



**Estados estacionarios de transparencia inducida
electromagnéticamente y el rol de los mecanismos de decoherencia
en acoples fuera de resonancia en moléculas de puntos cuánticos**

Sebastián David Martínez Castaño

Tesis presentada como requisito para optar al título de:
Maestría en Física

Dirigido por:
Dr. Boris Anghelo Rodríguez Rey

Instituto de Física
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad de Antioquia
Medellín, Colombia
2022

Agradecimientos

Es grande el esfuerzo tanto en factores técnicos como emocionales detrás de este trabajo, por lo que considero importante dedicar unas palabras a quienes me acompañaron y aportaron su granito de arena para animarme a no desfallecer. A mi asesor Boris Rodríguez por siempre tener las palabras y los gestos precisos para guiarme con este trabajo y transmitirme y regalarme un poco de esa pasión con la que afronta los problemas más duros de la física y de la vida misma, por todo su apoyo e impulso para empezar mi vida profesional y por darme la confianza para avanzar a mi propio ritmo. A mi familia y en especial a mi mamá, quien ha sido un motivo para ser mejor persona cada día y que ha cargado con tantas cosas para que mi formación académica sea ininterrumpida, por ella y para ella, todo el esfuerzo y tiempo invertido en este trabajo tiene una dedicatoria especial. A mis amigos y colegas a quienes destaco a Mariana, mi hermanita, que ha sido la compañía inalterable, el apoyo más incondicional y la persona cuya compañía, hace las tardes de trabajo y estudio más amenas. A Caro y Alejo, los reencauchados, por todas las conversaciones, las sorpresas, las risas y discusiones, con ellos descubro día a día los muchos significados de la amistad. A Miguel Hincapié, con quien tuve la oportunidad de trabajar y compartir más allá de la física, en un momento donde el mundo se venía encima, su pasión y forma de ser y sensibilidad me motivaron, guiaron y reafirmaron el amor por el oficio. A Arley por los *incendios apagados* las horas de discusión, de tintos y risas que nunca faltan. A Jose Manuel, el matemático que más estimo, las palabras quedan cortas para expresarle toda la gratitud y cariño que le tengo pues he admirado siempre su nobleza, alegría genuina, persistencia y dedicación. A mi compañero de apartamento Sebas, por su amistad y cariño, por aguantarme y entenderme en mis momentos más oscuros. A Fede, El Dani y Ochoa, mis colegas de primer semestre de pregrado, por su amistad, por su cariño genuino y por permanecer en mi vida, aunque nos veamos poco, el cariño es grande. Y a todas las demás personas que hicieron parte de este camino, gracias, porque hacen de la vida un espacio más bello.

Índice general

Índice de figuras	2
Introducción	4
1. Dinámica en el formalismo del operador densidad	6
1.1. Teoría de perturbaciones	6
1.2. Transformación al cuadro rotante	8
1.2.1. Transformación directa	8
1.2.2. Transformación unitaria general	9
2. Teoría de la interacción radiación materia	11
2.1. Ecuación de onda - Gauge de Coulomb	11
2.2. Hamiltoniano del campo electromagnético en una caja	15
2.3. Coordenadas canónicas del campo electromagnético	16
2.4. Cuantización del campo electromagnético	17
2.5. Interacción radiación materia - Interacción dipolar	18
2.6. Aproximación de onda rotante y hamiltoniano de Jaynes-Cummings	20
3. Sistemas cuánticos abiertos	22
3.1. Entornos y reservorios	22
3.2. Ecuación Maestra Born-Markov	23
3.3. Ecuación Maestra de Lindblad	24
3.4. Decoherencia: Efectos comunes	28
3.5. Decoherencia en sistemas fuera de la resonancia	30
4. Teoría semiclásica de la respuesta óptica no lineal	32
4.1. Vector de polarizabilidad y tensor de susceptibilidad	33
4.2. Cálculo de susceptibilidad con mecánica cuántica	35
4.2.1. Teoría de perturbaciones	35
4.2.2. Cálculo exacto y expansión en series de Taylor.	37
5. Modelo y resultados	40
5.1. Sistema físico	40
5.2. Modelo semiclásico del sistema de tres niveles	40
5.3. Susceptibilidades por el método exacto	42
5.4. Sistemas de dos niveles y acoples fuera de resonancia	45
5.5. Estado estacionario fuera de resonancia	48
Conclusiones y perspectivas	51
Referencias	53

Índice de figuras

2.1. Condiciones de frontera periódicas sobre caja cúbica	13
3.1. Distribución de Cauchy	27
3.2. Emisión Espontánea	29
3.3. Esquema modelo de Jaynes-Cummings	30
3.4. Estructura de niveles fuera de resonancia	31
4.1. Cargas distribuidas en el espacio	32
4.2. Polarizabilidad Eléctrica	34
4.3. Haz de luz sobre un medio	34
4.4. Susceptibilidad de primer orden por perturbaciones	38
4.5. Susceptibilidad de tercer orden por el método exacto	39
5.1. Molécula de puntos cuánticos vertical	41
5.2. Sistema tipo Λ	42
5.3. Susceptibilidad de primer orden para molécula de puntos cuánticos tipo Λ	44
5.4. Susceptibilidad de primer orden en función de Δ_c	44
5.5. Molécula de puntos cuánticos de dos niveles acoplada a campo fuera de resonancia	45
5.6. Probabilidad de respuesta según los parámetros de asintonía	46
5.7. Probabilidad de respuesta con $\delta_p = 20g$	47
5.8. Promedio temporal del número medio de excitación como función de Γ	47
5.9. Evolución temporal con $\Gamma = 0.1g$ sobre estado base con pulso continuo	48
5.10. Evolución temporal con $\Gamma = 0.1g$ sobre estado coherente con pulso gaussiano	49
5.11. Formación del estado estacionario con pulso continuo de $30/g$ de duración	50
5.12. Función $g^{(2)}(\tau)$ para el estado estacionario	50

Introducción

En los últimos años la mecánica cuántica ha sido una de las ramas de la física más prometedoras, debido a su amplia gama de aplicaciones prácticas y teóricas [SN14; Sak06], la cuantización de distintas cantidades físicas como la energía, el momentum angular y los campos electromagnéticos a bajas energías permiten describir los procesos de interacción de los materiales con los campos a un nivel atómico y molecular de una forma bastante precisa [SZ99; BJ03]. Particularmente, para calcular las propiedades ópticas como la susceptibilidad y el índice de refracción, un formalismo cuántico desvela comportamientos lineales y no lineales que no pueden ser obtenidos a partir de formalismos clásicos [Boy20; DH14].

Uno de los modelos más importantes para modelar la interacción de la materia con las ondas electromagnéticas de bajas energías es el modelo de Jaynes-Cummings [JC63; SK93] que ofrece una gran precisión para modelar los acoples de los campos electromagnéticos cuantizados y la materia, esto la convierte en una de las descripciones teóricas más importantes de la electrodinámica cuántica de cavidades y la óptica cuántica [GKL13; Lar07].

Los sistemas cuánticos pueden modelarse a través de un formalismo de operador densidad [Fan57] que permite modelar efectos de disipación y decoherencia [Sch05; Zur03] propios de los sistemas abiertos a través de ecuaciones maestras [BP02; Man20]. Los sistemas abiertos suelen presentar dinámicas que llevan a un estado cuántico estacionario que puede ser calculado mediante formalismos perturbativos o exactos [Fer00; Tar02; Fri78] que depende usualmente de las tasas de disipación y bombeo a las cuales está sometido el sistema lo que puede ser aprovechado para múltiples aplicaciones [Alb18].

Una de las aplicaciones de los estados cuánticos estacionarios consiste en modificar las propiedades ópticas de los materiales utilizando interferencia cuántica [SZ99; Boy20], es posible suprimir los efectos de dispersión y absorción sobre la luz incidente, cuando la interferencia entre los canales de emisión es destructiva, este efecto es conocido como transparencia inducida electromagnéticamente [BIH91; FIM05; Mar98], donde la interferencia provoca cambios en el índice de refracción del material eliminando su capacidad de absorción y dispersión a uno de los campos [LI01; HFI90], estos efectos han sido ampliamente estudiados y aplicados en sistemas atómicos de tres niveles tipo Λ en cavidades ópticas [FIM05; Müc+10] y estructuras semiconductoras más complejas como moléculas de puntos cuánticos [Wei+12].

Un punto cuántico semiconductor es una heteroestructura que permite el movimiento de electrones confinados en un espacio 3 dimensional y por lo tanto poseen un espectro de energía discreto [WW14; Wan+07; Alo+07]. Las moléculas de punto cuántico se forman acoplando dos o más puntos cuánticos y usualmente son llamadas moléculas artificiales que poseen propiedades y aplicaciones muy interesantes en el régimen de interacción dipolar [Yos+04; Hen+07]. Las estructuras semiconductoras, como las moléculas de punto cuántico presentan fenomenología interesante, pues se han observado acoples fuera de la resonancia en experimentos de fotoluminiscencia [Kan+08; Lau+11], estos acoples son atribuidos a múltiples fenómenos como el desfase puro [AGP09] y las interacciones electrón-fonón [Hoh10; Hoh+09; Hug+11] y se ha demostrado que estas interacciones extienden el rango de disonancia en el cual los puntos cuánticos pueden acoplarse a campos externos [Maj+11].

En este trabajo exploramos la dinámica de los puntos cuánticos acoplados a campos en resonancia

y fuera de la resonancia, incluyendo a su vez los efectos de disipación y decoherencia y los acoples no resonantes como las interacciones electrón fonón a nivel de la ecuación maestra y en busca del estado estacionario, se propone un formalismo de cuadro rotante que elimina las dependencias temporales en los hamiltonianos de los campos clásicos o cuánticos externos que pueden generar. A partir de este punto se calculan propiedades ópticas como la susceptibilidad y el índice de refracción a través de métodos aproximados como teoría de perturbaciones y métodos exactos, en función de las distintas tasas y niveles de energía del sistema de puntos cuánticos, desvelando comportamientos similares a los gases atómicos, donde sus propiedades ópticas se van modificadas, como por ejemplo la transparencia inducida electromagnéticamente. Además numéricamente se exploran los efectos de acoples no resonantes sobre sistemas con radiación cuantizada.

Capítulo 1

Dinámica en el formalismo del operador densidad

En mecánica cuántica algunos problemas pueden solucionarse de forma exacta, gracias a la estructura de los Hamiltonianos que describen los sistemas y sus interacciones con agentes externos como por ejemplo campos electromagnéticos [SN14; Sak06]. Sin embargo, existen numerosos problemas donde la solución exacta está lejos del alcance. Para solucionar este tipo de sistemas e interacciones existe la posibilidad de utilizar aproximaciones de tipo perturbativas, que permiten una descripción de los fenómenos físicos a distintos órdenes. Particularmente los fenómenos de la óptica cuántica no lineal aprovechan este formalismo con dependencia temporal explícita para encontrar valores esperados de cantidades de interés como la susceptibilidad $\chi^{(j)}$, donde (j) es el orden de la perturbación, que a medida que aumenta, revela distintos comportamientos de la materia en presencia de campos electromagnéticos [Boy20] como veremos más adelante.

1.1. Teoría de perturbaciones

Supongamos un sistema cuántico descrito por un hamiltoniano $H(t)$ dependiente del tiempo el cual podemos dividir en dos partes

$$H(t) = H_0 + V(t); \quad (1.1.1)$$

de los cuales el primer término H_0 es independiente del tiempo y conocemos sus autoestados

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad (1.1.2)$$

mientras que el segundo término $V(t)$ contiene la dependencia temporal y la información de las interacciones con agentes externos.

Cuando $V(t) = 0$ los autoestados $|n\rangle$ poseen una evolución temporal estacionaria trivial descrita por el operador $e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}$. Sin embargo, de forma general cuando $V(t) \neq 0$ el problema dejará de ser trivial y la evolución temporal de las poblaciones y coherencias de manera general, no es estacionaria y ya no podrá ser descrita por $e^{-\frac{iH(t)t}{\hbar}}$, debido a que el operador $H(t)$ no conmuta necesariamente a diferentes tiempos. En general el estado del sistema en cualquier tiempo t puede ser descrito mediante un formalismo de operador densidad

$$\rho(t) = \sum_{n,m} \rho_{nm}(t) |n\rangle \langle m|, \quad (1.1.3)$$

donde toda la dependencia temporal es descargada sobre las poblaciones $\rho_{nn}(t)$ y coherencias $\rho_{nm}(t)$, y para el sistema cerrado de manera general la evolución temporal se rige bajo la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar\dot{\rho} = [H(t), \rho]. \quad (1.1.4)$$

Es conveniente solucionar la ecuación de cada elemento de matriz del operador densidad. Esto se consigue haciendo la proyección $\langle n | \dots | m \rangle$ sobre la ecuación (1.1.4), quedando de la forma:

$$i\hbar\dot{\rho}_{nm} = (E_n - E_m)\rho_{nm} + \sum_k (V_{nk}\rho_{km} - \rho_{nk}V_{km}). \quad (1.1.5)$$

La perturbación al sistema descrito por H_0 es descrita por el potencial V , en general V tiene una dependencia explícita del tiempo y además puede depender de varios parámetros. La perturbación puede calcularse a distintos órdenes de V y en algunos casos es interesante considerar la perturbación en función de una pequeña parte de V . Para introducir esta idea dividiremos V en la suma de la contribución no perturbativa y la contribución perturbativa proporcional a un parámetro λ . Note que la contribución no perturbativa, no necesariamente es parte de H_0

$$V = V^{(0)} + \lambda V^{(1)}. \quad (1.1.6)$$

El paso siguiente tiene que ver con el operador densidad ρ , el cual puede ser expandido en una serie de potencias en función del parámetro λ , en este paso se debe tener sumo cuidado con la convergencia de la serie, pues las sutilezas de las teorías perturbativas suelen esconder grandes problemas de convergencia y llevar a resultados erróneos, dando lugar a una teoría de perturbaciones no regular o singular [Fer00]. Los coeficientes de la serie de potencias del operador densidad de j -ésimo orden $\rho_{nm}^{(j)}$ se relacionarán con el operador densidad total como

$$\rho = \sum_{j=0} \rho^{(j)} \lambda^j = \sum_{j=0} \sum_{n,m} \rho_{nm}^{(j)}(t) \lambda^j |n\rangle \langle m|, \quad (1.1.7)$$

y teniendo en cuenta la ecuación (1.1.3) los elementos de matriz del operador densidad, es decir las poblaciones y coherencias, expandidas por la perturbación son:

$$\rho_{nm} = \sum_{j=0} \rho_{nm}^{(j)} \lambda^j, \quad (1.1.8)$$

por lo tanto la ecuación (1.1.5) se transforma en:

$$\sum_{j=0} i\hbar\dot{\rho}_{nm}^{(j)} \lambda^j = \sum_{j=0} (E_n - E_m) \rho_{nm}^{(j)} \lambda^j + \sum_{j=0} \sum_k [(V_{nk}^{(0)} \rho_{km}^{(j)} - \rho_{nk}^{(j)} V_{km}^{(0)}) \lambda^j + (V_{nk}^{(1)} \rho_{km}^{(j)} - \rho_{nk}^{(j)} V_{km}^{(1)}) \lambda^{j+1}] \quad (1.1.9)$$

Las ecuaciones perturbativas se toman según las potencias del parámetro λ . La primera contribución de interés es el orden de perturbación $j = 0$, donde se encuentra la solución sin perturbación, es decir, en este escenario la contribución perturbativa del potencial $V^{(1)}$ no tiene un rol dinámico sobre las coherencias y poblaciones. La ecuación a orden $j = 0$ según (1.1.9) es:

$$i\hbar\dot{\rho}_{nm}^{(0)} = (E_n - E_m)\rho_{nm}^{(0)} + \sum_k (V_{nk}^{(0)} \rho_{km}^{(0)} - \rho_{nk}^{(0)} V_{km}^{(0)}). \quad (1.1.10)$$

Esta ecuación cargará la información fundamental de la evolución sin perturbación del sistema. Notemos que el hecho de que $V^{(0)}$ aparezca, indica que no necesariamente los autoestados de H_0 se comportan como estados estacionarios, de hecho, la dependencia temporal explícita de V en términos generales, puede aparecer en ésta porción del potencial. A este orden el estado estacionario es de particular interés, ya que es el estado natural donde se encontrará el sistema antes de encender la perturbación. La dependencia temporal explícita del potencial no perturbativo, convierte esta discusión en un problema no trivial, por lo que la discusión acerca del estado estacionario se retomará en secciones posteriores. El orden superior ($j \geq 1$) también puede encontrarse de (1.1.9) como:

$$i\hbar\dot{\rho}_{nm}^{(j)} = (E_n - E_m)\rho_{nm}^{(j)} + \sum_k [(V_{nk}^{(0)} \rho_{km}^{(j)} - \rho_{nk}^{(j)} V_{km}^{(0)}) + (V_{nk}^{(1)} \rho_{km}^{(j-1)} - \rho_{nk}^{(j-1)} V_{km}^{(1)})], \quad (1.1.11)$$

estos órdenes superiores $j \geq 1$ tienen la particularidad de que exponen una dependencia del estado a un orden inferior $j - 1$, acoplando la evolución temporal de forma que a medida que se aumentan los órdenes de aproximación, más información dinámica se irá revelando, aislando las contribuciones dinámicas de la perturbación en cada orden. En óptica no lineal cantidades como la susceptibilidad tendrán una conexión directa con la teoría de perturbaciones.

En este punto es muy importante tener en consideración todos los cuidados sobre la convergencia de la teoría de perturbaciones, pues en (1.1.7) se ha asumido la convergencia de la serie de potencias para ρ , lo que acarrea problemas matemáticos complejos que no saltan a la vista. Por fortuna, estas sutilezas matemáticas están en su mayoría contenidas en la dependencia temporal explícita de $V(t)$, y muchas veces con un simple cambio de variable que sacrifica el estado estacionario global del sistema por un estado rotante cuasi-estacionario, se mostrará que es un tratamiento suficiente para evitar caer en errores que invaliden completamente los resultados [Fer00].

1.2. Transformación al cuadro rotante

1.2.1. Transformación directa

Al igual que los cuadros dinámicos de Schrödinger y Heisenberg, el cuadro rotante ofrece ventajas particulares sobre la visión dinámica de los fenómenos cuánticos. Por defecto sabemos que ρ es el estado del sistema en el cuadro de Schrödinger, y de manera general, es totalmente dependiente del tiempo. Supongamos por un momento que $V = 0$, en este escenario la ecuación de los elementos de matriz del operador densidad (1.1.5) toma una forma totalmente desacoplada y la solución general de la dinámica de poblaciones y coherencias estará dada por $\rho_{nm}(t) = \rho_{nm}(0)e^{-i\omega_{nm}t}$ con $\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$. Esta solución además de claramente depender de su condición inicial, también tiene una particularidad y es que la fase exponencial $e^{-i\omega_{nm}t}$ prohíbe que las coherencias del operador en este cuadro puedan ser estacionarias; en el caso general con $V \neq 0$ existirá una transformación unitaria sobre (1.1.5) de la forma:

$$\rho_{nm} = \tilde{\rho}_{nm}e^{i\alpha_{nm}t}, \quad (1.2.1)$$

tal que la dependencia explícita del tiempo de la ecuación será eliminada por completo. El valor de α_{nm} debe cumplir entonces dos propiedades esenciales, pues se debe preservar la hermiticidad y la traza del estado ρ . Es fácil ver que $\alpha_{mn} = -\alpha_{nm}$ y por lo tanto la transformación para las poblaciones estará mediada por el parámetro $\alpha_{nn} = 0$, conservando tanto las probabilidades $\rho_{nn} = \tilde{\rho}_{nn}$ y la hermiticidad de ρ .

