotones. En la aproximación dipolar, la interacción entre el átomo y el campo electromagnético se reduce a una interacción entre el dipolo eléctrico del átomo ($\boldsymbol{d}$) y el campo eléctrico en la cavidad ($\boldsymbol{E}$), dada por $H_{\text{int}} = -\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{E}$. En la aproximación de onda rotante (*rotating wave approximation*) se desprecian los términos que oscilan rápidamente y la interacción puede aproximarse como

$$H_{\text{int}} \approx -i\frac{\hbar\Omega}{2}\left(\sigma_+ \otimes a - \sigma_- \otimes a^\dagger\right),$$

donde $\sigma_+ = |e\rangle\langle g|$ y $\sigma_- = \sigma_+^\dagger$. De esta forma, el sistema completo está descripto por el Hamiltoniano de Jaynes–Cummings

$$H_{\text{JC}} = H_A + H_C + H_{\text{int}} = \frac{\hbar\omega_a}{2}\sigma_z + \hbar\omega_c\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) - i\frac{\hbar\Omega}{2}\left(\sigma_+ \otimes a - \sigma_- \otimes a^\dagger\right).$$

(a) Definimos el operador número de excitaciones como

$$N = a^\dagger a + |e\rangle\langle e|.$$

Escriba los autoestados y autovalores del operador N. ¿Están degenerados los autovalores de N? Interprete el significado de este operador.

(b) Muestre que $[N, H_{\rm JC}] = 0$ por lo que se puede elegir una base común de autoestados (se interpreta que el número de excitaciones se conserva).

(c) Aprovechando lo anterior, muestre que el problema de diagonalizar $H_{\rm JC}$ se reduce al problema de diagonalizar matrices de 2×2 correspondientes a cada número de excitaciones n ($n > 0$), ¿qué se tiene en el caso de cero excitaciones?). Diagonalice el Hamiltoniano de Jaynes–Cummings en cada subespacio invariante. **Ayuda.** Al ser un problema de dos estados podemos usar lo conocido para diagonalizar un sistema general de dos estados, cuyo Hamiltoniano se escribe en la base $\{|e, n-1\rangle = |+\rangle, |g, n\rangle = |-\rangle\}$ como $H_n = \hbar(a_n + \vec{b}_n \cdot \vec{\sigma})$, donde $a_n = \omega_c n$, $\vec{b}_n = \frac{\Delta}{2}\hat{z} + \frac{\Omega}{2}\sqrt{n}\hat{y}$, la desintonía es $\Delta = \omega_a - \omega_c$ y las matrices de Pauli se refieren a la base especificada.

(d) Especialice la solución exacta de los autoestados y energías para los dos siguientes límites: (i) la frecuencia de Bohr del átomo ω_a coincide con la de la cavidad ω_c (caso resonante). (ii) ambas frecuencias son muy distintas (régimen dispersivo), $|\Delta| \gg \Omega$, considerando independientemente los casos $\Delta > 0$ y $\Delta < 0$.

Solución: (a) Como $N = a^\dagger a + |e\rangle\langle e|$ es suma de operadores en distintos espacios de Hilbert, los autoestados son producto tensorial de autoestados en cada espacio de Hilbert: $|e, n\rangle$ y $|g, n\rangle$. Para obtener los autovalores:

$$\begin{aligned} N\,|e, n\rangle &= a^\dagger a\,|e, n\rangle + |e\rangle\langle e|\,|e, n\rangle \\ &= (n+1)\,|e, n\rangle \end{aligned}$$

siendo n entero (número de fotones) se agrega una unidad por le excitación atómica.

$$\begin{aligned} N\,|g, n\rangle &= a^\dagger a\,|g, n\rangle + |e\rangle\langle e|\,|g, n\rangle \\ &= n\,|g, n\rangle \end{aligned}$$

en este caso no hay excitación atómica.

Para autovalor $N = 0$, es decir con 0 excitaciones, sólo tenemos un estado $|g, 0\rangle$ (autoestado no degenerado). Para autovalor $N = n$ tenemos dos autoestados posibles con el mismo autovalor: $\{|e, n-1\rangle, |g, n\rangle\}$

El significado del observable N es que su autovalor provee el número total de excitaciones del campo y del átomo. Las excitaciones del campo son dadas por el número de fotones, las del átomo es 1 si está en el nivel excitado $|e\rangle$ y 0 si está en el fundamental $|g\rangle$.

(b) Podemos usar $a^\dagger a = N - |e\rangle\langle e|$, con lo que el Hamiltoniano no perturbado

H_0 se escribe:

$$\begin{aligned} H_0 &= H_A + H_C \\ &= \frac{\hbar}{2}\omega_a\sigma_z + \hbar\omega_c(N+\frac{1}{2}) - \hbar\omega_c \underbrace{|e\rangle\langle e|}_{\frac{1}{2}(\mathbb{I}+\sigma_z)} \\ &= \hbar\omega_c N + \frac{\hbar}{2}\Delta\sigma_z \end{aligned}$$

siendo $\Delta = \omega_a - \omega_c$ la desintonía.

Calculemos ahora $[H_{JC}, N]$, dado que $[H_0, N] = 0$:

$$\begin{aligned} [H_{JC}, N] &= -i\frac{\hbar\Omega}{2}\left[\sigma_+ a - \sigma_- a^\dagger, a^\dagger a + |e\rangle\langle e|\right] \\ &= -i\frac{\hbar\Omega}{2}\left(\sigma_+ \underbrace{[a, a^\dagger a]}_{a} + \underbrace{[\sigma_+, |e\rangle\langle e|]}_{-\sigma_+} a - \sigma_- \underbrace{[a^\dagger, a^\dagger a]}_{-a^\dagger} - \underbrace{[\sigma_-, |e\rangle\langle e|]}_{\sigma_-} a^\dagger\right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Por consiguiente existe una base común de autoestados de H_{JC} y N.

(c) Encontremos la base común:

• Como $|g, 0\rangle$ es autoestado no degenerado de N (autovalor cero), entonces es inmediatamente autoestado de H_{JC}:

$$H_{JC}\,|g, 0\rangle = -\frac{\hbar}{2}(\omega_a - \omega_c)\,|g, 0\rangle$$

Este es el estado fundamental del modelo de Jaynes-Cummings. La energía proviene del estado fundamental del átomo y de la energía de punto cero del campo.

• Los otros autoestados de H_{JC} los buscamos entre los autoestados de N. Dada la doble degeneración de estos últimos, necesariamente los autoestados comunes se encuentran en el subespacio de autoestados degenerados de N: $\{|e, n-1\rangle, |g, n\rangle\}$ con autovalor $N = n$, $n \geq 1$[1].

La matriz del Hamiltoniano en la base de autoestados comunes se escribe como una suma directa de Hamiltonianos H_n. Salvo H_0 que es de dimensión 1, los otros H_n son de dimensión 2.

Una forma más física de verlo es que el H_{int} no altera el número de excitaciones pues por ejemplo $\sigma_- a^\dagger$ crea una excitación del campo y quita una excitación atómica. Del mismo modo el término $\sigma_+ a$ quita una excitación del campo y crea una excitación atómica, por o que no se sale del subespacio con número de excitaciones definido.

[1] Otra forma de verlo es notar que: $NH_{JC}\,|N = n\rangle = H_{JC}N\,|N = n\rangle = nH_{JC}\,|N = n\rangle$, con lo que $H_{JC}\,|N = n\rangle$ es autoestado de N, es decir que pertenece al subespacio de degeneración.

Para proseguir expresemos H_{JC} sobre la base $\{|e,n-1\rangle, |g,n\rangle\}$:

$$\begin{aligned} H_{JC}\,|e,n-1\rangle &= (H_0 + H_{int})\,|e,n-1\rangle \\ &= (\hbar\omega_c n + \frac{\hbar}{2}\Delta)\,|e,n-1\rangle + i\frac{\hbar\Omega}{2}\sqrt{n}\,|g,n\rangle \\ H_{JC}\quad |g,n\rangle &= (H_0 + H_{int})\,|g,n\rangle \\ &= (\hbar\omega_c n - \frac{\hbar}{2}\Delta)\,|g,n\rangle - i\frac{\hbar\Omega}{2}\sqrt{n}\,|e,n-1\rangle \end{aligned}$$

Lo que confirma lo previsto. Para expresar la acción de H_{JC} en el subespacio usamos los operadores H_n, y cambiamos a una nueva notación de pseudo-spin : $|e,n-1\rangle \to |+\rangle$ y $|g,n\rangle \to |-\rangle$, con lo que:

$$H_n = \hbar\omega_c n\mathbb{I} + \frac{\hbar}{2}\Delta\sigma_z + \frac{\hbar}{2}\Omega_n\sigma_y = \hbar a_n\mathbb{I} + \hbar\boldsymbol{b_n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

donde se define la frecuencia de Rabi en un campo electromagnético de n fotones[2] $\Omega_n = \Omega\sqrt{n}$, $a_n = \omega_c n$ y $\boldsymbol{b_n} = \frac{\Delta}{2}\hat{z} + \frac{\Omega_n}{2}\hat{y} = |\boldsymbol{b_n}|\hat{b}_n$. Los autoestados de H_n se reducen a encontrar los autoestados de $\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{b}_n$, problema que ya hicimos de diversas formas (con y sin proyectores). Los autovalores son:

$$\varepsilon_{n\pm} = \hbar\omega_c n \pm \frac{\hbar}{2}\sqrt{\Delta^2 + \Omega_n^2}$$