Para que la transformación sea exitosa analizaremos el caso común en que $V_{nm} = \tilde{V}_{nm}e^{i\beta_{nm}t}$, en este caso la ecuación (1.1.5) se convertirá en:

$$i\hbar\dot{\tilde{\rho}}_{nm}e^{i\alpha_{nm}t} = \hbar(\omega_{nm} + \alpha_{nm})\tilde{\rho}_{nm}e^{i\alpha_{nm}t} + \sum_k (\tilde{V}_{nk}\tilde{\rho}_{km}e^{i(\beta_{nk} + \alpha_{km})t} - \tilde{\rho}_{nk}\tilde{V}_{km}e^{i(\alpha_{nk} + \beta_{km})t}), \quad (1.2.2)$$

teniendo en cuenta que si $V_{nm} = 0$ el valor de β_{nm} está indefinido y por lo tanto tiene infinitas posibilidades. Por último también es importante notar que como ρ y V son operadores hermíticos $\alpha_{mn} = -\alpha_{nm}$ y $\beta_{mn} = -\beta_{nm}$. Para este caso, con el fin de eliminar la dependencia temporal, que está contenida en las exponenciales, la ecuación (1.2.2) arrojará la relación:

$$\alpha_{nm} = \beta_{nk} + \alpha_{km} = \alpha_{nk} + \beta_{km}, \quad (1.2.3)$$

de la cual gracias a la hermiticidad de V y ρ , utilizando que $\alpha_{mm} = 0$ se cumplirá que

$$\alpha_{km} = -\beta_{mk} = \beta_{km}. \quad (1.2.4)$$

Finalmente se obtendrá la relación:

$$\alpha_{nm} = \beta_{nk} - \beta_{mk}, \quad (1.2.5)$$

que se deberá cumplir para todo k . De esta forma, la ecuación diferencial se convertirá en una nueva ecuación sobre los coeficientes de $\tilde{\rho}$ al cual llamaremos como el operador densidad en el cuadro rotante y cuyas componentes evolucionan según una ecuación diferencial que no depende explícitamente del tiempo

$$i\hbar\dot{\tilde{\rho}}_{nm} = \hbar(\omega_{nm} + \alpha_{nm})\tilde{\rho}_{nm} + \sum_k (\tilde{V}_{nk}\tilde{\rho}_{km} - \tilde{\rho}_{nk}\tilde{V}_{km}). \quad (1.2.6)$$

Cabe notar que las ecuaciones (1.1.5) y (1.2.6) tienen la misma estructura, la única diferencia está en el término proporcional a ρ_{nm} que se verá convertido de ω_{nm} a $\omega_{nm} + \alpha_{nm}$ y que la ecuación diferencial en el cuadro rotante perderá toda su dependencia temporal explícita. Esta particularidad brinda beneficios en la teoría de perturbaciones ya que la estructura de (1.1.10) y (1.1.11) no se verá modificada en exceso y la pérdida de la dependencia temporal, brindará beneficios adicionales para analizar el estado estacionario, ya que en las ecuaciones dinámicas, al perder la dependencia temporal explícita, la teoría perturbaciones sobre $\tilde{\rho}_{nm}$ se convertirá en una teoría regular, sin problemas de convergencia y permitirá un análisis más riguroso de los distintos órdenes de interacción con el agente perturbativo. Visto desde el cuadro rotante, el estado es estacionario y se corresponde a un estado cuasi-estacionario en el cuadro de Schrödinger, ya que teniendo en cuenta (1.2.1), la información de la dependencia temporal explícita estará completamente contenida en la fase $e^{i\alpha_{nm}t}$ y las amplitudes $\tilde{\rho}_{nm}$ tendrán una dinámica más sencilla que las amplitudes ρ_{nm} pero seguirán teniendo una conexión directa.

1.2.2. Transformación unitaria general

Otra manera de pensar la transformación al cuadro rotante es partir de la ecuación de Schrödinger (1.1.4) en el cuadro de Schrödinger. Si imponemos que el operador densidad en el cuadro rotante $\tilde{\rho}$ sea una transformación unitaria del operador en el cuadro de Schrödinger ρ tal que $\tilde{\rho} = U\rho U^\dagger$, entonces satisface una ecuación de Schrödinger con un hamiltoniano modificado \tilde{H} :

$$i\hbar\dot{\tilde{\rho}} = [\tilde{H}, \tilde{\rho}], \quad (1.2.7)$$

donde el primer objetivo será deducir \tilde{H} . Partamos de que:

$$i\hbar\dot{\tilde{\rho}} = i\hbar(\dot{U}\rho U^\dagger + U\dot{\rho}U^\dagger + U\rho\dot{U}^\dagger), \quad (1.2.8)$$

donde reemplazando la expresión (1.1.4) obtendremos

$$i\hbar\dot{\tilde{\rho}} = i\hbar(\dot{U}\rho U^\dagger + U\frac{[H, \rho]}{i\hbar}U^\dagger + U\rho\dot{U}^\dagger),$$

y reorganizando un poco la ecuación, obtendremos que

$$i\hbar\dot{\tilde{\rho}} = i\hbar(\dot{U}\rho U^\dagger + U\rho\dot{U}^\dagger) + UH\rho U^\dagger - U\rho H U^\dagger,$$

dado que $\tilde{\rho} = U\rho U^\dagger$ multiplicando por los factores adecuados obtendremos que:

$$i\hbar\dot{\tilde{\rho}} = i\hbar(\dot{U}U^\dagger\tilde{\rho} + \tilde{\rho}U\dot{U}^\dagger) + UHU^\dagger\tilde{\rho} - \tilde{\rho}UHU^\dagger,$$

finalmente teniendo en cuenta que $\frac{d(UU^\dagger)}{dt} = \dot{U}U^\dagger + UU^\dagger\dot{U} = 0$, obtendremos que:

$$i\hbar\dot{\tilde{\rho}} = [i\hbar\dot{U}U^\dagger + UHU^\dagger, \tilde{\rho}] = [\tilde{H}, \tilde{\rho}], \quad (1.2.9)$$

por lo que podemos concluir que

$$\tilde{H} = i\hbar\dot{U}U^\dagger + UHU^\dagger. \quad (1.2.10)$$

Esta expresión general para \tilde{H} nos da información muy importante para el cambio de cuadro, si suponemos que $H = H_0 + V$ y $U = e^{iH_0 t/\hbar}$ notamos que $\tilde{H} = V_I = UVU^\dagger$ generando la transformación al cuadro conocido como cuadro de interacción, por lo que la expresión (1.2.10) es una ecuación robusta y general para cualquier cambio de cuadro dinámico.

Teniendo en cuenta que la estructura de la transformación tiene como fin eliminar las dependencias temporales explícitas de H , podemos imponer la condición

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial t} = 0, \quad (1.2.11)$$

para encontrar las ecuaciones de evolución en lo que llamamos como el cuadro rotante. La ecuación para U resultante de imponer esta condición sobre la transformación (1.2.10) es:

$$0 = i\hbar(\ddot{U}U^\dagger + \dot{U}\dot{U}^\dagger) + \dot{U}HU^\dagger + U\dot{H}U^\dagger + UH\dot{U}^\dagger. \quad (1.2.12)$$

Dado que U es un operador unitario, no es descabellado suponer que puede ser escrito como $U = e^{i\Theta t}$, transformando la ecuación diferencial anterior para U en una ecuación algebraica para Θ :

$$0 = i\hbar((- \Theta^2 U)U^\dagger + (i\Theta U)(-i\Theta U^\dagger)) + (i\Theta U)HU^\dagger + U\dot{H}U^\dagger + UH(-i\Theta U^\dagger),$$

la cual multiplicando por U y U^\dagger a la izquierda y derecha respectivamente y simplificando obtenemos

$$0 = i\Theta H + \dot{H} - iH\Theta,$$

que finalmente puede ser reescrita como:

$$\dot{H} = i[H, \Theta]. \quad (1.2.13)$$

Lo anterior resulta una ecuación sumamente interesante, pues Θ es un operador cuyo conmutador con H tiene una relación directa con su derivada temporal \dot{H} y la transformación unitaria $U = e^{i\Theta t}$, en la ecuación (1.2.10), convierte a \tilde{H} en un operador sin dependencia explícita del tiempo. Este hecho hace que la ecuación (1.2.7) se convierta en una ecuación lineal sin dependencias explícitas del tiempo, totalmente análoga a las ecuaciones de las componentes de la sección anterior (1.2.6), y nuevamente facilita considerablemente su solución. Más adelante utilizaremos este resultado para eliminar la dependencia temporal de algunos Hamiltonianos comunes de los formalismos de interacción radiación materia y óptica no lineal.

Capítulo 2

Teoría de la interacción radiación materia

Las dinámicas temporales de los campos electromagnéticos en el vacío están descritas por las ecuaciones de Maxwell

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (2.0.1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.0.2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (2.0.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (2.0.4)$$

A continuación desarrollaremos un proceso que involucra la dinámica del campo confinado en una caja cúbica sin fuentes. En este escenario las condiciones de frontera afectan al campo eléctrico que debe ser periódico en las paredes de la caja. A partir de estos resultados se buscará la cuantización de Dirac mediante sus coordenadas canónicas, donde luego se acoplarán materia y campo libre, ambos cuantizados, para describir los Hamiltonianos que son fundamentales en los fenómenos propios de la óptica no lineal [DH14; Sak06].

2.1. Ecuación de onda - Gauge de Coulomb

En el caso en que no existen fuentes de campo, es decir $\rho = 0$ y $\vec{J} = 0$ las ecuaciones de Maxwell toman la forma

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0, \quad (2.1.1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.1.2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (2.1.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (2.1.4)$$

Teniendo en cuenta (2.1.2) y (2.1.3) podemos proponer un potencial vectorial \vec{A} y otro escalar ϕ de forma que las expresiones

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad (2.1.5)$$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}. \quad (2.1.6)$$

La ventaja de incluir estos potenciales es que estos poseen invarianza Gauge sobre una función f , de forma que unos nuevos potenciales

$$\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}f, \quad (2.1.7)$$

$$\phi' = \phi - \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (2.1.8)$$

nos darán la libertad de simplificar muchos de los cálculos sobre el campo electromagnético.

Al reemplazar (2.1.5) y (2.1.6) en las ecuaciones de Maxwell de forma general obtendremos las ecuaciones diferenciales acopladas de los potenciales:

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\partial}{\partial t}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}), \quad (2.1.9)$$

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{A} = \vec{\nabla} \left[\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right], \quad (2.1.10)$$

a las cuales podemos aplicar un Gauge especial de la óptica cuántica, para encontrar la solución de los campos propagantes en el espacio, que consiste en volver los potenciales a la forma que cumplan que:

$$\begin{aligned} \phi &= 0, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{A} &= 0. \end{aligned} \quad (2.1.11)$$

Este gauge es conocido como el Gauge de Coulomb y convierte las ecuaciones (2.1.9) y (2.1.10) en una única ecuación de onda para el potencial vectorial

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{A} = 0, \quad (2.1.12)$$

que según (2.1.6) y (2.1.5) estará relacionado con los campos aplicando el gauge como

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad (2.1.13)$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (2.1.14)$$

El potencial vectorial y el campo electromagnético son en general funciones vectoriales de las coordenadas espaciales y el tiempo de esta forma cuando consideramos una caja con geometría cúbica conviene expresar (2.1.12) en coordenadas cartesianas como

$$\frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = 0. \quad (2.1.15)$$

Utilizando separación de variables y teniendo en cuenta las fronteras de una caja con paredes perfectamente conductoras como se muestra en la figura 2.1 el potencial vectorial tendrá una solución general dada por la expansión

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = (ae^{ik_x x} + be^{-ik_x x})(ce^{ik_y y} + de^{-ik_y y})(fe^{ik_z z} + ge^{-ik_z z})(\vec{h}e^{i\omega t} + \vec{l}e^{-i\omega t}), \quad (2.1.16)$$

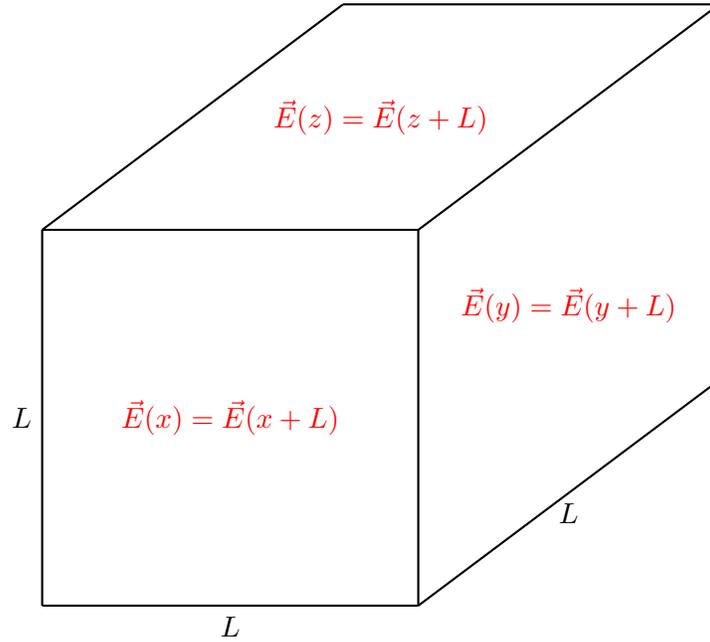


Figura 2.1: Condiciones de frontera periódicas sobre caja cúbica de lado L , en cada una de las paredes de la caja, el campo eléctrico es periódico.

donde se k_x , k_y , k_z y ω son constantes que satisfacen la relación:

$$(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \quad (2.1.17)$$

para ser solución de la ecuación de onda (2.1.15). Mientras que, las constantes a , b , c , d , f y g dependen de las condiciones de frontera. Los vectores \vec{h} y \vec{l} los analizaremos con detalle más adelante. Cabe aclarar que tanto las constantes como los vectores constantes pueden tener coeficientes complejos.

Utilizando el gauge de Coulomb (2.1.13), el campo eléctrico tomará la forma general de:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -i\omega(ae^{ik_x x} + be^{-ik_x x})(ce^{ik_y y} + de^{-ik_y y})(fe^{ik_z z} + ge^{-ik_z z})(\vec{h}e^{i\omega t} - \vec{l}e^{-i\omega t}), \quad (2.1.18)$$

la cual podemos analizar teniendo en cuenta las fronteras de la caja cúbica en la figura 2.1. Suponiendo los lados de la caja de tamaño L , podemos situar la caja en un sistema de referencia tal que las 6 paredes estén situadas en las posiciones $x, y, z = 0$ y $x, y, z = L$ de esta forma las constantes tomarán la forma de $a = b$, $c = d$, y $f = g$. Además, las componentes del vector \vec{k} , tomarán la forma de $k_x = \frac{2n_x\pi}{L}$, $k_y = \frac{2n_y\pi}{L}$ y $k_z = \frac{2n_z\pi}{L}$. Los números enteros n_x , n_y y n_z harán referencia a los modos normales de oscilación de la onda. De este modo el campo eléctrico puede simplificarse de forma que se agrupen los modos de radiación según su vector de propagación $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} i\omega_{\vec{k}}(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}})(\vec{l}_{\vec{k}}e^{-i\omega_{\vec{k}}t} - \vec{h}_{\vec{k}}e^{i\omega_{\vec{k}}t}). \quad (2.1.19)$$

El vector de campo eléctrico \vec{E} debe ser una cantidad real, ya que es un observable con significado físico, por lo que podemos imponer la condición de $\text{Im}[\vec{E}] = 0$ que tomará la forma de:

$$\text{Re}[\vec{l}_{\vec{k}}e^{-i\omega_{\vec{k}}t} - \vec{h}_{\vec{k}}e^{i\omega_{\vec{k}}t}] = 0. \quad (2.1.20)$$

Debido a que la constante $i\omega$ es imaginaria pura y la parte dependiente de las coordenadas es real y esto dará como resultado que las constantes vectoriales son:

$$\begin{aligned}\vec{h}_{\vec{k}} &= -\frac{E_{0,\vec{k}}}{i\omega_{\vec{k}}}\vec{a}_{\vec{k}}^*, \\ \vec{l}_{\vec{k}} &= \frac{E_{0,\vec{k}}}{i\omega_{\vec{k}}}\vec{a}_{\vec{k}}.\end{aligned}\quad (2.1.21)$$

El factor $\frac{E_{0,\vec{k}}}{i\omega_{\vec{k}}}$ se incluye para simplificar la expresión en términos de la amplitud del campo y para adimensionalizar el vector $\vec{a}_{\vec{k}}$. De esta forma, el potencial vectorial \vec{A} y el campo eléctrico \vec{E} dentro del cubo con condiciones periódicas tomarán la forma:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \frac{E_{0,\vec{k}}}{i\omega_{\vec{k}}} (e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}) (\vec{a}_{\vec{k}} e^{-i\omega_{\vec{k}}t} - \vec{a}_{\vec{k}}^* e^{i\omega_{\vec{k}}t}) \quad (2.1.22)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} E_{0,\vec{k}} (e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}) (\vec{a}_{\vec{k}} e^{-i\omega_{\vec{k}}t} + \vec{a}_{\vec{k}}^* e^{i\omega_{\vec{k}}t}), \quad (2.1.23)$$

esta solución puede simplificarse aún más, ya que los productos darán resultados de ondas planas viajeras y los términos $-i\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega_{\vec{k}}t$ pueden ser absorbidos por los términos $i\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega_{\vec{k}}t$ cuando $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \frac{E_{0,\vec{k}}}{i\omega_{\vec{k}}} (\vec{a}_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-i\omega_{\vec{k}}t} - \vec{a}_{\vec{k}}^* e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\omega_{\vec{k}}t}) \quad (2.1.24)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} E_{0,\vec{k}} (\vec{a}_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-i\omega_{\vec{k}}t} + \vec{a}_{\vec{k}}^* e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\omega_{\vec{k}}t}). \quad (2.1.25)$$

Estas son las soluciones más generales del potencial vectorial y el campo eléctrico, en forma de una superposición de ondas planas, es decir, cuando la onda está descrita por un único vector de propagación \vec{k} . Para la contribución del campo magnético por su parte, que tendrá la forma de (2.1.14), primero analizaremos las propiedades que oculta el Gauge de Coulomb. Dado que toda la dependencia explícita de las coordenadas está incluida en uno de los términos exponenciales es conveniente analizar la función

$$U(\vec{r}, \vec{k}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \quad (2.1.26)$$

Las derivada parcial respecto a x toma forma como:

$$\frac{\partial U(\vec{r}, \vec{k})}{\partial x} = ik_x U(\vec{r}, \vec{k}), \quad (2.1.27)$$

y de manera análoga sucederá lo mismo para y y z . Teniendo esto en cuenta al aplicar el Gauge de Coulomb (2.1.11) y a un único modo de (2.1.24) obtendremos:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\omega} \vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) = 0, \quad (2.1.28)$$

lo que indica que la onda es perpendicular a su vector de propagación \vec{k} . En otras palabras, el vector \vec{k} es perpendicular al campo eléctrico y al potencial vectorial. Este resultado nos indica que el vector $\vec{a}_{\vec{k}}$ de cada modo, posee dos componentes constantes que en general resultan distintas de cero, y son dos componentes transversales perpendiculares a \vec{k} . De este modo el campo magnético puede calcularse fácilmente usando las expresiones (2.1.14) y (2.1.27) como:

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\omega} \vec{k} \times \vec{E}(\vec{r}, t), \quad (2.1.29)$$

lo que demuestra que el vector de propagación \vec{k} y el campo eléctrico, son perpendiculares al campo magnético, por lo que los modos de propagación de la onda electromagnética son necesariamente transversales. El campo magnética quedará expresado como:

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \frac{E_{0,\vec{k}}}{\omega_k} \left[(\vec{k} \times \vec{a}_{\vec{k}}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-i\omega_k t} + (\vec{k} \times \vec{a}_{\vec{k}}^*) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{i\omega_k t} \right]. \quad (2.1.30)$$

Para finalizar, cabe resaltar que los vectores de polarización en cada modo $\vec{a}_{\vec{k}}$, no necesariamente restringen la onda electromagnética a una polarización lineal, si no que de manera general tenemos grados de libertad adicionales, y por eso deben ser expresados como vectores complejos.