y los correspondientes autoestados son:

$$\begin{aligned} |n+\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}\,|e,n-1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\,|g,n\rangle \\ |n-\rangle &= -\sin\frac{\theta}{2}\,|e,n-1\rangle + \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\,|g,n\rangle \end{aligned}$$

donde θ y φ son los ángulos esféricos de $\hat{b}_n$. Como $\hat{b}_n$ pertenece al plano $y-z$, entonces $\varphi = \pi/2$, por lo que $e^{i\varphi} = i$. De la definición de $\boldsymbol{b_n}$ obtenemos:

$$\tan\theta = \frac{\Omega_n}{\Delta} \quad\Longrightarrow\quad \cos\theta = \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + \Omega_n^2}}$$

Usando que $\cos\frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{1+\cos\theta}{2}}$ y que $\sin\frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{1-\cos\theta}{2}}$ obtenemos:

$$\begin{aligned} \cos\frac{\theta}{2} &= \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{\Delta}{2\sqrt{\Delta^2 + \Omega_n^2}}} \\ \sin\frac{\theta}{2} &= \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{\Delta}{2\sqrt{\Delta^2 + \Omega_n^2}}} \end{aligned}$$

[2]Para n muy grandes, esta definición es similar al caso semiclásico, pues la amplitud del campo eléctrico es proporcional a $\sqrt{n}$.

(d) • En el caso resonante con $\Delta = \omega_a - \omega_c = 0$ los niveles de energía de H_0 inicialmente degenerados, se desdoblan $\varepsilon_{n\pm} = \hbar\omega_a \pm \frac{\hbar}{2}\Omega_n$. Para los autoestados se tiene que $\theta/2 = \pi/4$:

$$|n+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|e, n-1\rangle + i\frac{1}{\sqrt{2}}\,|g, n\rangle$$
$$|n-\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}\,|e, n-1\rangle + i\frac{1}{\sqrt{2}}\,|g, n\rangle$$

• En el régimen dispersivo $\Delta \gg \Omega$, los niveles de energía de H_0, se separan $\varepsilon_{n\pm} \sim \hbar\omega_c n \pm \frac{\hbar}{2}\Delta(1+\frac{\Omega_n^2}{2\Delta^2})$ (linealmente en Δ, aunque la expansión es a segundo orden en el parámetro chico Ω/Δ). Para los autoestados se tiene: i) si $\Delta > 0$ ($\omega_a > \omega_c$), $\cos(\theta/2) \to 1$, ii) si $\Delta < 0$ ($\omega_a < \omega_c$), $\sin(\theta/2) \to 1$:

$$\Delta > 0(\omega_a > \omega_c): \qquad |n+\rangle \to |e, n-1\rangle \quad |n-\rangle \to i\,|g, n\rangle$$
$$\Delta < 0(\omega_a < \omega_c): \qquad |n+\rangle \to i\,|g, n\rangle \quad |n-\rangle \to -\,|e, n-1\rangle$$

Esto se observa en el gráfico de energías:

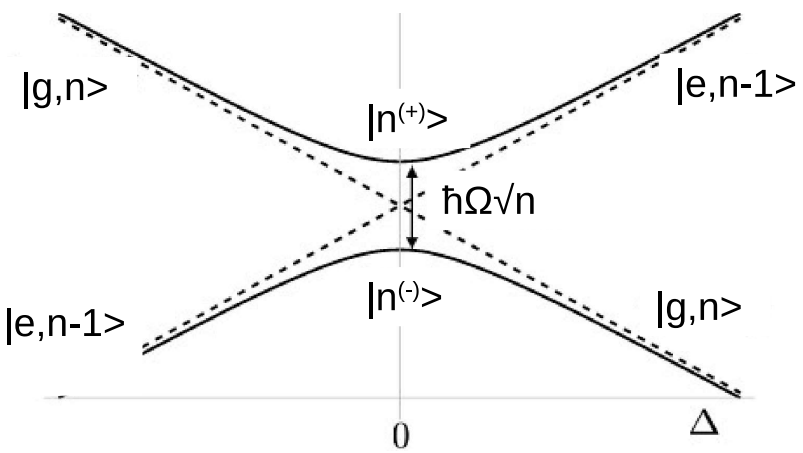

Figura 1: *Separación del espectro en función de la desintonía $\Delta = \omega_a - \omega_c$. Límites dispersivos.*

La línea punteada son las energías sin H_{int} en función de Δ. Sin interacción hay cruce de niveles si $\Delta = 0$ (degeneración) y los estados son los no perturbados. Con interacción los estados se intercambian de un extremo al otro, y el cruce de energías se evita. Esto es usual pues la perturbación (interacción) rompe la degeneración como se verá en la guía de teoría de perturbaciones.