2.2. Hamiltoniano del campo electromagnético en una caja

Es bien conocido que el hamiltoniano clásico del campo electromagnético confinado en un espacio de volumen V está definido cómo:

$$H = \frac{\epsilon_0}{2} \int_V d^3\vec{r} (E^2(\vec{r}, t) + c^2 B^2(\vec{r}, t)). \quad (2.2.1)$$

En este caso el integrando hace referencia a la densidad energética del campo en una posición \vec{r} . En el caso de una caja de paredes conductoras el espacio de integración corresponde al interior de la caja con $V = L^3$, las magnitudes al cuadrado de los campos las podemos calcular como:

$$\begin{aligned} E^2(\vec{r}, t) &= \vec{E}(\vec{r}, t) \cdot \vec{E}(\vec{r}, t), \\ B^2(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\omega^2} (\vec{k} \times \vec{E}(\vec{r}, t)) \cdot (\vec{k} \times \vec{E}(\vec{r}, t)), \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

estas cantidades son proporcionales a la densidad de energía eléctrica y magnética respectivamente. Es conveniente analizar por separado el caso de un único modo:

$$E^2(\vec{r}, t) = E_0^2 (a^2 U^2(\vec{r}, \vec{k}) e^{-2i\omega t} + \vec{a} \cdot \vec{a}^* + \vec{a}^* \cdot \vec{a} + a^{*2} U^{*2}(\vec{r}, \vec{k}) e^{2i\omega t}), \quad (2.2.3)$$

donde será útil diferenciar el orden de operación entre los vectores \vec{a} y \vec{a}^* para una cuantización del campo más directa. Por el lado del campo magnético, por simplicidad, apoyándonos de la identidad vectorial

$$(\vec{v} \times \vec{w}) \cdot (\vec{v} \times \vec{w}) = v^2 w^2 - (\vec{v} \cdot \vec{w})^2, \quad (2.2.4)$$

y las condición (2.1.28), el cuadrado del campo magnético tendrá la forma:

$$B^2(\vec{r}, t) = \frac{E_0^2}{\omega^2} k^2 (a^2 U^2(\vec{r}, \vec{k}) e^{-2i\omega t} + \vec{a} \cdot \vec{a}^* + \vec{a}^* \cdot \vec{a} + a^{*2} U^{*2}(\vec{r}, \vec{k}) e^{2i\omega t}). \quad (2.2.5)$$

Para calcular el hamiltoniano (2.2.1), notemos que la integral sobre las coordenadas únicamente tendrá en cuenta a los términos que contengan a $U(\vec{r}, \vec{k})$ de este modo las integrales de interés sobre el volumen de la caja son:

$$\int_V d^3\vec{r} U^2(\vec{r}, \vec{k}) = 0, \quad (2.2.6)$$

$$\int_V d^3\vec{r} = L^3 = V \quad (2.2.7)$$

de esta forma el hamiltoniano monomodo queda reducido a la forma:

$$H = \epsilon_0 E_0^2 V (\vec{a} \cdot \vec{a}^* + \vec{a}^* \cdot \vec{a}), \quad (2.2.8)$$

el cual podemos generalizar a un hamiltoniano total que considere todos los posibles modos expandiendo sus direcciones de polarización $\alpha_{\vec{k}}$. Pero antes, como la onda electromagnética es transversal, por cada modo \vec{k} , hay 2 direcciones de interés $\alpha_{\vec{k}} = 1, 2$, equivalentes a las componentes de polarización transversales a \vec{k} , es decir que

$$\vec{a}_{\vec{k}} = \sum_{\alpha_{\vec{k}}=1}^2 a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} \hat{\epsilon}_{\alpha_{\vec{k}}}. \quad (2.2.9)$$

de modo que $\hat{\epsilon}_{\alpha_{\vec{k}}}. \vec{k} = 0$. Reemplazando lo anterior en la expresión (2.2.8), el hamiltoniano final es:

$$H = \sum_{\vec{k}} \sum_{\alpha_{\vec{k}}=1}^2 \epsilon_0 E_{0,\vec{k}}^2 V (a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}}^* + a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}}^* a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}}). \quad (2.2.10)$$

Es también importante notar que en este hamiltoniano no hay términos de interacción entre los distintos modos y sus componentes.

2.3. Coordenadas canónicas del campo electromagnético

Dado a que los modos de oscilación y sus diferentes direcciones no interactúan entre si, podemos analizar la contribución de una única polarización del hamiltoniano monomodo 2.2.8 es decir:

$$H = \epsilon_0 E_0^2 V (a a^* + a^* a), \quad (2.3.1)$$

donde los coeficientes a que en general son complejos podemos escribirlos como:

$$a = q + ip, \quad (2.3.2)$$

donde q y p son cantidades reales y adimensionales que reciben el nombre de cuadraturas. Al reemplazar la forma compleja en (2.3.1) obtendremos:

$$H = 2\epsilon_0 E_0^2 V (p^2 + q^2), \quad (2.3.3)$$

que tiene la forma de un hamiltoniano armónico, por lo que podemos reescalar los coeficientes q y p como:

$$p = \frac{1}{2E_0} \sqrt{\frac{1}{\epsilon_0 V}} P, \quad (2.3.4)$$

$$q = \frac{\omega}{2E_0} \sqrt{\frac{1}{\epsilon_0 V}} Q, \quad (2.3.5)$$

y de esta manera:

$$H = \frac{1}{2} P^2 + \frac{\omega^2}{2} X^2, \quad (2.3.6)$$

el cual es altamente similar a un hamiltoniano armónico de masa $m = 1$. Sin embargo, las coordenadas X y P no son posición y momentum, si no que están relacionadas con los coeficientes reales e imaginarios de a , que son coeficientes de la separación de variables en la solución de la ecuación de onda. Por lo que distinguirlas como las coordenadas canónicas del campo [Sak06] y que deberán cumplir la relación canónica clásica mediante el corchete de Poisson:

$$\{X, P\} = 1. \quad (2.3.7)$$

2.4. Cuantización del campo electromagnético

Dada la relación canónica (2.3.7), el proceso de cuantización requerirá convertir los coeficientes X y P y las cantidades relacionadas en operadores, incluyendo a los mismos campos y potenciales. Esto se logra al convertir los corchetes de Poisson en conmutadores cuánticos [Sak06] de modo que:

$$[X, P] = i\hbar, \quad (2.4.1)$$

que arrojará la relación sobre q y p como:

$$[q, p] = \frac{\omega}{4E_0^2} \frac{1}{\epsilon_0 V} i\hbar, \quad (2.4.2)$$

la cual a su vez arrojará el conmutador:

$$[a, a^\dagger] = \frac{\hbar\omega}{2E_0^2\epsilon_0 V}, \quad (2.4.3)$$

en este punto es conveniente escoger la amplitud inicial del campo como $E_0 = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 V}}$ y de este modo reescribir los conmutadores de una manera mucho más sencilla como:

$$[q, p] = \frac{i}{2}, \quad (2.4.4)$$

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (2.4.5)$$

Estas relaciones darán como resultado que el hamiltoniano (2.3.1) para una única dirección de polarización en uno de los modos será

$$H = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2), \quad (2.4.6)$$

que generalizado a todos los modos tendrá la forma:

$$H = \sum_{\vec{k}} \sum_{\alpha_{\vec{k}}=1}^2 \hbar\omega_{\vec{k}} (a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}}^\dagger a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} + 1/2). \quad (2.4.7)$$

Los conmutadores entre los distintos modos y direcciones de polarización serán:

$$[a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}}, a_{\vec{k}',\alpha_{\vec{k}'}}] = 0, \quad (2.4.8)$$

$$[a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}}, a_{\vec{k}',\alpha_{\vec{k}'}}^\dagger] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\alpha_{\vec{k}},\alpha_{\vec{k}'}} , \quad (2.4.9)$$

$$(2.4.10)$$

del mismo modo el potencial vectorial y campo eléctrico cuantizado dentro de la caja de paredes conductoras, teniendo en cuenta (2.1.24) y (2.1.25), tomarán la forma:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{i\omega_{\vec{k}}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\vec{k}}}{2\epsilon_0 V}} \sum_{\alpha_{\vec{k}}=1}^2 (a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} U(\vec{r}, \vec{k}) e^{-i\omega_{\vec{k}} t} - a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}}^\dagger U^*(\vec{r}, \vec{k}) e^{i\omega_{\vec{k}} t}) \hat{e}_{\alpha_{\vec{k}}}, \quad (2.4.11)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\vec{k}}}{2\epsilon_0 V}} \sum_{\alpha_{\vec{k}}=1}^2 (a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} U(\vec{r}, \vec{k}) e^{-i\omega_{\vec{k}} t} + a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}}^\dagger U^*(\vec{r}, \vec{k}) e^{i\omega_{\vec{k}} t}) \hat{e}_{\alpha_{\vec{k}}}. \quad (2.4.12)$$

2.5. Interacción radiación materia - Interacción dipolar

El hamiltoniano que describe la interacción de un sistema de partículas cargadas de masa m_j y carga q_j con un campo electromagnético, utilizando el Gauge de Coulomb (2.1.11) es:

$$H = H_c + \sum_j \left[\frac{1}{2m_j} (\vec{P}_j + q_j \vec{A}(\vec{r}_j, t))^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right], \quad (2.5.1)$$

dónde H_c es el hamiltoniano del campo libre y V el potencial de interacción entre las cargas. Veamos que al expandir los términos en la sumatoria obtenemos

$$\begin{aligned} H &= H_c + \sum_j \left[\frac{1}{2m_j} \left(P_j^2 + q_j \vec{P}_j \cdot \vec{A}(\vec{r}_j, t) + q_j \vec{A}(\vec{r}_j, t) \cdot \vec{P}_j + q_j^2 A^2(\vec{r}_j, t) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right], \\ H &= H_a + H_c + \sum_j \frac{1}{2m_j} \left(q_j \vec{P}_j \cdot \vec{A}(\vec{r}_j, t) + q_j \vec{A}(\vec{r}_j, t) \cdot \vec{P}_j + q_j^2 A^2(\vec{r}_j, t) \right), \end{aligned} \quad (2.5.2)$$

donde H_a es el hamiltoniano que describe el sistema de partículas cargadas en ausencia de campo. El término restante es entonces el potencial de interacción partículas-campo más general posible, que puede organizarse de modo que:

$$H_{int} = \sum_j \frac{q_j}{2m_j} (\vec{P}_j \cdot \vec{A}(\vec{r}_j, t) + \vec{A}(\vec{r}_j, t) \cdot \vec{P}_j) + \sum_j \frac{q_j^2}{2m_j} A^2(\vec{r}_j, t). \quad (2.5.3)$$

Dado que el término $\vec{P}_j \cdot \vec{A}(\vec{r}_j, t)$ es en el fondo el operador diferencial que llevará a la condición de transversalidad del Gauge de Coulomb(2.1.11), el término puede reemplazarse por $\vec{A}(\vec{r}_j, t) \cdot \vec{P}_j$. Además, el segundo término proporcional a $A^2(\vec{r}_j, t)$ puede despreciarse ya que los efectos de doble absorción y doble emisión son muy pequeños comparados con los de absorción y emisión única, típicamente hasta 4 ordenes de magnitud más pequeños [SZ99], por lo tanto

$$H_{int} = \sum_j \frac{q_j}{m_j} \vec{A}(\vec{r}_j, t) \cdot \vec{P}_j. \quad (2.5.4)$$

Reemplazando (2.4.11) obtendremos la expresión final

$$H_{int} = \sum_j \frac{q_j}{m_j} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{i\omega_{\vec{k}}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\vec{k}}}{2\epsilon_0 V}} \sum_{\alpha_{\vec{k}}=1}^2 \left(a_{\vec{k}, \alpha_{\vec{k}}} U(\vec{r}_j, \vec{k}) e^{-i\omega_{\vec{k}} t} - a_{\vec{k}, \alpha_{\vec{k}}}^\dagger U^*(\vec{r}_j, \vec{k}) e^{i\omega_{\vec{k}} t} \right) \hat{\epsilon}_{\alpha_{\vec{k}}} \cdot \vec{P}_j. \quad (2.5.5)$$

El término $\hat{\epsilon}_{\alpha_{\vec{k}}} \cdot \vec{P}_j$ corresponde a la proyección del momentum lineal del átomo j -ésimo sobre la dirección $\alpha_{\vec{k}}$ de polarización del campo, es decir:

$$\hat{\epsilon}_{\alpha_{\vec{k}}} \cdot \vec{P}_j = P_{j, \alpha_{\vec{k}}}. \quad (2.5.6)$$

Como $P_{j, \vec{k}}$ debe cumplir las relaciones canónicas con el respectivo operador de posición, se tendrá que

$$[r_{j, \alpha_{\vec{k}}}, P_{j, \alpha_{\vec{k}}}] = i\hbar, \quad (2.5.7)$$

por lo que podemos reescribirlo de modo tal que:

$$P_{j, \alpha_{\vec{k}}} = \frac{1}{2i\hbar} [r_{j, \alpha_{\vec{k}}}, P_{j, \alpha_{\vec{k}}}^2] = \frac{1}{2i\hbar} [r_{j, \alpha_{\vec{k}}}, P_j^2] = \frac{m_j}{i\hbar} [r_{j, \alpha_{\vec{k}}}, H_a], \quad (2.5.8)$$

donde H_a es el término del hamiltoniano que describe al sistema de partículas cargadas en ausencia de campo de (2.5.2). Ahora reemplazando (2.5.8) en (2.5.5) obtendremos

$$H_{int} = \sum_j q_j \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\hbar\omega_{\vec{k}}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\vec{k}}}{2\epsilon_0 V}} \sum_{\alpha_{\vec{k}}=1}^2 \left(a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} U(\vec{r}_j, \vec{k}) e^{-i\omega_{\vec{k}}t} - a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}}^\dagger U^*(\vec{r}_j, \vec{k}) e^{i\omega_{\vec{k}}t} \right) [H_a, r_{j,\alpha_{\vec{k}}}] . \quad (2.5.9)$$

A continuación consideremos el caso de emisión de un fotón con vector \vec{k} y polarización $\alpha_{\vec{k}}$ al pasar entre dos autoestados atómicos $|A\rangle \rightarrow |B\rangle$. La probabilidad de que este suceso ocurra está mediada por el elemento de matriz

$$\langle B, n_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} + 1 | H_{int} | A, n_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} \rangle = \frac{\omega_{AB}}{\omega_{\vec{k}}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\vec{k}}(n_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} + 1)}{2\epsilon_0 V}} e^{i\omega_{\vec{k}}t} \sum_j q_j \langle B | U^*(\vec{r}_j, \vec{k}) r_{j,\alpha_{\vec{k}}} | A \rangle , \quad (2.5.10)$$

donde $\omega_{AB} = \frac{E_A - E_B}{\hbar}$. Del mismo modo un proceso de absorción en una transición del tipo $|B\rangle \rightarrow |A\rangle$ estará mediado por:

$$\langle A, n_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} - 1 | H_{int} | B, n_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} \rangle = \frac{\omega_{AB}}{\omega_{\vec{k}}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\vec{k}}n_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}}}{2\epsilon_0 V}} e^{-i\omega_{\vec{k}}t} \sum_j q_j \langle A | U(\vec{r}_j, \vec{k}) r_{j,\alpha_{\vec{k}}} | B \rangle . \quad (2.5.11)$$

La función exponencial (2.1.26) puede ser expandida como serie de Taylor de la forma:

$$U(\vec{r}, \vec{k}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 1 + i\vec{k}\cdot\vec{r} + \frac{1}{2}(i\vec{k}\cdot\vec{r})^2 + \dots \quad (2.5.12)$$

donde debido a que la longitud de onda del modo está relacionada con la magnitud del vector \vec{k} como $\lambda_{\vec{k}} = 2\pi/|\vec{k}|$. Si consideramos la aproximación de onda larga donde

$$\lambda_{\vec{k}} \gg R_{atom} , \quad (2.5.13)$$

la función exponencial puede aproximarse a distintos ordenes de \vec{r} , en particular a orden 0 obtendremos la aproximación dipolar, que para sistemas con longitudes de onda en el rango visible $\lambda \sim 400nm - 700nm$ y $R_{atom} \sim 0.1nm$ contendrá la suficiente información de la interacción.

Bajo aproximación dipolar las probabilidades de emisión y absorción toman la forma de:

$$\langle B, n_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} + 1 | H_{int} | A, n_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\vec{k}}(n_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} + 1)}{2\epsilon_0 V}} e^{i\omega_{\vec{k}}t} \sum_j q_j \langle B | r_{j,\alpha_{\vec{k}}} | A \rangle , \quad (2.5.14)$$

$$\langle A, n_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} - 1 | H_{int} | B, n_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\vec{k}}n_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}}}{2\epsilon_0 V}} e^{-i\omega_{\vec{k}}t} \sum_j q_j \langle A | r_{j,\alpha_{\vec{k}}} | B \rangle , \quad (2.5.15)$$

donde por conservación de la energía, la frecuencia del fotón absorbido o emitido puede aproximarse a la frecuencia del gap de energía entre los estados A y B , es decir, las frecuencias $\omega_{AB} \sim \omega_{\vec{k}}$. Este resultado indica que bajo aproximación dipolar, los elementos de matriz de H_{int} pueden calcularse de dos maneras y su resultado será el mismo, dado que la dependencia de \vec{r}_j está completamente suprimida con $U(\vec{r}_j, \vec{k}) \approx 1$

$$H_{int} = \sum_j \frac{q_j}{m_j} \vec{A}(t) \cdot \vec{P}_j = \sum_j q_j \vec{E}(t) \cdot \vec{r}_j = \vec{\mu} \cdot \vec{E}(t) , \quad (2.5.16)$$

donde $\vec{\mu}$ es el operador vectorial de dipolo eléctrico, que en capítulos posteriores será discutido a mayor profundidad.

2.6. Aproximación de onda rotante y hamiltoniano de Jaynes-Cummings

Consideramos un hamiltoniano que contiene la información de la interacción de un sistema atómico y campo electromagnético bajo interacción dipolar de la forma:

$$H = H_a + H_c + \vec{\mu} \cdot \vec{E}(t), \quad (2.6.1)$$

suponiendo que el sistema atómico puede aproximarse a un sistema de dos niveles, H_a puede ser descrito en términos de dos autoestados de energía $|g\rangle$ y $|e\rangle$ de modo que con el operador escalera definido como $\sigma = |g\rangle\langle e|$, H_a tomara la forma:

$$H_a = \hbar\omega_a \sigma^\dagger \sigma, \quad (2.6.2)$$

dado que el operador de dipolo tiene la forma de

$$\vec{\mu} = \sum_j q_j \vec{r}_j. \quad (2.6.3)$$

Según las simetrías del sistema podemos determinar los elementos de matriz del dipolo en la base de autoestados de H_a . En particular para un sistema con simetría axial el operador de dipolo tendrá la forma:

$$\vec{\mu} = \begin{bmatrix} 0 & \mu_{12} \\ \mu_{12} & 0 \end{bmatrix} \hat{e}_\mu. \quad (2.6.4)$$

Reemplazando las expresiones (2.6.4) y (2.4.12) en (2.5.16) obtendremos la expresión en el cuadro de Schrödinger:

$$H_{int} = \sum_{\vec{k}} \mu_{12} E_{0,\vec{k}} \sum_{\alpha_{\vec{k}}=1}^2 (\sigma + \sigma^\dagger) (a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}} + a_{\vec{k},\alpha_{\vec{k}}}^\dagger) \hat{e}_\mu \cdot \hat{e}_{\alpha_{\vec{k}}}, \quad (2.6.5)$$

que considera el campo conformado por todos los posibles modos \vec{k} y todas sus direcciones de polarización. A continuación, suponiendo que el campo es monomodo con frecuencia ω y polarizado linealmente en la misma dirección del vector de dipolo \hat{e}_μ , el hamiltoniano de interacción se reduce a

$$H_{int} = \hbar g (\sigma + \sigma^\dagger) (a + a^\dagger), \quad (2.6.6)$$

donde $g = \mu_{12} E_0 / \hbar$ es la frecuencia de interacción dipolar. Ahora, analizando el cuadro de interacción donde $H_0 = H_a + H_c$ el hamiltoniano de interacción tendrá la forma de:

$$\tilde{H}_{int} = \hbar g (\sigma e^{-i\omega_a t} + \sigma^\dagger e^{i\omega_a t}) (a e^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t}), \quad (2.6.7)$$

que tendrá términos proporcionales a las exponenciales $e^{\pm i(\omega_a - \omega)t}$ y $e^{\pm i(\omega_a + \omega)t}$. A nivel dipolar el acople del campo de radiación al sistema atómico debe ser tal que las frecuencias estén cerca de la resonancia lo que implica que $|\omega_a - \omega| \ll \omega_a + \omega$ y dentro de los términos exponenciales corresponderán a oscilaciones a una escala de tiempo más lenta y dominarán completamente la dinámica. Sin embargo, sus contribuciones están mediadas a su vez por la frecuencia de acople g , por lo que en el caso de que $g \ll \omega_a + \omega$ las contribuciones de la suma de frecuencia estarán completamente perdidas en las contribuciones de la resta de frecuencias. Esta aproximación se le conoce como la aproximación de onda rotante y convierte el hamiltoniano de interacción en el cuadro de interacción como:

$$\tilde{H}_{int} = \hbar g (\sigma a^\dagger e^{-i(\omega_a - \omega)t} + \sigma^\dagger a e^{i(\omega_a - \omega)t}), \quad (2.6.8)$$

y de vuelta al cuadro de Schrödinger obtenemos el hamiltoniano conocido como el hamiltoniano de Jaynes-Cummings

$$H_{JC} = \hbar g (\sigma a^\dagger + \sigma^\dagger a), \quad (2.6.9)$$

que en resumen es un hamiltoniano de interacción radiación materia bajo aproximación dipolar, campo monomodo y onda rotante [JC63; SK93]. En el caso del campo clásico, es decir, no cuantizado, el hamiltoniano es dependiente del tiempo y recibe el nombre de hamiltoniano de Rabi:

$$H_R = \hbar\Omega(\sigma e^{i\omega t} + \sigma^\dagger e^{-i\omega t}), \quad (2.6.10)$$

donde el símbolo $\Omega = \mu_{12}E_0/\hbar$ posee el mismo significado que g pero se diferencia para indicar el campo clásico y no cuantizado.

Capítulo 3

Sistemas cuánticos abiertos

Dado que los sistemas físicos inevitablemente están conectados al mundo exterior, es indispensable modelar estas interacciones mediante un formalismo matemático lo más efectivo y real posible [BP02]. En los sistemas abiertos, nuestro interés se centra en un pequeño subsistema que interactúa con el resto de componentes del sistema, al cual llamaremos entorno o reservorio, debido a la complejidad del entorno, es indispensable utilizar formalismos estadísticos que aproximen su contribución al sistema de interés. Los sistemas cuánticos son afectados por la disipación y decoherencia, de hecho, muchos de los efectos más famosos de la teoría deben modelarse mediante estos formalismos, tal es el caso de la emisión espontánea en sistemas atómicos y la decoherencia de los estados de luz, y particularmente en la óptica no lineal, son estos efectos los que enriquecen la física detrás de los fenómenos de absorción y dispersión de luz [DH14].

3.1. Entornos y reservorios

En la dinámica de un sistema abierto existen múltiples grados de libertad asociados al entorno en los cuales no estamos interesados, pues centramos nuestra atención en una porción pequeña del sistema, esta región de interés y sus alrededores las llamaremos el sistema y el reservorio respectivamente. Es usual que se le atribuya al reservorio los efectos de pérdida y decoherencia, sin embargo, también pueden atribuirles efectos de bombeo (inyección de energía) e incluso de medida.

Para poder promediar los efectos del reservorio sobre un sistema y poder centrar nuestra atención sobre el mismo, debemos considerar un reservorio en equilibrio térmico a temperatura finita T , cuyo estado ρ corresponde a un estado de máxima entropía

$$\rho \propto e^{-H/k_B T}, \quad (3.1.1)$$

donde H es el hamiltoniano total del entorno y k_B la constante Boltzmann. El hamiltoniano, por simpleza, puede ser descrito como múltiples modos no interactuantes $H = \sum_k H_k$ transformando a ρ en

$$\rho = \prod_k Z_k^{-1} e^{-H_k/k_B T} = \prod_k \rho_k, \quad (3.1.2)$$

donde Z_k es la función partición del k -ésimo modo, que cumple su rol de normalizar las trazas $\text{Tr}[\rho_k] = 1$, utilizando la base propia de H_k podemos ver las componentes ρ_k y Z_k como:

$$\rho_k = \sum_{mn} \rho_{k,mn} |m_k\rangle \langle n_k| = Z_k^{-1} \sum_n e^{-E_{k,n}/k_B T} |n_k\rangle \langle n_k|, \quad (3.1.3)$$

$$Z_k = \sum_n e^{-E_{k,n}/k_B T}. \quad (3.1.4)$$

Si consideramos el caso particular de un reservorio de modos bosónicos descritos por $H_k = \hbar\omega_k a_k^\dagger a_k$, donde ω_k es la frecuencia asociada a cada uno. Así, podemos evaluar la función partición que estará relacionada con el número medio de excitaciones térmicas de cada modo

$$Z_k = \sum_n e^{-\hbar\omega_k n/k_B T} = \frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega_k/k_B T}}, \quad (3.1.5)$$

$$n_{th}(\omega_k, T) = \text{Tr}[\rho_k a_k^\dagger a_k] = Z_k^{-1} \sum_n n e^{-\hbar\omega_k n/k_B T} = -\frac{k_B T}{\hbar Z_k} \frac{\partial Z_k}{\partial \omega_k} = \frac{1}{e^{\hbar\omega_k/k_B T} - 1}. \quad (3.1.6)$$

Como era de esperarse n_{th} se corresponde con la expresión del número de excitaciones en equilibrio térmico de la estadística característica de Bose-Einstein.

3.2. Ecuación Maestra Born-Markov

Consideremos un sistema bipartito compuesto por un sistema de interés y un reservorio descrito por el hamiltoniano

$$H = H_S + H_R + \alpha H_{SR}, \quad (3.2.1)$$

con H_S y H_R los hamiltonianos libres del sistema y el reservorio respectivamente y H_{SR} el hamiltoniano de interacción entre sistema-reservorio (SR), el cual analizaremos más adelante. La constante α es una constante que nos ayudará a entender los órdenes de interacción y que más adelante desaparecerá siendo igualada a 1.

La ecuación dinámica para el operador densidad total del sistema bipartito SR es:

$$i\hbar\dot{\rho} = [H, \rho] = [H_S + H_R + \alpha H_{SR}, \rho], \quad (3.2.2)$$

la cual puede reducirse con la transformación unitaria al cuadro de interacción entre los subsistemas $\tilde{\rho} = U\rho U^\dagger$ con $U = e^{i(H_S + H_R)t/\hbar}$. El resultado del cambio de cuadro es:

$$i\hbar\dot{\tilde{\rho}} = \alpha[\tilde{H}_{SR}, \tilde{\rho}], \quad (3.2.3)$$

con $\tilde{H}_{SR} = UH_{SR}U^\dagger$ que es un operador que puede depender del tiempo debido a la representación. Siendo conscientes de esta dependencia la integral sobre la expresión (3.2.3) entre dos tiempos $t_0 = 0$ y t da como resultado

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}(0) + \left(\frac{\alpha}{i\hbar}\right) \int_0^t dt' [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t')], \quad (3.2.4)$$

donde el segundo término de la derecha no es una integral trivial, sin embargo nos será útil si reemplazamos en la ecuación (3.2.3) teniendo cuidado con las dependencias temporales de cada término de la ecuación

$$\dot{\tilde{\rho}}(t) = \left(\frac{\alpha}{i\hbar}\right) [\tilde{H}_{SR}(t), \tilde{\rho}(0)] + \left(\frac{\alpha}{i\hbar}\right)^2 \left[\tilde{H}_{SR}(t), \int_0^t dt' [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t')] \right]. \quad (3.2.5)$$

Dado que el interés se centra en el sistema y no en el reservorio podemos trazar parcialmente la matriz densidad (en cualquier representación) sobre todos los grados de libertad del reservorio $\text{Tr}_R[\rho(t)] = \rho_S(t)$, esto nos permite aislar los grados de libertad del sistema sobre los reservorios. La primera aproximación, llamada la aproximación de Born, consiste en considerar que el estado del reservorio $\rho_R(t)$ no cambia en el tiempo y es separable para todo tiempo t . Aproximación que podemos imponer razonablemente porque, sabemos que el reservorio es más grande y contiene considerablemente más grados de libertad que el sistema de interés. Es decir,

$$\rho(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_R, \quad (3.2.6)$$

de este modo trazando parcialmente sobre el reservorio la ecuación (3.2.5) obtendremos

$$\dot{\rho}_S(t) = \left(\frac{\alpha}{i\hbar}\right) \text{Tr}_R \left[[\tilde{H}_{SR}(t), \tilde{\rho}(0)] \right] + \left(\frac{\alpha}{i\hbar}\right)^2 \text{Tr}_R \left\{ \left[\tilde{H}_{SR}(t), \int_0^t dt' [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t')] \right] \right\}, \quad (3.2.7)$$

en la cual el primer término de la derecha puede ser anulado mediante la elección de la condición inicial $\rho(0)$, esto nos permitirá analizar $\tilde{\rho}_S(t)$ integrando (3.2.7) entre t' y t obteniendo la ecuación

$$\tilde{\rho}_S(t) - \tilde{\rho}_S(t') = \left(\frac{\alpha}{i\hbar}\right)^2 \int_{t'}^t dt'' \text{Tr}_R \left\{ \left[\tilde{H}_{SR}(t''), \int_0^{t''} dt''' [\tilde{H}_{SR}(t'''), \tilde{\rho}(t''')] \right] \right\}. \quad (3.2.8)$$

Expresión que es sumamente reveladora pues la diferencia entre $\tilde{\rho}_S(t)$ y $\tilde{\rho}_S(t')$ es del orden de α^2 por lo que podríamos aproximar a $\tilde{\rho}_S(t') \approx \tilde{\rho}_S(t)$ para tiempos cercanos. Esta es la aproximación usada en un proceso Markoviano, la cual no altera significativamente la integral en el segundo término de la expresión (3.2.7), dando como resultado para $\alpha = 1$ un resultado conocido como la ecuación maestra de Born-Markov

$$\dot{\rho}_S(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \text{Tr}_R \left\{ \left[\tilde{H}_{SR}(t), \int_0^t dt' [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t')] \right] \right\}. \quad (3.2.9)$$

3.3. Ecuación Maestra de Lindblad

Hasta ahora las aproximaciones han sido sumamente generales, debido al tamaño y la robustez de los reservorios, esto genera que la ecuación (3.2.9) todavía no tenga una estructura sencilla, pues si reescribimos de modo que:

$$\dot{\rho}_S(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \text{Tr}_R \left\{ \left[\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t')] \right] \right\}, \quad (3.3.1)$$

implica que el lado derecho de la ecuación depende de las correlaciones a distintos tiempos de diferentes observables del reservorio, por esto es necesario especificar algunas características del mismo con el fin de simplificar la expresión.

Consideremos la interacción sistema-reservorio bajo la aproximación de onda rotante, de tal modo que:

$$H_{SR} = \hbar(SR^\dagger + S^\dagger R), \quad (3.3.2)$$

donde S y R son operadores escalera del sistema y reservorio respectivamente y en el cuadro de interacción con las dependencias temporales, tendremos que

$$\tilde{H}_{SR}(t) = \hbar(\tilde{S}(t)\tilde{R}^\dagger(t) + \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{R}(t)). \quad (3.3.3)$$

Con este Hamiltoniano procedemos a calcular el doble conmutador $\left[\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t')] \right]$ presente en la integral de la ecuación (3.3.1), no sin antes recordar que $\rho(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_R$. Empezaremos calculando el conmutador interno $[\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t')]$:

$$\begin{aligned} [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t')] &= \hbar[\tilde{S}(t')\tilde{R}^\dagger(t') + \tilde{S}^\dagger(t')\tilde{R}(t'), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R] \\ &= \hbar\{\tilde{S}(t')\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R - \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R\tilde{S}(t')\tilde{R}^\dagger(t') \\ &\quad + \tilde{S}^\dagger(t')\tilde{R}(t')\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R - \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{R}(t')\}, \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

el cual podemos usar para calcular el conmutador final:

$$\begin{aligned}
\left[\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t)] \right] &= \hbar \left[\tilde{S}(t)\tilde{R}^\dagger(t) + \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{R}(t), [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t)] \right] \\
&= \hbar^2 \{ \tilde{S}(t)\tilde{R}^\dagger(t)\tilde{S}(t')\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R - \tilde{S}(t')\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R\tilde{S}(t)\tilde{R}^\dagger(t) \\
&\quad - \tilde{S}(t)\tilde{R}^\dagger(t)\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R\tilde{S}(t')\tilde{R}^\dagger(t') + \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R\tilde{S}(t')\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{S}(t)\tilde{R}^\dagger(t) \\
&\quad + \tilde{S}(t)\tilde{R}^\dagger(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{R}(t')\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R - \tilde{S}^\dagger(t')\tilde{R}(t')\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R\tilde{S}(t)\tilde{R}^\dagger(t) \\
&\quad - \tilde{S}(t)\tilde{R}^\dagger(t)\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{R}(t') + \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{R}(t')\tilde{S}(t)\tilde{R}^\dagger(t) \\
&\quad + \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{R}(t)\tilde{S}(t')\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R - \tilde{S}(t')\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{R}(t) \\
&\quad - \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{R}(t)\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R\tilde{S}(t')\tilde{R}^\dagger(t') + \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R\tilde{S}(t')\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{R}(t) \\
&\quad + \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{R}(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{R}(t')\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R - \tilde{S}^\dagger(t')\tilde{R}(t')\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{R}(t) \\
&\quad - \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{R}(t)\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{R}(t') + \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{R}(t')\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{R}(t) \}, \tag{3.3.5}
\end{aligned}$$

el cual claramente no tiene una forma sencilla a primera vista, pero teniendo en cuenta que los operadores de diferentes subsistemas conmutan y que las trazas son operaciones cíclicas, para calcular la traza parcial sobre el reservorio, podemos definir las siguientes funciones de correlación auxiliares que facilitarán la escritura:

$$\begin{aligned}
F(t, t') &= \text{Tr}_R[\tilde{R}^\dagger(t)\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{\rho}_R], \\
G(t, t') &= \text{Tr}_R[\tilde{R}(t)\tilde{R}(t')\tilde{\rho}_R], \\
I(t, t') &= \text{Tr}_R[\tilde{R}^\dagger(t)\tilde{R}(t')\tilde{\rho}_R], \\
J(t, t') &= \text{Tr}_R[\tilde{R}(t)\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{\rho}_R]. \tag{3.3.6}
\end{aligned}$$

Trazando parcialmente el conmutador (3.3.5) obtendremos:

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_R \left\{ \left[\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t)] \right] \right\} &= \hbar^2 \{ \tilde{S}(t)\tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)F(t, t') - \tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t)F(t, t') \\
&\quad - \tilde{S}(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')F(t', t) + \tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')\tilde{S}(t)F(t', t) \\
&\quad + \tilde{S}(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)I(t, t') - \tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t)I(t, t') \\
&\quad - \tilde{S}(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t')J(t', t) + \tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{S}(t)J(t', t) \\
&\quad + \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)J(t, t') - \tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t)J(t, t') \\
&\quad - \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')I(t', t) + \tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')\tilde{S}^\dagger(t)I(t', t) \\
&\quad + \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)G(t, t') - \tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t)G(t, t') \\
&\quad - \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t')G(t', t) + \tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{S}^\dagger(t)G(t', t) \}, \tag{3.3.7}
\end{aligned}$$

finalmente podemos considerar el reservorio compuesto por modos bosónicos continuos de la forma:

$$H_R = \int_0^\infty d\omega \hbar \omega b^\dagger(\omega)b(\omega), \tag{3.3.8}$$

con los operadores R en el cuadro de Schrödinger representados por

$$R = \int_0^\infty d\omega g(\omega)b(\omega), \tag{3.3.9}$$

y en el cuadro de interacción como:

$$\tilde{R}(t) = \int_0^\infty d\omega g(\omega)b(\omega)e^{-i\omega t}. \tag{3.3.10}$$

La función $g(\omega)$ la analizaremos más adelante, pero podemos considerarla como una densidad de frecuencias del reservorio, dado que algunos modos del baño bosónico se acoplarán mejor o peor al sistema de interés.

Comencemos analizando las funciones $F(t, t')$ y $G(t, t')$, en el caso de que ρ_R es un estado de equilibrio térmico de la forma (3.1.2) con una productoria continua sobre todas las frecuencias posibles, de esta forma los operadores escalera $b(\omega)$ y $b^\dagger(\omega)$ actúan únicamente sobre la componente $\rho_R(\omega)$ de tal forma que:

$$\begin{aligned} b(\omega)\rho_R(\omega) &= Z(\omega)^{-1} \sum_n e^{-\hbar\omega n/k_B T} \sqrt{n} |n_\omega - 1\rangle \langle n_\omega|, \\ b^\dagger(\omega)\rho_R(\omega) &= Z(\omega)^{-1} \sum_n e^{-\hbar\omega n/k_B T} \sqrt{n+1} |n_\omega + 1\rangle \langle n_\omega|, \end{aligned} \quad (3.3.11)$$

con esta expresión es fácil ver que al trazar parcialmente una o múltiples aplicaciones de $b(\omega)$ sobre $\rho_R(\omega)$ son iguales a cero por lo que $F(t, t') = 0$ y $G(t, t') = 0$ y reducirá considerablemente la expresión (3.3.7).

Para las funciones $I(t, t')$ y $J(t, t')$ teniendo en cuenta que el conmutador $[b(\omega), b^\dagger(\omega')] = \delta(\omega - \omega')$ y la aplicación de los operadores sobre la componente $\rho_R(\omega)$ tendremos:

$$\begin{aligned} b^\dagger(\omega)b(\omega)\rho_R(\omega) &= Z(\omega)^{-1} \sum_n e^{-\hbar\omega n/k_B T} n |n_\omega\rangle \langle n_\omega|, \\ b(\omega)b^\dagger(\omega)\rho_R(\omega) &= Z(\omega)^{-1} \sum_n e^{-\hbar\omega n/k_B T} (n+1) |n_\omega\rangle \langle n_\omega|, \end{aligned} \quad (3.3.12)$$

por lo que al trazar parcialmente y recordando la expresión (3.1.6) nos dará las relaciones:

$$\begin{aligned} \text{Tr}_R[b^\dagger(\omega)b(\omega')\rho_R] &= n_{th}(\omega, T)\delta(\omega - \omega'), \\ \text{Tr}_R[b(\omega)b^\dagger(\omega')\rho_R] &= [n_{th}(\omega, T) + 1]\delta(\omega - \omega'), \end{aligned} \quad (3.3.13)$$

y finalmente nos llevará a las expresiones

$$\begin{aligned} I(t, t') &= \int_0^\infty d\omega |g(\omega)|^2 n_{th}(\omega, T) e^{i\omega(t-t')}, \\ J(t, t') &= \int_0^\infty d\omega |g(\omega)|^2 (n_{th}(\omega, T) + 1) e^{-i\omega(t-t')}. \end{aligned} \quad (3.3.14)$$

En este punto es conveniente analizar el término $n_{th}(\omega, T)$ el cual puede aproximarse a una función que no depende de ω , ya que en el límite de temperaturas finitas, i.e, temperaturas del orden $\sim 300K$, $k_B T \sim 1meV$. Las excitaciones térmicas de los modos bosónicos $n_{th}(\omega, T) \approx n_{th}(T) \sim 0$ sin importar el modo bosónico acoplado al sistema, lo que nos deja claro que los términos asociados a $I(t, t')$ tienen relación con los bombeos y los términos relacionados con $J(t, t')$ con las pérdidas. La función $|g(\omega)|^2$ por su parte está relacionada con la distribución de frecuencias de los acoples del sistema con los modos bosónicos del reservorio, en estos casos es común utilizar una distribución de Cauchy de la forma:

$$|g(\omega)|^2 = \frac{1}{\pi\gamma} \frac{\gamma^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2}, \quad (3.3.15)$$

donde ω_0 es la frecuencia de resonancia del acople entre sistema y reservorio por lo que debe estar relacionada con la frecuencia característica de los operadores escalera del sistema en el cuadro de interacción de forma que:

$$\tilde{S}(t) = S e^{-i\omega_0 t}. \quad (3.3.16)$$

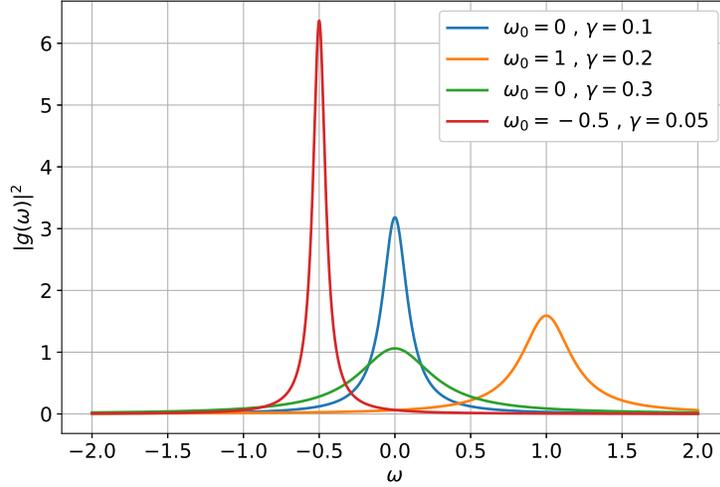


Figura 3.1: Distribución de Cauchy la cual presenta un pico de altura $\frac{1}{\pi\gamma}$ centrado en ω_0 .

Las integrales (3.3.14) quedarán reducidas a una función de los parámetros de la distribución ω_0 y γ los cuales como se observa en la figura 3.1 están relacionados con la frecuencia del modo bosónico óptimo para el acople entre sistema y reservorio, según el tipo de proceso descrito por los operadores S . En este punto cabe resaltar que debido a que en la ecuación maestra, \tilde{H}_{SR} descrito por (3.2.1) es un hamiltoniano bajo la aproximación de onda rotante. El operador S debe ser necesariamente proporcional a un operador de bajada del sistema con unidades de s^{-1} . De este modo es que la exponencial en las representaciones (3.3.16) gana su signo negativo estricto debido a que $\omega_0 > 0$. Sin embargo es posible ampliar los intervalos de integración gracias a la simetría de $|g(\omega)|^2$ respecto a ω_0 desde $-\infty$ a ∞ , además teniendo en consideración que $t' \leq t$, tendrá lugar a:

$$\begin{aligned}
 I(t, t') &= n_{th}(T) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega |g(\omega)|^2 e^{i\omega(t-t')} = n_{th}(T) e^{-(t-t')(\gamma - i\omega_0)}, \\
 I(t', t) &= n_{th}(T) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega |g(\omega)|^2 e^{-i\omega(t-t')} = n_{th}(T) e^{-(t-t')(\gamma + i\omega_0)}, \\
 J(t, t') &= (n_{th}(T) + 1) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega |g(\omega)|^2 e^{-i\omega(t-t')} = [n_{th}(T) + 1] e^{-(t-t')(\gamma + i\omega_0)}, \\
 J(t', t) &= (n_{th}(T) + 1) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega |g(\omega)|^2 e^{i\omega(t-t')} = [n_{th}(T) + 1] e^{-(t-t')(\gamma - i\omega_0)}. \tag{3.3.17}
 \end{aligned}$$

Finalmente podemos reemplazar los resultados de (3.3.16) y (3.3.17) en los conmutadores trazados parcialmente (3.3.7) para obtener:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}_R \left\{ \left[\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t)] \right] \right\} &= \hbar^2 e^{-\gamma(t-t')} \{ [n_{th}(T)] (S S^\dagger \tilde{\rho}_S(t) - 2 S^\dagger \tilde{\rho}_S(t) S + \tilde{\rho}_S(t) S S^\dagger) + \\
 &\quad [n_{th}(T) + 1] (S^\dagger S \tilde{\rho}_S(t) - 2 S \tilde{\rho}_S(t) S^\dagger + \tilde{\rho}_S(t) S^\dagger S) \}. \tag{3.3.18}
 \end{aligned}$$

Al incluir este resultado en la ecuación maestra (3.3.1) la integral únicamente alterará la parte exponencial dando como resultado:

$$\int_0^t dt' e^{-\gamma(t-t')} = \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma} \approx \frac{1}{\gamma}, \tag{3.3.19}$$

en el cual el segundo término tenderá a desaparecer a medida que pase el tiempo, lo que indicara un periodo transitorio que no afectará en mayor medida la evolución y puede descartarse para simplificar aún más la expresión. Reemplazar estos resultados sobre la expresión (3.3.1) dará como resultado a la ecuación maestra de Lindblad en el cuadro de interacción

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_S(t) = & -\frac{1}{\gamma} [n_{th}(T)(SS^\dagger \tilde{\rho}_S(t) - 2S^\dagger \tilde{\rho}_S(t)S + \tilde{\rho}_S(t)SS^\dagger) + \\ & (n_{th}(T) + 1)(S^\dagger S \tilde{\rho}_S(t) - 2S \tilde{\rho}_S(t)S^\dagger + \tilde{\rho}_S(t)S^\dagger S)], \end{aligned} \quad (3.3.20)$$

la cual se puede simplificar aún más considerando que $S = \frac{\gamma}{\sqrt{2}}L$ siendo L el operador escalera adimensional del sistema y recordando la definición de anticonmutador

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t) = \gamma [n_{th}(T)(L^\dagger \tilde{\rho}_S(t)L - \frac{1}{2}\{\tilde{\rho}_S(t), LL^\dagger\}) + (n_{th}(T) + 1)(L \tilde{\rho}_S(t)L^\dagger - \frac{1}{2}\{\tilde{\rho}_S(t), L^\dagger L\})], \quad (3.3.21)$$

volviendo al cuadro de Schrödinger, note que en la expresión de la derecha este cambio solo afecta al operador densidad y a la izquierda emergerá el conmutador con el hamiltoniano del sistema. Reorganizando un poco los términos, la ecuación maestra de Lindblad [Alb18] toma la forma final de:

$$\dot{\rho}_S = \frac{1}{i\hbar} [H_S, \rho_S] + \gamma [(n_{th}(T) + 1)(L \rho_S L^\dagger - \frac{1}{2}\{\rho_S, L^\dagger L\}) + n_{th}(T)(L^\dagger \rho_S L - \frac{1}{2}\{\rho_S, LL^\dagger\})]. \quad (3.3.22)$$

Nos damos cuenta que el primer término de la ecuación corresponde a la evolución hamiltoniana usual de un sistema cerrado. El segundo término pesado por γ , está relacionado con el rango de frecuencias de los diferentes modos bosónicos del reservorio, acopladas al sistema. Además γ actúa como la tasa asociada a los procesos de interacción con el reservorio. Estos procesos inducirán dos cambios distinguibles entre sí según la temperatura del reservorio, dado que $n_{th}(T)$ nos indica el número de excitaciones térmicas del reservorio. Según (3.3.22) el primer término no hamiltoniano está relacionado con un proceso disipativo asociado al operador de bajada L y el segundo término a un proceso de bombeo térmico asociado al operador de subida L^\dagger . Es conveniente utilizar la notación de superoperador, llamado también lindbladiano y simbolizado por \mathcal{L} para generalizar a múltiples acoples con el reservorio, de modo que

$$\mathcal{L}[L] = L \rho_S L^\dagger - \frac{1}{2}\{\rho_S, L^\dagger L\}, \quad (3.3.23)$$

$$\dot{\rho}_S = \frac{1}{i\hbar} [H_S, \rho_S] + \sum_{\alpha} \gamma_{\alpha} [(n_{th,\alpha}(T) + 1)\mathcal{L}[L_{\alpha}] + n_{th,\alpha}(T)\mathcal{L}[L_{\alpha}^\dagger]]. \quad (3.3.24)$$

3.4. Decoherencia: Efectos comunes

La ecuación (3.3.24) es sumamente útil para describir todo tipo de procesos disipativos, en particular la segunda ley de la termodinámica indica que todos los sistemas en interacción de la naturaleza tienden a evolucionar a estados donde la entropía se maximiza, llamados usualmente estados de equilibrio térmico. Particularmente los sistemas atómicos presentan una gran variedad de fenómenos que mediante evoluciones hamiltonianas no pueden ser descritos, dado a que la energía del sistema no se mantiene constante, esto indica que existe alguna interacción con agentes externos que están disipando o bombeando energía.

Consideramos inicialmente un sistema atómico de dos niveles descrito por un hamiltoniano de la forma

$$H_S = \hbar \omega_a \sigma^\dagger \sigma, \quad (3.4.1)$$

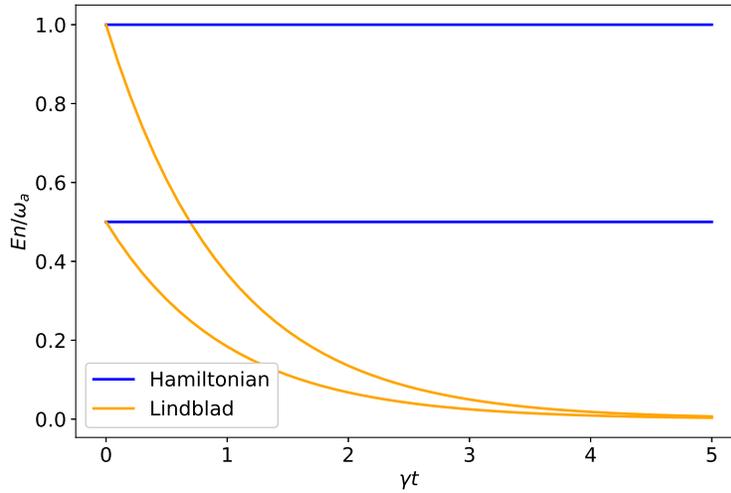


Figura 3.2: Fenómeno de emisión espontánea de sistemas atómicos, podemos observar como la forma hamiltoniana descrita por las curvas azules, no es capaz de describir este fenómeno. Sin embargo, un formalismo de Lindblad, descrito por las curvas naranjas es sumamente efectivo.

donde $\sigma = |g\rangle\langle e|$ es el operador escalera entre los estados base $|g\rangle$ y excitado $|e\rangle$ del átomo. En una evolución de tipo hamiltoniana estos estados son estacionarios y particularmente el estado $|e\rangle$ no puede ser estacionario. La realidad es que el sistema atómico, inevitablemente, terminará por decaer al estado $|g\rangle$ al pasar el tiempo y la evolución hamiltoniana es incapaz de dar cuenta de este fenómeno. Este fenómeno es conocido como emisión espontánea y necesariamente debe ser descrito mediante un acople a un reservorio.

El operador escalera en el cuadro de interacción tiene la forma:

$$\tilde{\sigma} = \sigma e^{-i\omega_a t}, \quad (3.4.2)$$

lo que indica que el acople a los modos bosónicos del reservorio estará pesado por la función

$$|g(\omega)|^2 = \frac{1}{\pi\gamma} \frac{\gamma^2}{(\omega - \omega_a)^2 + \gamma^2}, \quad (3.4.3)$$

generando una ecuación maestra de Lindblad de la forma (3.3.24):

$$\dot{\rho}_S = \frac{1}{i\hbar} [H_S, \rho_S] + \gamma \left[(n_{th}(T) + 1) \mathcal{L}[\sigma] + n_{th}(T) \mathcal{L}[\sigma^\dagger] \right], \quad (3.4.4)$$

dónde el primer término estará asociado al proceso disipativo de la emisión espontánea ([Sak06]) y el segundo término un proceso de bombeo o absorción. Sin embargo, este último es considerablemente menos observable a temperaturas pequeñas, si $k_B T \sim 1$ meV, y las energías propias del sistema son del orden de 1 eV, el número medio de excitaciones térmicas $n_{th} \sim 0$, tal como se describe en la ecuación en el límite de cero temperatura.

La figura 3.2 muestra como la evolución hamiltoniana es incapaz de describir estos fenómenos disipativos pues la línea azul muestra la solución de la parte hamiltoniana sin considerar los efectos de Lindblad para un estado inicial de la forma $|\psi(0)\rangle = |e\rangle$ y $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + |e\rangle)$ respectivamente, mientras la curva naranja, cuando se consideran los efectos de acople al reservorio, muestra el decaimiento exponencial de la energía que describe el proceso de la emisión espontánea, pues al

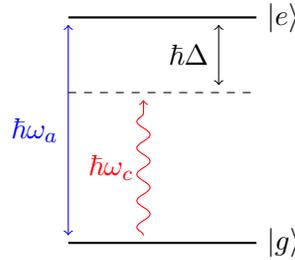


Figura 3.3: Esquema simplificado de un sistema atómico de dos niveles acoplado a un único modo de radiación cuantizada.

descender en un nivel de energía, la forma de (3.3.2) nos indica que se ha emitido energía que ahora hace parte del reservorio.

Otro efecto común de decoherencia surge en la cuantización de el campo electromagnético en una cavidad formada por paredes perfectamente reflectoras. Resulta que no hay tal cosa en la naturaleza como un espejo perfecto, por lo que la energía de la radiación dentro de la cavidad tiende a decaer, el hamiltoniano libre recordamos tiene la forma de un oscilador armónico

$$H_S = \hbar\omega_c a^\dagger a + \frac{1}{2}, \quad (3.4.5)$$

donde ω_c es la frecuencia del modo de radiación y los operadores escalera en el cuadro de interacción toman la forma:

$$\tilde{a} = a e^{-i\omega_c t}, \quad (3.4.6)$$

y la función de distribución de Cauchy tomará la forma

$$|g(\omega)|^2 = \frac{1}{\pi\kappa} \frac{\kappa^2}{(\omega - \omega_c)^2 + \kappa^2}, \quad (3.4.7)$$

así la ecuación maestra que describe el proceso de pérdidas y bombeos a través de las imperfecciones de las superficies reflectivas de la cavidad tomará la forma

$$\dot{\rho}_S = \frac{1}{i\hbar} [H_S, \rho_S] + \kappa \left[(n_{th}(T) + 1) \mathcal{L}[a] + n_{th}(T) \mathcal{L}[a^\dagger] \right]. \quad (3.4.8)$$

3.5. Decoherencia en sistemas fuera de la resonancia

Consideremos un sistema compuesto por un átomo de dos niveles acoplado a radiación cuantizada. El hamiltoniano que describe este tipo de sistemas bajo la aproximación dipolar y de onda rotante un hamiltoniano de Jaynes-Cummings y como se vio en el capítulo anterior tiene la forma:

$$H_S = \hbar\omega_a \sigma^\dagger \sigma + \hbar\omega_c a^\dagger a + \hbar g (\sigma a^\dagger + \sigma^\dagger a), \quad (3.5.1)$$

donde ω_a y ω_c son las frecuencias características y los operadores $\sigma = |e\rangle \langle g|$ y a son operadores de bajada del sistema atómico y la radiación respectivamente, por su parte g es la frecuencia de acople. Este tipo de sistemas puede representarse como se muestra en la figura 3.3, el sistema atómico posee una estructura de dos niveles $|g\rangle$ y $|e\rangle$ y el acople con la radiación inducirá transiciones y superposiciones entre ellos. Sin embargo, en esta sección, consideraremos que no necesariamente el acople entre sistema atómico y radiación es en resonancia, es decir, consideraremos el caso $\omega_a \neq \omega_c$, definiendo un parámetro llamado asintonía o *detuning* de la forma $\Delta = \omega_a - \omega_c$ el cual, debemos resaltar, puede ser positivo o negativo.

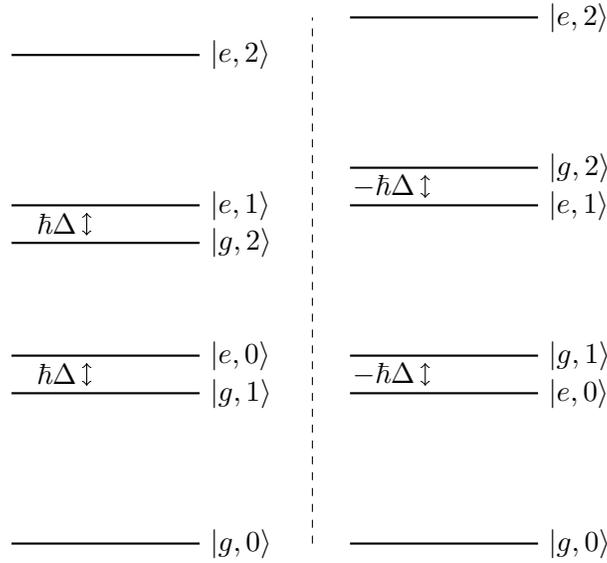


Figura 3.4: Estructura de niveles fuera de resonancia para un sistema de dos niveles acoplado a modos de radiación. A la izquierda el caso para $\Delta > 0$ donde los estados $|e, n\rangle$ tienen mayor energía que los estados $|g, n + 1\rangle$ y a la derecha $\Delta < 0$ donde sucede lo contrario.

Empecemos transformando al cuadro de interacción con $H_0 = \hbar\omega_a\sigma^\dagger\sigma + \hbar\omega_c a^\dagger$, en este caso los autoestados de H_0 serán de la forma $|g, n\rangle$ y $|e, n\rangle$ y tendrán un orden en la escala de energía según el signo de Δ . Por ejemplo, en el caso $\Delta > 0$ la energía asociada a $|g, n + 1\rangle$ será menor que la asociada a $|e, n\rangle$. En la figura 3.4 se esquematiza el orden de energías asociadas a los estados para el caso $\Delta > 0$ a la izquierda y $\Delta < 0$ a la derecha. Un sistema fuera de resonancia puede acoplarse a un baño bosónico bajo la aproximación de onda rotante, primero notamos que el efecto de la no resonancia se evidencia en los estados $|g, n + 1\rangle$ y $|e, n\rangle$. Podemos verificar fácilmente que en el caso $\Delta > 0$, el operador escalera $L = \sigma a^\dagger$ en el cuadro de interacción tendrán la forma:

$$\tilde{L} = \sigma a^\dagger e^{-i\Delta t}, \quad (3.5.2)$$

lo que convertirá la distribución de Cauchy (3.3.15) de acople a modos bosónicos de un reservorio en:

$$|g(\omega)|^2 = \frac{1}{\pi\Gamma} \frac{\Gamma^2}{(\omega - \Delta)^2 + \Gamma^2}. \quad (3.5.3)$$

De este modo para $\Delta > 0$ la ecuación maestra en la forma de Lindblad es:

$$\dot{\rho}_S = \frac{1}{i\hbar}[H_S, \rho_S] + \Gamma \left[(n_{th}(T) + 1)\mathcal{L}[\sigma a^\dagger] + n_{th}(T)\mathcal{L}[\sigma^\dagger a] \right] + \dots, \quad (3.5.4)$$

donde los puntos suspensivos indican que es posible tener otros efectos de decoherencia según las especificaciones físicas del sistema. Del mismo modo para el caso $\Delta < 0$ la ecuación se transforma en:

$$\dot{\rho}_S = \frac{1}{i\hbar}[H_S, \rho_S] + \Gamma' \left[(n_{th}(T) + 1)\mathcal{L}[\sigma^\dagger a] + n_{th}(T)\mathcal{L}[\sigma a^\dagger] \right] + \dots, \quad (3.5.5)$$

Estos efectos surgen en sistemas acoplados fuera de resonancia y es cuanto menos curioso ya que estos efectos desaparecen completamente en los sistemas resonantes. La decoherencia fuera de resonancia se explorará en detalle más adelante pues es una forma natural en que los sistemas fuera de resonancia aumenten o disminuyan su número de excitación como se observa en la figura 3.4.

Capítulo 4

Teoría semiclásica de la respuesta óptica no lineal

En este capítulo se estudiará la teoría de la respuesta óptica de los materiales en un formalismo cuántico, donde la cantidad fundamental será la susceptibilidad, que dependerá de parámetros del material como el momento dipolar eléctrico y tasas de transición de los distintos niveles de energía. La susceptibilidad es una cantidad que caracteriza el nivel de polarizabilidad de un material en respuesta a un campo electromagnético externo [Boy20; DH14], para este caso consideraremos un formalismo cuántico para describir el material y el campo externo en un formalismo clásico. Como se muestra en la figura 4.1 la distribución de carga puede cuantificarse dada la posición que ocupa cada una de las cargas en el espacio, de esta manera el vector de dipolo eléctrico

$$\vec{\mu} = \sum_i q_i \vec{r}_i, \quad (4.0.1)$$

permite cuantificar diferentes efectos de respuesta a estímulos electromagnéticos. Cuánticamente, los vectores posición de cada una de las cargas son operadores que obedecen los principios de la mecánica cuántica. Del mismo modo, el vector de dipolo, cuánticamente posee información según los estados y niveles de energía que posea la distribución de cargas.

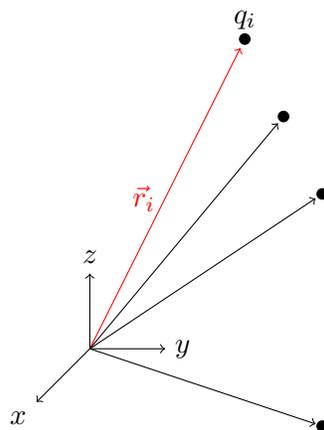


Figura 4.1: Cargas distribuidas en el espacio, los vectores posición a cada carga \vec{r}_i permiten obtener diferentes propiedades ópticas y cuantificar la respuesta a estímulos externos.

4.1. Vector de polarizabilidad y tensor de susceptibilidad

Supongamos que cierta distribución de carga es afectada por un campo eléctrico externo \vec{E} , la interacción con el campo eléctrico generará una fuerza tal que las cargas que pertenecen a cierto material, se redistribuirán como se muestra en la figura 4.2, donde según la dirección del campo eléctrico, las cargas positivas tenderán a moverse en la misma dirección del campo y las cargas negativas en el sentido contrario. Este fenómeno es llamado polarizabilidad y permite redistribuir las cargas presentes en la materia y así generar efectos eléctricos interesantes, sin importar que un material eléctricamente neutro. Esta redistribución afecta, por supuesto, al vector de dipolo $\vec{\mu}$ y la polarizabilidad tendrá relación con sus cambios a nivel infinitesimal de forma que de manera general, el vector de polarizabilidad eléctrica estará dado por

$$\vec{P} = \frac{d\vec{\mu}}{dV} = \rho_b \vec{d}, \quad (4.1.1)$$

donde ρ_b es la densidad de carga ligada en un volumen dV y \vec{d} la posición relativa de las cargas positivas a las cargas negativas.

Dado que el vector de polarizabilidad aparece cuando el material es afectado por un campo externo, estos efectos pueden variar según las distintas propiedades que posea el material, como por ejemplo, sus simetrías y estructura atómica. Para cuantificar los efectos, de manera general, existe una función de respuesta, dada por la expansión en serie de Taylor de cada una de las componentes del vector de polarización P_i , en función de las componentes del campo externo E_j :

$$P_i = \epsilon_0 \left(\sum_i \chi_{ij}^{(1)} E_j + \sum_{jk} \chi_{ijk}^{(2)} E_j E_k + \sum_{jkl} \chi_{ijkl}^{(3)} E_j E_k E_l + \dots + \mathcal{O}(E^n) \right) \quad (4.1.2)$$

donde $\chi^{(n)}$, en general, es un tensor de orden $n + 1$ llamado susceptibilidad, mediante el cual se puede cuantificar la respuesta de un material frente a un estímulo electromagnético externo. Los efectos pueden cuantificarse y clasificarse según el orden del tensor y las direcciones de interés, por ejemplo, la componente $\chi_{ij}^{(1)}$ indicará la respuesta de polarizabilidad a primer orden de un material en dirección i (primer índice) dado un campo externo aplicado en dirección j (segundo índice). Cabe resaltar que los efectos que se evidencian a primer orden son los llamados efectos lineales, mientras que los ordenes superiores serán llamados, efectos no lineales.

A primer orden es interesante notar que la susceptibilidad tiene relación con el índice de refracción, supongamos por un momento que una onda electromagnética incide desde el vacío sobre un medio dieléctrico con permitividad ϵ . Como se muestra en la figura 4.3 la onda transmitida es desviada de su trayectoria original según la ley de Snell además de que según las propiedades dispersivas y de absorción, la onda *frenará* disminuyendo su velocidad de propagación dentro del medio. El índice de refracción es entonces una cantidad adimensional dada por:

$$\eta^2 = \frac{c^2}{v^2} = \frac{\epsilon\mu}{\epsilon_0\mu_0} = \epsilon_r\mu_r, \quad (4.1.3)$$

donde ϵ_r y μ_r son las constantes eléctricas y magnéticas relativas del medio con respecto al vacío. Sin perder mucha generalidad la constante $\mu_r \approx 1$ debido a que ordenes propios de interacciones a nivel dipolar no se presentan cambios significativos a nivel magnético, sin embargo, a nivel eléctrico sí se presentan efectos considerables y de manera general afectan al tensor de susceptibilidad lineal $\chi^{(1)}$. De este modo, si la onda incidente posee una frecuencia angular ω :

$$\chi^{(1)}(\omega) = \epsilon_r(\omega) - 1, \quad (4.1.4)$$

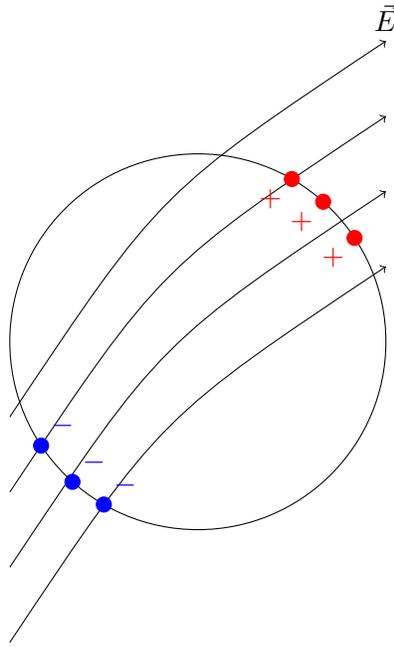


Figura 4.2: Fenómeno de polarizabilidad de la materia debido a la interacción con un campo eléctrico externo.

donde la dependencia de la frecuencia puede encontrarse fácilmente utilizando análisis de Fourier sobre la polarizabilidad del medio dieléctrico. El tensor de susceptibilidad estará relacionado con el índice de refracción de modo que:

$$\eta^2(\omega) = \chi^{(1)}(\omega) + 1, \quad (4.1.5)$$

los resultados de esta ecuación presentan múltiples posibilidades donde es de particular interés el caso para alguna frecuencia crítica ω_c , $\chi^{(1)}(\omega_c) = 0$ y por lo tanto $\eta(\omega_c) = 1$ lo cual indica que la onda no se desvía ni disminuye su velocidad al ingresar al medio, es decir, el medio se vuelve transparente a ciertas frecuencias, lo interesante de esto es que dado que los distintos ordenes de χ dependen de factores propios del material. En conclusión, mediante agentes externos de control, es posible volver transparente un medio a ciertas frecuencias si se sintoniza correctamente.

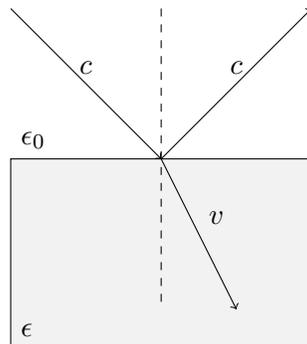


Figura 4.3: Haz de luz proveniente del vacío incidente sobre un medio con permitividad ϵ . La velocidad de la onda cambia de c a v una vez ingresa al medio, además que se desvía de su trayectoria original.

4.2. Cálculo de susceptibilidad con mecánica cuántica

Uno de los métodos más comunes para calcular los tensores de los diferentes ordenes de la susceptibilidad es mediante la teoría de perturbaciones, sin embargo como se discutió en capítulos anteriores estos métodos pueden tener problemas de convergencia que no son tan evidentes [Fer00]. Para sobrellevar este tipo de problemas el cambio al cuadro rotante suele ser una de las mejores opciones y de ese modo pasar de una teoría dependiente del tiempo a una teoría independiente del tiempo. Dado que las cantidades electromagnéticas como el dipolo y la polarizabilidad son cantidades que dependen de las propiedades intrínsecas de cada material, la teoría cuántica permite una descripción mucho más precisa en términos de sus niveles de energía y simetrías, por lo que en un lenguaje de operadores y valores esperados podemos determinar estas cantidades con una mayor precisión. Esta descripción cuántica tiene la ventaja de que puede desvelar comportamientos que a nivel clásico probablemente no aparecerían. Particularmente los conocidos efectos de interferencia cuántica [SZ99].

4.2.1. Teoría de perturbaciones

Para ejemplificar los cálculos mediante teoría de perturbaciones consideramos un sistema atómico de dos niveles que interactúa a nivel dipolar con un campo electromagnético clásico de frecuencia angular ω . El hamiltoniano que describe el comportamiento de este sistema bajo la aproximación de onda rotante es:

$$H = \hbar\omega_a\sigma^\dagger\sigma + \hbar\Omega(\sigma e^{i\omega t} + \sigma^\dagger e^{-i\omega t}), \quad (4.2.1)$$

donde el operador σ es el operador escalera entre los niveles de energía del sistema de dos niveles y Ω es una constante proporcional a la intensidad del campo y de la interacción dipolar. La representación matricial de H en la base propia del sistema atómico es:

$$H = \hbar \begin{bmatrix} 0 & \Omega e^{i\omega t} \\ \Omega e^{-i\omega t} & \omega_a \end{bmatrix}, \quad (4.2.2)$$

La cual tiene una dependencia temporal explícita, utilizando la transformación unitaria al cuadro rotante con

$$\Theta = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \omega \end{bmatrix}, \quad (4.2.3)$$

teniendo en cuenta la condición (1.2.10) el nuevo hamiltoniano independiente del tiempo será:

$$\tilde{H} = \hbar \begin{bmatrix} 0 & \Omega \\ \Omega & \omega_a - \omega \end{bmatrix}. \quad (4.2.4)$$

La ecuación maestra que incluye los efectos de emisión espontánea, a temperatura baja, en el cuadro rotante será:

$$\dot{\tilde{\rho}} = \frac{1}{i\hbar}[\tilde{H}, \tilde{\rho}] + \gamma\mathcal{L}[\sigma], \quad (4.2.5)$$

la cual arroja como resultado, el sistema de 4 ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden de los elementos de matriz del operador densidad, en adición de la condición de normalización de la traza

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_{11} &= \gamma\tilde{\rho}_{22} + i\Omega(\tilde{\rho}_{12} - \tilde{\rho}_{21}), \\ \dot{\tilde{\rho}}_{12} &= i(\omega_a - \omega)\tilde{\rho}_{12} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{12} + i\Omega(\tilde{\rho}_{11} - \tilde{\rho}_{22}), \\ \dot{\tilde{\rho}}_{21} &= -i(\omega_a - \omega)\tilde{\rho}_{21} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{21} - i\Omega(\tilde{\rho}_{11} - \tilde{\rho}_{22}), \\ \dot{\tilde{\rho}}_{22} &= -\gamma\tilde{\rho}_{22} - i\Omega(\tilde{\rho}_{12} - \tilde{\rho}_{21}), \\ 1 &= \tilde{\rho}_{11} + \tilde{\rho}_{22}, \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

en el cuadro rotante.

Debido a que Ω es proporcional a la amplitud del campo, analizaremos las ecuaciones a ordenes de $\lambda\Omega$, las ecuaciones a orden (0) son:

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{(0)} &= \gamma\tilde{\rho}_{22}^{(0)}, \\ \dot{\tilde{\rho}}_{12}^{(0)} &= i(\omega_a - \omega)\tilde{\rho}_{12}^{(0)} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{12}^{(0)}, \\ \dot{\tilde{\rho}}_{21}^{(0)} &= -i(\omega_a - \omega)\tilde{\rho}_{21}^{(0)} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{21}^{(0)}, \\ \dot{\tilde{\rho}}_{22}^{(0)} &= -\gamma\tilde{\rho}_{22}^{(0)}, \\ 1 &= \tilde{\rho}_{11}^{(0)} + \tilde{\rho}_{22}^{(0)},\end{aligned}\tag{4.2.7}$$

cuya solución estacionaria será:

$$\tilde{\rho}^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.\tag{4.2.8}$$

A primer orden el sistema de ecuaciones tomará la forma:

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{(1)} &= \gamma\tilde{\rho}_{22}^{(1)} + i\Omega(\tilde{\rho}_{12}^{(0)} - \tilde{\rho}_{21}^{(0)}), \\ \dot{\tilde{\rho}}_{12}^{(1)} &= i(\omega_a - \omega)\tilde{\rho}_{12}^{(1)} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{12}^{(1)} + i\Omega(\tilde{\rho}_{11}^{(0)} - \tilde{\rho}_{22}^{(0)}), \\ \dot{\tilde{\rho}}_{21}^{(1)} &= -i(\omega_a - \omega)\tilde{\rho}_{21}^{(1)} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{21}^{(1)} - i\Omega(\tilde{\rho}_{11}^{(0)} - \tilde{\rho}_{22}^{(0)}), \\ \dot{\tilde{\rho}}_{22}^{(1)} &= -\gamma\tilde{\rho}_{22}^{(1)} - i\Omega(\tilde{\rho}_{12}^{(0)} - \tilde{\rho}_{21}^{(0)}), \\ 0 &= \tilde{\rho}_{11}^{(1)} + \tilde{\rho}_{22}^{(1)},\end{aligned}\tag{4.2.9}$$

las cuales pueden simplificarse reemplazando el resultado (4.2.8) como:

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{(1)} &= \gamma\tilde{\rho}_{22}^{(1)}, \\ \dot{\tilde{\rho}}_{12}^{(1)} &= i(\omega_a - \omega)\tilde{\rho}_{12}^{(1)} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{12}^{(1)} + i\Omega, \\ \dot{\tilde{\rho}}_{21}^{(1)} &= -i(\omega_a - \omega)\tilde{\rho}_{21}^{(1)} - \frac{\gamma}{2}\tilde{\rho}_{21}^{(1)} - i\Omega, \\ \dot{\tilde{\rho}}_{22}^{(1)} &= -\gamma\tilde{\rho}_{22}^{(1)}, \\ 0 &= \tilde{\rho}_{11}^{(1)} + \tilde{\rho}_{22}^{(1)},\end{aligned}\tag{4.2.10}$$

y arrojarán la solución estacionaria como:

$$\tilde{\rho}^{(1)} = \frac{\Omega}{(\omega_a - \omega)^2 + \gamma^2/4} \begin{bmatrix} 0 & i\gamma/2 - (\omega_a - \omega) \\ -i\gamma/2 - (\omega_a - \omega) & 0 \end{bmatrix}.\tag{4.2.11}$$

De esta forma podemos continuar hasta ordenes superiores, sin embargo, el proceso puede hacerse bastante complejo al cabo de algunas iteraciones. Es pertinente resaltar que a medida que avancemos a ordenes más altos la precisión del cálculo del estado del sistema atómico en su forma de operador densidad mejorará considerablemente si la teoría es regular y para el caso en el cuadro rotante, dado que no hay dependencias temporales explícitas, la convergencia resulta ser lo suficientemente buena.

El valor esperado del operador de dipolo puede calcularse también mediante teoría de perturbaciones si consideramos que

$$\langle \vec{\mu} \rangle = \text{Tr}[\rho \vec{\mu}] = \text{Tr}[(\rho^{(0)} + \rho^{(1)} + \rho^{(2)} + \dots) \vec{\mu}] = \langle \vec{\mu} \rangle^{(0)} + \langle \vec{\mu} \rangle^{(1)} + \langle \vec{\mu} \rangle^{(2)} + \dots,\tag{4.2.12}$$

además, si el sistema tiene propiedades de simetría axial, el operador de dipolo será un operador hermítico y antisimétrico de forma que su componente principal, es decir la magnitud $\vec{\mu} = \mu\hat{\mu}$, sea:

$$\mu = \begin{bmatrix} 0 & \mu_{12} \\ \mu_{12} & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.2.13)$$

además, el operador densidad en el cuadro de Schrödinger es:

$$\rho = U^\dagger \tilde{\rho} U = \begin{bmatrix} \tilde{\rho}_{11} & \tilde{\rho}_{12} e^{i\omega t} \\ \tilde{\rho}_{21} e^{-i\omega t} & \tilde{\rho}_{22} \end{bmatrix}, \quad (4.2.14)$$

el cual puede reemplazarse en la expresión (4.2.12) para obtener el valor medio del operador de dipolo expandido en ordenes de perturbación como:

$$\langle \mu \rangle = \mu_{12} (\tilde{\rho}_{21} e^{-i\omega t} + \tilde{\rho}_{12} e^{i\omega t}) = \sum_j \mu_{12} (\tilde{\rho}_{21}^{(j)} e^{-i\omega t} + \tilde{\rho}_{12}^{(j)} e^{i\omega t}). \quad (4.2.15)$$

Los distintos ordenes de perturbación pueden calcularse mediante el método anterior y notamos con expresiones como (4.2.8) que $\langle \mu \rangle^{(0)} = 0$, mientras que (4.2.11) arrojará el resultado a primer orden:

$$\langle \mu \rangle^{(1)} = \mu_{12} \frac{\Omega}{(\omega_a - \omega)^2 + \gamma^2/4} ([-i\gamma/2 - (\omega_a - \omega)] e^{-i\omega t} + [i\gamma/2 - (\omega_a - \omega)] e^{i\omega t}). \quad (4.2.16)$$

Este resultado tiene conexión directa con el valor medio de polarizabilidad en la dirección principal del dipolo $\hat{\mu}$ a primer orden de modo que puede verse como la expansión de Fourier:

$$\langle P \rangle = \frac{\langle \mu \rangle}{V} = \sum_{\omega} \langle P(\omega) \rangle e^{i\omega t}, \quad (4.2.17)$$

con este resultado resulta evidente que:

$$\langle P(\omega) \rangle^{(1)} = \frac{\mu_{12}}{V} \frac{\Omega}{(\omega_a - \omega)^2 + \gamma^2/4} [i\gamma/2 - (\omega_a - \omega)] = \epsilon_0 \chi^{(1)}(\omega) E \quad (4.2.18)$$

donde gracias a que en aproximación dipolar $\Omega = \frac{\mu_{12} E}{\hbar}$, el coeficiente de Fourier de la susceptibilidad a primer orden tendrá la forma de:

$$\chi^{(1)}(\omega) = \frac{\mu_{12}^2}{\epsilon_0 \hbar V} \frac{i\gamma/2 - (\omega_a - \omega)}{(\omega_a - \omega)^2 + \gamma^2/4}. \quad (4.2.19)$$

Como se muestra en la figura 4.4 la expansión a primer orden de los coeficientes de Fourier posee una parte real y una parte imaginaria, analizando la expresión 4.1.5, la relación con el índice de refracción. Como es de esperarse la parte real de $\chi^{(1)}$ tendrá relación con la dispersión de la onda al entrar al medio dieléctrico y la parte imaginaria con la absorción de la misma. Se resalta el hecho de que la parte imaginaria presenta un pico en $\omega_a - \omega = 0$, además de que la parte real es cero, indicando un máximo de absorción y anulación de la dispersión cuando el sistema se encuentra en resonancia.

4.2.2. Cálculo exacto y expansión en series de Taylor.

Debido a que la teoría de perturbaciones suele presentar múltiples problemas de convergencia, a continuación presentamos un método que permite estimar la polarizabilidad de una manera exacta. Sabemos que en el cuadro rotante las ecuaciones dinámicas son las expresadas anteriormente en el sistema de ecuaciones (4.2.6) donde ya fueron eliminadas todas las dependencias temporales explícitas. El método inicialmente consistirá en encontrar el estado estacionario de cuadro rotante,

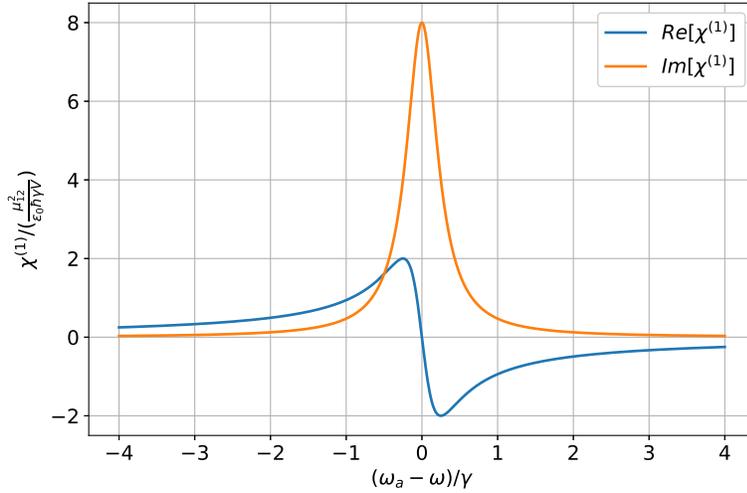


Figura 4.4: Resultado de la susceptibilidad de primer orden, para un sistema de dos niveles, por el método perturbativo. La expansión de Fourier arroja la parte real y la parte imaginaria como función de la diferencias de frecuencias del sistema de dos niveles y el campo. La gráfica se escala con γ para las frecuencias y la constante $\frac{\mu_{12}^2}{\epsilon_0 h \gamma V}$ para la susceptibilidad.

el cual es importante resaltar, no es un estado perfectamente estacionario, pues de vuelta al cuadro de Schrödinger las coherencias sufrirán cambios en su fase. Este hecho evidencia que los estados cuánticos no pueden ser estacionarios en el sentido estricto ya que como mínimo existirá una fase global rotante que cambia en el tiempo.

Teniendo en cuenta (4.2.6), el estado estacionario en el cuadro rotante debe ser tal que $\dot{\tilde{\rho}}_{11} = 0$, $\dot{\tilde{\rho}}_{12} = 0$, $\dot{\tilde{\rho}}_{21} = 0$ y $\dot{\tilde{\rho}}_{22} = 0$, imponiendo estas condiciones obtenemos que el estado tal que:

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_{11} &= 1 - \frac{\Omega^2}{2\Omega^2 + (\omega_a - \omega)^2 + \gamma^2/4}, \\ \tilde{\rho}_{12} &= \frac{\Omega}{2\Omega^2 + (\omega_a - \omega)^2 + \gamma^2/4} (i\gamma/2 - (\omega_a - \omega)), \\ \tilde{\rho}_{21} &= \frac{\Omega}{2\Omega^2 + (\omega_a - \omega)^2 + \gamma^2/4} (-i\gamma/2 - (\omega_a - \omega)), \\ \tilde{\rho}_{22} &= \frac{\Omega^2}{2\Omega^2 + (\omega_a - \omega)^2 + \gamma^2/4}.\end{aligned}\quad (4.2.20)$$

Este resultado es un resultado estacionario en el cuadro rotante que reemplazando en la primera igualdad de (4.2.15) obtendremos el valor medio exacto de dipolo

$$\langle \mu \rangle = \mu_{12} \frac{\Omega}{2\Omega^2 + (\omega_a - \omega)^2 + \gamma^2/4} [(-i\gamma/2 - (\omega_a - \omega))e^{-i\omega t} + (i\gamma/2 - (\omega_a - \omega))e^{i\omega t}], \quad (4.2.21)$$

de tal forma que el coeficiente de Fourier exacto de polarizabilidad en la dirección principal del dipolo es:

$$\langle P(\omega) \rangle = \frac{\mu_{12}}{V} \frac{\Omega (i\gamma/2 - (\omega_a - \omega))}{2\Omega^2 + (\omega_a - \omega)^2 + \gamma^2/4}. \quad (4.2.22)$$

Este cálculo exacto permite expandir la polarizabilidad en serie de Taylor al rededor de $\Omega = 0$ para obtener las potencias de la forma:

$$\langle P(\omega) \rangle = \langle P(\omega) \rangle^{(0)} + \langle P(\omega) \rangle^{(1)} + \langle P(\omega) \rangle^{(2)} + \dots, \quad (4.2.23)$$

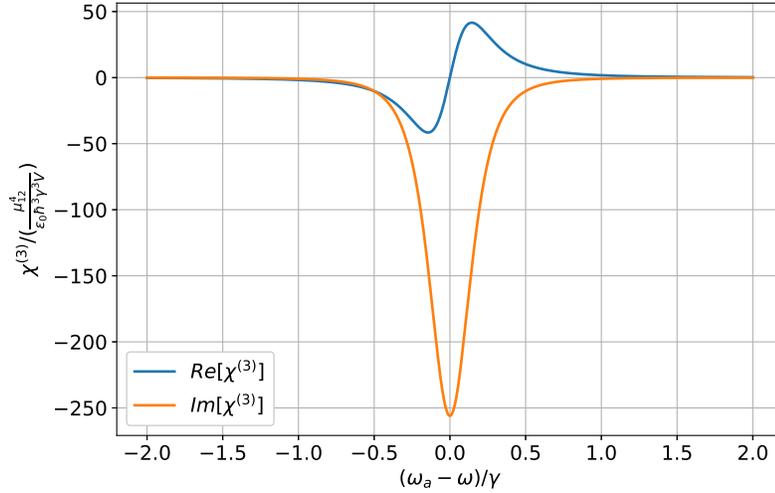


Figura 4.5: Resultado de la susceptibilidad de tercer orden, para un sistema de dos niveles, por el método exacto. La gráfica se escala con γ para las frecuencias y la constante $\frac{\mu_{12}^4}{\epsilon_0 \hbar^3 \gamma^3 V}$ para la susceptibilidad.

donde $\langle P(\omega) \rangle^{(n)}$ es proporcional a Ω^n . El resultado para las potencias (0), (1) y (2) es:

$$\begin{aligned} \langle P(\omega) \rangle^{(0)} &= 0, \\ \langle P(\omega) \rangle^{(1)} &= \frac{\mu_{12}}{V} \frac{\Omega}{(\omega_a - \omega)^2 + \gamma^2/4} [i\gamma/2 - (\omega_a - \omega)], \\ \langle P(\omega) \rangle^{(2)} &= 0. \end{aligned} \quad (4.2.24)$$

Notamos que las potencias pares de la forma $(2m)$ se hacen cero, indicando que no hay respuesta de orden par para un sistema de dos niveles de estas características. Por otro lado la potencia de orden de (1) es idéntica a la encontrada en (4.2.18), mostrando la consistencia de este método exacto con la teoría de perturbaciones. Sin embargo, la ventaja que ofrece la solución exacta es la información que ofrece sobre todos los ordenes, además de simplificar significativamente los cálculos para los ordenes superiores. Como ejemplo de ello, la susceptibilidad de orden (3) se puede calcular utilizando el coeficiente de la expansión en Taylor de orden (3) de modo que

$$\langle P(\omega) \rangle^{(3)} = \epsilon_0 \chi^{(3)}(\omega) E^3 = \epsilon_0 \chi^{(3)}(\omega) \left(\frac{\hbar \Omega}{\mu_{12}} \right)^3, \quad (4.2.25)$$

esto arrojará como resultado la susceptibilidad de tercer orden:

$$\chi^{(3)}(\omega) = -\frac{2\mu_{12}^4}{\epsilon_0 \hbar^3 V} \frac{i\gamma/2 - (\omega_a - \omega)}{[(\omega_a - \omega)^2 + \gamma^2/4]^2} \quad (4.2.26)$$

Este resultado a orden (3) nuevamente posee un término real asociado a la dispersión de la onda y un término imaginario asociado a la absorción, sin embargo, como se observa en la figura 4.5 son efectos de orden no lineal, que en el caso de dos niveles no presentan grandes diferencias a los ordenes menores. Cabe resaltar que en otros sistemas atómicos es posible que los efectos de orden superior desvelen comportamientos más especiales como lo son la doble absorción de segundo armónico o incluso efectos de transparencia [Boy20; DH14].

Capítulo 5

Modelo y resultados

5.1. Sistema físico

Una molécula de puntos cuánticos puede diseñarse tal que posea tres niveles de energía bien diferenciados. Utilizando los métodos de epitaxia de gotas y nanolitografía [WW14] se genera una plantilla de nanoagujeros de baja densidad sobre superficies de GaAs [Wan+07], cuando las condiciones de crecimiento son las adecuadas, el crecimiento epitaxial de InAs, conforma moléculas de punto cuántico verticales con propiedades de emisión adecuadas [Alo+07]. El proceso de fabricación comienza con el crecimiento de una capa amortiguadora de GaAs de $0.5 \mu\text{m}$ sobre un sustrato del mismo tipo a $580 \text{ }^\circ\text{C}$, sobre esta capa se utilizan nanogotas de Ga que se distribuyen sobre la superficie con una densidad de $2.5 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ y se cristalizan formando los nanoagujeros, la profundidad media de los nano agujeros es de $4.4 \pm 0.8 \text{ nm}$ con diámetros entre $43 \pm 5 \text{ nm}$ y $95 \pm 5 \text{ nm}$. Sobre la plantilla de nanoagujeros se deposita InAs que forman el primer punto cuántico, seguido de una película delgada de algunos nm de GaAs como barrera de tunelamiento a los portadores de carga que separa a una segunda capa de InAs que forma el segundo punto cuántico, estas gotas se depositan automáticamente justo encima a las primeras gracias a la tensión superficial generada por el relieve de la película intermedia. Por último, este proceso termina con una capa de GaAs que sella la molécula de puntos cuánticos, este proceso se esquematiza en la figura 5.1. Este ensamble permite obtener estructuras verticales simétricas o asimétricas acopladas donde el tipo de acople de tunelamiento entre los puntos cuánticos puede ser controlado a necesidad según el grosor de la capa intermedia [Xie+95; Bay+01].

5.2. Modelo semiclásico del sistema de tres niveles

La molécula de puntos cuánticos usualmente es llamada molécula artificial debido a que presenta una estructura de niveles de energía discretos y sus espectros de emisión están en el rango del visible, que corresponden a diferencias de energía en un rango de eV. Los materiales semiconductores que conforman la molécula permiten acoplarla a campos electromagnéticos externos que se encuentren en el rango de frecuencias de eV y por lo tanto longitudes de onda de una longitud de onda de 500 nm , gracias a esto los acoples radiación materia puedan modelarse a través de un hamiltoniano de interacción dipolar:

$$H_{int} = \vec{\mu} \cdot \vec{E}(t), \quad (5.2.1)$$

el esquema de transiciones del sistema depende de las direcciones de polarización de los campos acoplados y de los elementos de matriz del operador dipolar en su base de autoestados de energía. Consideramos un acople tipo Λ , que consiste en que tres autoestados de energía, estén configurados de modo que las transiciones a nivel dipolar sigan reglas de selección específicas, el control experimental del tamaño de los puntos cuánticos y el grosor de la película intermedia permite que el

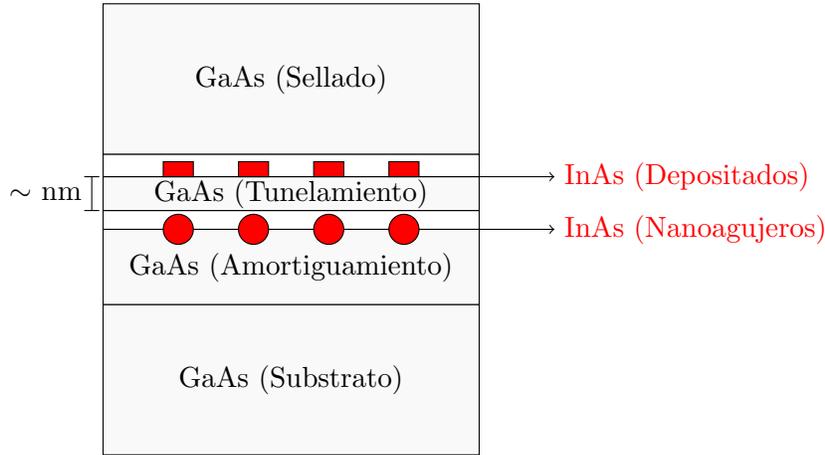


Figura 5.1: Conformación de una molécula de puntos cuánticos vertical con la técnica de epitaxia de gotas. Sobre la capa de amortiguamiento de GaAs se forman nanoagujeros que se llenan con la primera capa de InAs, formando el primer punto cuántico, mientras que sobre la barrera de tunelamiento la deposición de InAs forma el segundo punto cuántico justo encima del primero.

operador de dipolo sea:

$$\vec{\mu} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \mu_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ \mu_{13} & 0 & 0 \end{bmatrix} \hat{e}_p + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{23} \\ 0 & \mu_{23} & 0 \end{bmatrix} \hat{e}_c, \quad (5.2.2)$$

donde \hat{e}_p y \hat{e}_c son dos direcciones independientes y perpendiculares. El campo eléctrico externo que se acopla a este esquema se considera con la superposición de dos modos de radiación de frecuencias ω_p y ω_c en las direcciones \hat{e}_p y \hat{e}_c respectivamente

$$\vec{E}(t) = E_p(t)\hat{e}_p + E_c(t)\hat{e}_c, \quad (5.2.3)$$

donde la forma de los campos está dada por por las ecuaciones (2.1.25) en su forma clásica o (2.4.12) en su forma cuántica. Debido a la forma del dipolo y de los campos, las transiciones se darán entre los estados 1 y 3, estimuladas por el campo E_p que llamaremos campo de prueba, mientras que la transiciones entre 2 y 3, serán mediadas por E_c que llamaremos campo de control. Con este esquema y como se muestra en 5.2 no hay transiciones permitidas entre los estados 1 y 2.

Los campos no necesariamente deben estar en resonancia con las frecuencias propias del sistema, para tener en cuenta esto, se definen dos parámetros de asintonía $\Delta_p = \omega_{31} - \omega_p$ y $\Delta_c = \omega_{32} - \omega_c$, asociados a los campos de prueba y control respectivamente. En el caso de los campos clásicos y de baja amplitud tal que $\mu E = \hbar\Omega \sim 1$ meV, se puede aplicar la aproximación de onda rotante al hamiltoniano total en el cuadro de Schrödinger del sistema tipo Λ y se puede escribir como:

$$H = \hbar \begin{bmatrix} \omega_1 & 0 & \Omega_p e^{i\omega_p t} \\ 0 & \omega_2 & \Omega_c e^{i\omega_c t} \\ \Omega_p e^{-i\omega_p t} & \Omega_c e^{-i\omega_c t} & \omega_3 \end{bmatrix}, \quad (5.2.4)$$

por lo que el operador Θ para pasar al cuadro rotante, tal que el hamiltoniano (1.2.10) sea un operador que no dependa explícitamente del tiempo, según la condición (1.2.13), es:

$$\Theta = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_p - \omega_c & 0 \\ 0 & 0 & \omega_p \end{bmatrix}, \quad (5.2.5)$$

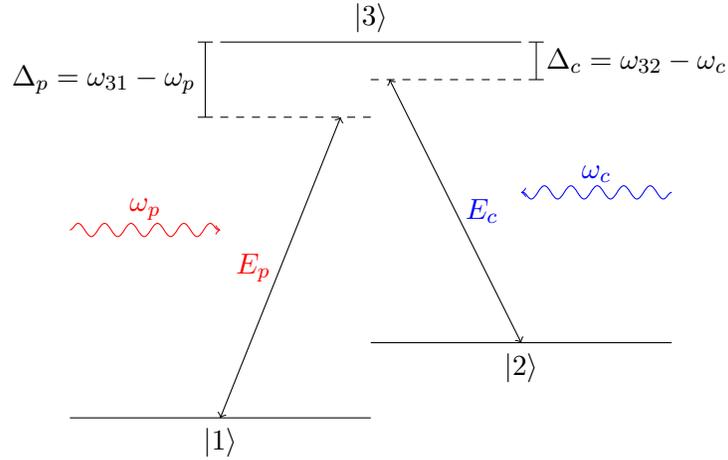


Figura 5.2: Sistema de tres niveles tipo Λ , las transiciones $1 \leftrightarrow 3$ y $2 \leftrightarrow 3$ están mediadas por los campos E_p y E_c respectivamente, la diferencia de energías entre los niveles y los campos son las asintonías Δ_p y Δ_c respectivamente. Las transiciones $1 \leftrightarrow 2$ está prohibidas a nivel de dipolo.

el hamiltoniano en el cuadro rotante será entonces:

$$\tilde{H} = \hbar \begin{bmatrix} \omega_1 & 0 & \Omega_p \\ 0 & \omega_2 - (\omega_p - \omega_c) & \Omega_c \\ \Omega_p & \Omega_c & \omega_3 - \omega_p \end{bmatrix}. \quad (5.2.6)$$

Dada la estructura tipo Λ del acople de la molécula de punto cuántico con los campos y las transiciones permitidas a nivel dipolar, los efectos de disipación debido a la emisión espontánea estarán mediadas por el operador escalera $\sigma_{13} = |1\rangle\langle 3|$ y en menor medida al operador $\sigma_{12} = |1\rangle\langle 2|$, la ecuación maestra de Lindblad en el límite de cero temperatura será:

$$\dot{\tilde{\rho}} = \frac{1}{i\hbar} [\tilde{H}, \tilde{\rho}] + \gamma_{13} \mathcal{L}[\sigma_{13}] + \gamma_{12} \mathcal{L}[\sigma_{12}], \quad (5.2.7)$$

que generará un sistema de 9 ecuaciones diferenciales, lineales y homogéneas acopladas, además de la condición de normalización que debe cumplir el operador densidad $Tr[\rho] = 1$.

5.3. Susceptibilidades por el método exacto

El valor medio del vector de polarizabilidad puede calcularse como:

$$\langle \vec{P} \rangle = \frac{\langle \mu_p \rangle}{V} \hat{e}_p + \frac{\langle \mu_c \rangle}{V} \hat{e}_c, \quad (5.3.1)$$

donde las componentes en dirección del campo de prueba y en dirección del campo de control son componentes independientes del vector, sin embargo, el interés se centrará en las variaciones del campo de prueba por lo que es conveniente analizar la componente en su misma dirección:

$$\langle P_p \rangle = \frac{\langle \mu_p \rangle}{V} = \frac{\mu_{13}}{V} (\tilde{\rho}_{13} e^{i\omega_p t} + \tilde{\rho}_{31} e^{-i\omega_p t}), \quad (5.3.2)$$

que es la expansión en series de Fourier de la componente y será conveniente utilizar el término proporcional a $e^{i\omega_p t}$

$$\langle P_p \rangle(\omega_p) = \frac{\mu_{13}}{V} \tilde{\rho}_{13}. \quad (5.3.3)$$

La solución estacionaria para los elementos de matriz densidad en el cuadro rotante arroja como resultado para el elemento $\tilde{\rho}_{13}$ la expresión exacta, simplificada en términos de las asintonías Δ_p y Δ_c y puede ser expandida en series de potencias de Ω_p y Ω_c para obtener:

$$\langle P_p \rangle(\omega_p) = \epsilon_0 \left(\sum_{j=p,c} \chi_{p,j}^{(1)}(\Delta_p) \frac{\hbar\Omega_j}{\mu_j} + \sum_{j,k=p,c} \chi_{p,jk}^{(2)}(\Delta_p) \frac{\hbar\Omega_j}{\mu_j} \frac{\hbar\Omega_k}{\mu_k} + \dots \right), \quad (5.3.4)$$

a orden 1. El tensor de susceptibilidad tendrá dos componentes $\chi_{p,c}$ y $\chi_{p,p}$ que nos indicará el efecto de polarizabilidad debido a los campos en las direcciones \hat{e}_c y \hat{e}_p respectivamente. Los resultados de la expansión son tal que:

$$\chi_{p,c}^{(1)}(\Delta_p) = 0, \quad (5.3.5)$$

lo que indica que el campo de control no produce respuesta a primer orden en la dirección \hat{e}_p , por otro lado

$$\chi_{p,p}^{(1)}(\Delta_p) = \frac{\mu_{13}^2}{\epsilon_0 \hbar V} \frac{(\Delta_p - \Delta_c) + i\frac{\gamma_{12}}{2}}{\Omega_c^2 - (\Delta_p + i\frac{\gamma_{13}}{2}) \left((\Delta_p - \Delta_c) + i\frac{\gamma_{12}}{2} \right)}, \quad (5.3.6)$$

es la respuesta debido al campo de prueba que tiene un comportamiento interesante, si consideramos que el campo de control está en resonancia $\Delta_c = 0$ y además conociendo que $\gamma_{12} \sim 0$ dado que la transición $1 \leftrightarrow 2$ está prohibida a nivel del dipolo, la expresión puede simplificarse a una forma que se revelan comportamientos interesantes de la molécula artificial:

$$\chi_{p,p}^{(1)}(\Delta_p) = \frac{\mu_{13}^2}{\epsilon_0 \hbar V} \frac{\Delta_p}{\Omega_c^2 - (\Delta_p + i\frac{\gamma_{13}}{2}) \Delta_p}. \quad (5.3.7)$$

Como se muestra en la figura 5.3 en el caso de $\Delta_p = 0$ la susceptibilidad se anula tanto en su parte real como en su parte imaginaria, por lo que según (4.1.5) el índice de refracción es de 1, lo que implica que el material no dispersa, ni absorbe la onda de campo de prueba y por lo tanto presenta un punto de transparencia. Este resultado podría ser utilizado en múltiples aplicaciones, en las que destacan un switch óptico, dado que mediante cambios en la frecuencia del campo de control es posible cambiar la respuesta óptica del material. Como se observa en la figura 5.4 un pequeño cambio en Δ_c de inmediato habilitará la absorción y la dispersión de la onda de campo de prueba. Este interesante fenómeno se da gracias a que la interferencia destructiva entre los campos dentro del material produce estados de la materia en los que la respuesta óptica se puede controlar de manera conveniente, estabilizando el índice de refracción.

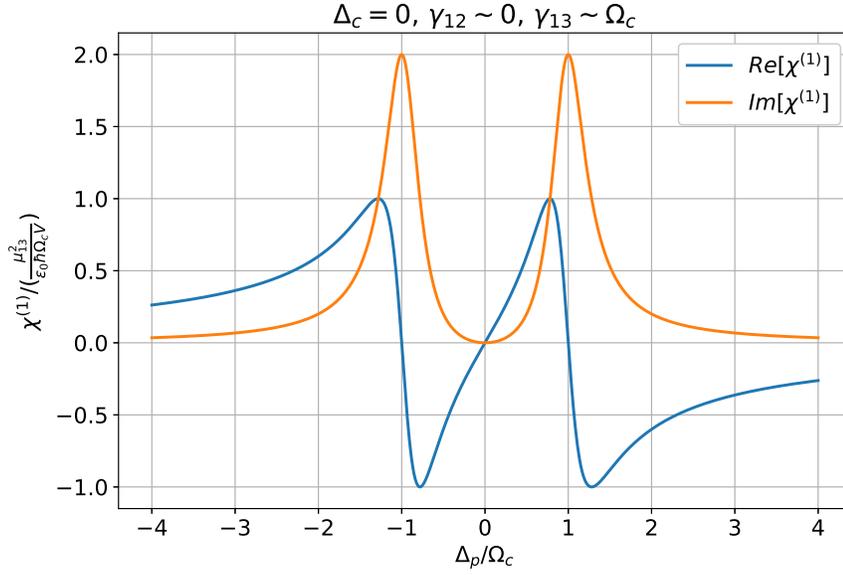


Figura 5.3: Resultado de la susceptibilidad de primer orden, para un molécula de puntos cuánticos de tres niveles tipo Λ en función de Δ_p . La gráfica se escala con Ω_c para las frecuencias y la constante $\frac{\mu_{13}^2}{\epsilon_0 \hbar \Omega_c V}$ para la susceptibilidad.

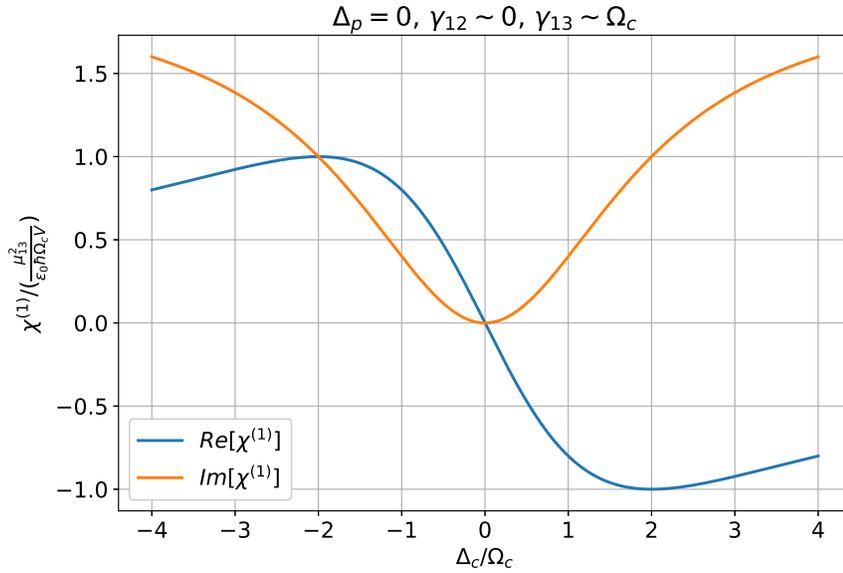


Figura 5.4: Resultado de la susceptibilidad de primer orden, para un molécula de puntos cuánticos de tres niveles tipo Λ en función de Δ_c . La gráfica se escala con Ω_c para las frecuencias y la constante $\frac{\mu_{13}^2}{\epsilon_0 \hbar \Omega_c V}$ para la susceptibilidad.

5.4. Sistemas de dos niveles y acoples fuera de resonancia

Los modelos completamente cuánticos que abordan la respuesta óptica de los materiales, presentan grandes dificultades matemáticas y analíticas debido a la complejidad de sus ecuaciones. En este trabajo hemos utilizado un software especializado en la solución de ecuaciones maestras para sistemas cuánticos abiertos, que se ha hecho muy popular en los últimos años, llamado QuTiP [JNN12], esta herramienta es una librería que puede integrarse a Python lo que le da una gran versatilidad y utilidad.

Como se ha discutido anteriormente la estructura de niveles de una molécula de punto cuántico puede ser controlada con precisión mediante las dimensiones de la capa de tunelamiento que separa los puntos cuánticos, esto permite generar estructuras como la tipo Λ discutida anteriormente pero también permite generar estructuras más restrictivas como una de dos niveles, que hacen referencia a las energías de los electrones en la banda de valencia y conducción del material [WW14; Bay+01]. Además, es posible construir estructuras donde la radiación quede atrapada en las cavidades que se forman en el interior y pueda tratarse bajo un formalismo cuántico, para esto será necesario tratar el sistema radiación materia mediante el modelo de Jaynes-Cummings 2.6.9 (Ver capítulo 2). Los modos de radiación dentro de las cavidades usualmente dependen de la geometría y las dimensiones y los sistemas pueden modelarse de modo que el acople sea no resonante como se muestra en la figura 5.5.

El hamiltoniano de Jaynes-Cummings que describe este sistema está dado por:

$$H = \hbar\omega_a\sigma^\dagger\sigma + \hbar\omega_c a^\dagger a + \hbar g(\sigma a^\dagger + \sigma^\dagger a). \quad (5.4.1)$$

Sin embargo la molécula se puede acoplar también a un pulso clásico externo con frecuencia ω_p que puede modelarse bajo el hamiltoniano de Rabi

$$H_{ext} = \frac{\hbar\Omega(t)}{2}(\sigma e^{i\omega_p t} + \sigma^\dagger e^{-i\omega_p t}), \quad (5.4.2)$$

donde $\Omega(t)$ es el parámetro de acople con el campo externo que depende la amplitud del campo, en general podemos considerar la amplitud dependiente del tiempo para generar distintas envolventes sobre la onda. El parámetro de asintonía es $\delta_p = \omega_p - \omega_c$, de modo que

$$\Delta - \delta_p = \omega_a - \omega_p. \quad (5.4.3)$$

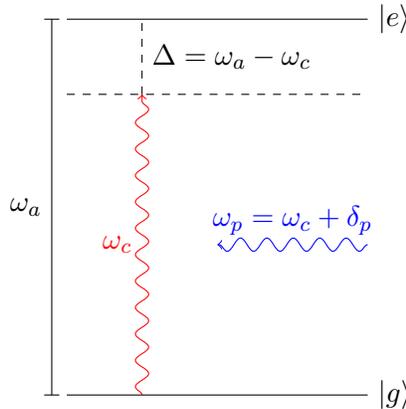


Figura 5.5: Molécula de dos niveles acoplada a campo fuera de resonancia con parámetro de asintonía $\Delta = \omega_a - \omega_c$. En azul se representa un pulso clásico externo con frecuencia ω_p , que también puede acoplarse fuera de resonancia con un parámetro de asintonía distinto $\delta_p = \omega_p - \omega_c$.

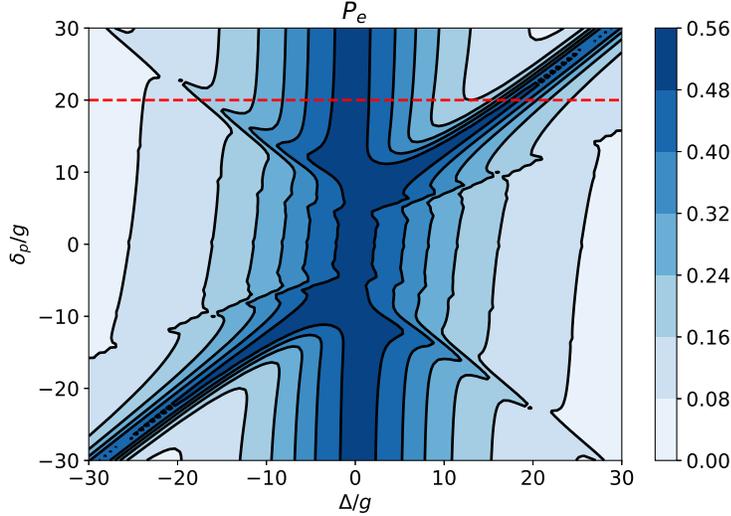


Figura 5.6: Probabilidad del estado excitado según los parámetros de asintonía, la simulación toma los parámetros $T = 10/g$, $\gamma = 0$, $\kappa = 0$, $\Gamma = 0$. La línea roja punteada equivale a $\delta_p = 20g$.

Los efectos de disipación y decoherencia a nivel de ecuación maestra actuarán sobre los distintos subsistemas, particularmente la molécula de punto cuántico sufrirá de emisión espontánea mientras la cavidad tendrá fugas de radiación. Además consideramos un acople donde $\Delta \geq 0$ por lo que un efecto fuera de resonancia producto del acople a fonones emergerá en la forma (3.5.4) [Maj+11]. La ecuación dinámica general será entonces:

$$\dot{\rho} = \frac{1}{i\hbar}[H + H_{ext}, \rho] + \gamma\mathcal{L}[\sigma] + \kappa\mathcal{L}[a] + \Gamma\mathcal{L}[\sigma a^\dagger]. \quad (5.4.4)$$

La respuesta al pulso externo depende de los parámetros de asintonía Δ y δ_p y para observar la respuesta se simula la molécula y la cavidad en el estado base $|g, 0\rangle$. Mediante un pulso continuo con $\Omega(t) = 2g$ se deja evolucionar el sistema, variando Δ y δ_p con valores desde $-30g$ hasta $30g$. Así, es posible promediar temporalmente el valor medio de la población del estado excitado $|e\rangle$ para cada valor de asintonía según

$$\bar{P}_e = \frac{1}{T} \int_0^T dt P_e(t). \quad (5.4.5)$$

Según la figura 5.6 la mayor capacidad de respuesta a pulso puede observarse cuando \bar{P}_e es máxima y esto corresponde a regiones donde $\Delta \sim 0$ es decir, cuando la molécula y la cavidad están en resonancia pero también cuando $\Delta \sim \delta_p$ que según la ecuación (5.4.3) corresponde cuando el pulso y la molécula están en resonancia, pero no la cavidad y la molécula. Este hecho será clave pues cuando $\Delta \sim \delta_p$ el mecanismo de decoherencia fuera de resonancia de tasa Γ estará activa. Centraremos la atención en el valor particular de $\delta_p = 20g$ indicado por la línea roja punteada. Además, la figura 5.7 muestra que la respuesta óptima para este valor de asintonía se da cuando el sistema presenta un $\Delta = 0$ como es de esperar, pero también cuando $\Delta \sim 18g$, es decir cuando $\omega_a - \omega_p \sim -2g$, que indica que la molécula y el pulso externo también están fuera de resonancia, sin embargo generando una respuesta óptima.

Una vez caracterizada la respuesta de la molécula fuera de resonancia con la cavidad y el pulso externo, en la simulación se monitorea la respuesta frente a la intensidad del acople Γ , aislando los demás mecanismos de disipación y decoherencia. Recordemos que según la expresión (3.5.3), Γ tiene relación con el ancho de frecuencias del baño bosónico que se acoplan al sistema, debido a que se

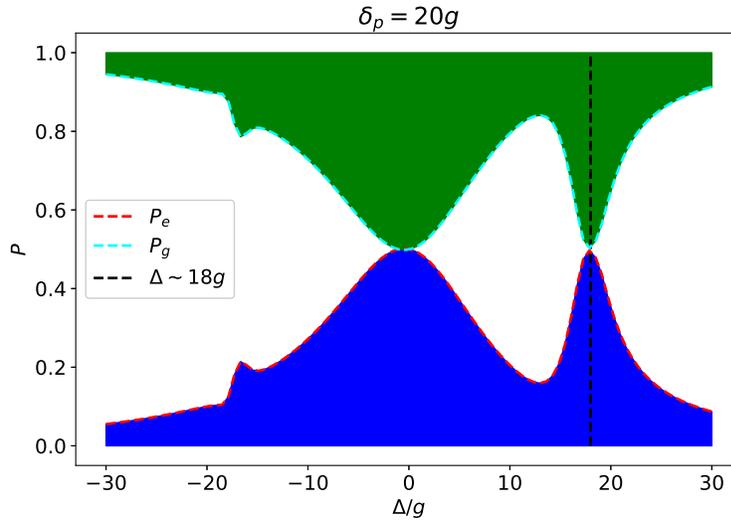


Figura 5.7: Probabilidad de respuesta con $\delta_p = 20g$, donde existen picos de respuesta en $\Delta = 0$ y $\Delta \sim 18g$.

acoplan con frecuencias centradas en $\Delta \sim 18g$, variando a Γ entre 0 y $1g$. El mecanismo fuera de resonancia es mediado por el operador σa^\dagger indicando que a medida que la molécula tiende a caer a su estado base la cavidad aumentará su número de excitación, por lo que es conveniente analizar su promedio temporal

$$\langle \bar{n} \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T dt \langle n \rangle(t). \quad (5.4.6)$$

Este resultado es plasmado en la figura 5.8 mostrando como la intensidad del acople fuera de resonancia genera un aumento en los números de excitación que crece de manera lineal hasta $\Gamma \sim 0.6g$, a partir de este punto la respuesta comienza a disminuir su pendiente disminuyendo su efectividad, este mecanismo podría aprovecharse para aumentar de manera controlada el número medio de excitación en las cavidades.

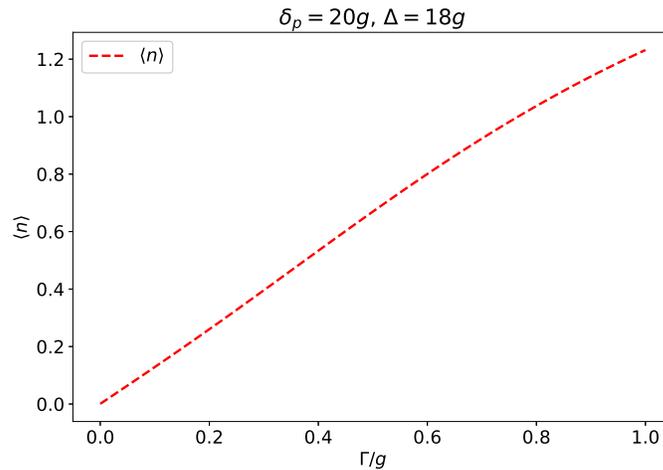


Figura 5.8: Promedio temporal con $T = 10g$ del número medio de excitación $\langle n \rangle$ como función de Γ en un acople fuera de resonancia con $\delta_p = 20g$ y $\Delta = 18g$.

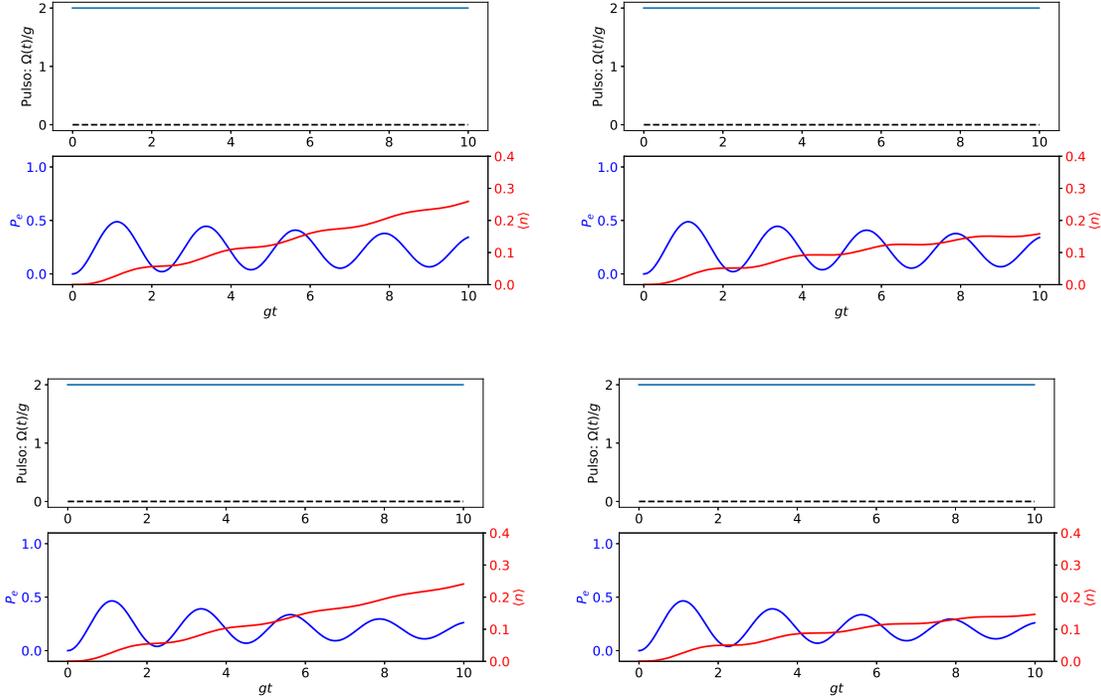


Figura 5.9: Evolución temporal con $\Gamma=0.1g$, los casos que se muestran corresponde respectivamente al conjunto de parámetros $(\kappa = 0, \gamma = 0)$, $(\kappa = 0.1g, \gamma = 0)$, $(\kappa = 0, \gamma = 0.1g)$ y $(\kappa = 0.1g, \gamma = 0.1g)$ respectivamente.

5.5. Estado estacionario fuera de resonancia

Según lo discutido en la sección anterior es posible aprovechar el acople fuera de resonancia gracias a la aparición de mecanismos de decoherencia de asistencia fonónica de la forma (3.5.4), inicialmente se simula el sistema en los parámetros de asintonía óptimos $\delta_p = 20g$ y $\Delta = 18g$ y el estado base inicial $|g, 0\rangle$, mientras el pulso continuo con $\Omega(t) = 2g$ se acopla y genera transiciones entre los estados de la molécula, el mecanismo de decoherencia fuera de resonancia tendrá una intensidad de $\Gamma=0.1g$. En la figura 5.9 se explora esta dinámica modificando a su vez los parámetros κ y γ con los valores 0 y $0.1g$. Como se observa en las figuras, la probabilidad del estado excitado de la molécula varía ligeramente en su oscilación, pero no es significativo el cambio, por otro lado, para el número medio excitación, la emisión espontánea mediada por la tasa γ no afecta significativamente al efecto de Γ , pero, las fugas en la cavidad mediadas por κ si reducen significativamente el efecto de Γ , sin hacerlo desaparecer del todo. Cuando los tres mecanismos están presentes el efecto de Γ seguirá siendo evidente pero el aumento será más lento que se evidencia en los cambios de pendiente de crecimiento en $\langle n \rangle$.

El siguiente caso que se simulará con el estado inicial $|g, \alpha\rangle$, donde $|\alpha\rangle$ es un estado coherente, es decir un autoestado del operador escalera a , este estado tiene la forma:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (5.5.1)$$

estos estados tienen la particularidad que $\langle n \rangle = |\alpha|^2$, para la simulación, el estado inicial es tal que $|\alpha|^2 = 25$, además el pulso utilizado tendrá forma gaussiana, es decir:

$$\Omega(t) = Ae^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_0}{\sigma}\right)^2}, \quad (5.5.2)$$

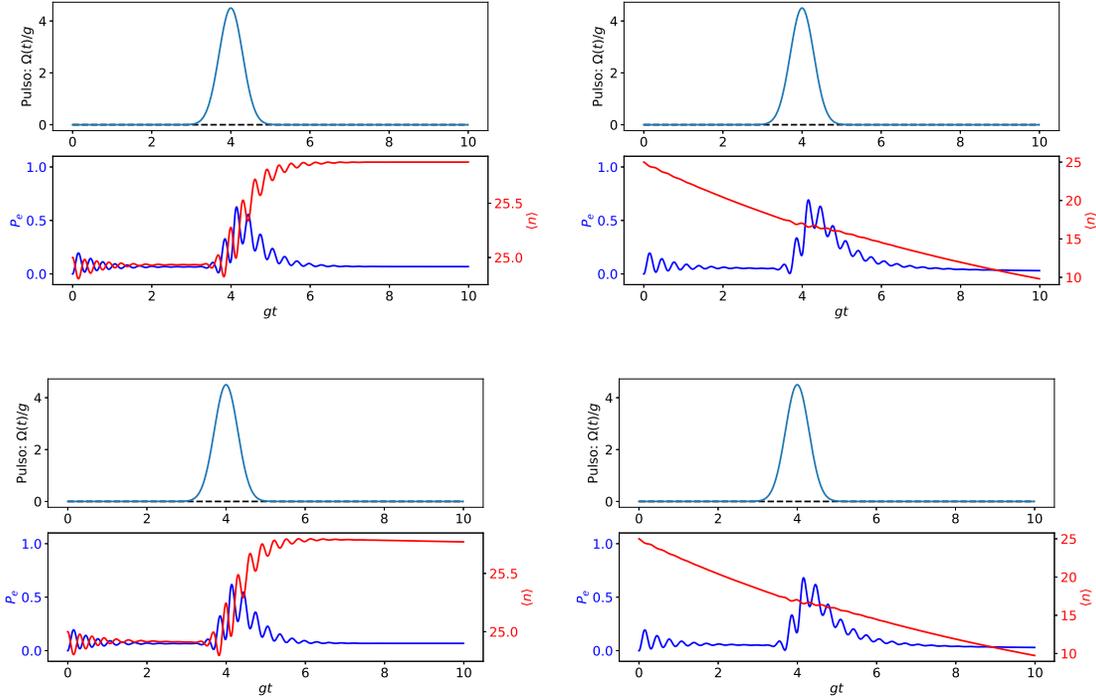


Figura 5.10: Evolución temporal sobre estado coherente de radiación con $\Gamma=0.1g$, los casos que se muestran corresponde respectivamente al conjunto de parámetros $(\kappa = 0, \gamma = 0)$, $(\kappa = 0.1g, \gamma = 0)$, $(\kappa = 0, \gamma = 0.1g)$ y $(\kappa = 0.1g, \gamma = 0.1g)$ respectivamente.

donde la amplitud del pulso será $A = 4.5g$ y estará centrado en $t_0 = 4/g$ y una duración de $0.7/g$, además, en la misma línea del resultado anterior se exploran variaciones de γ y κ con los valores 0 y $0.1g$. El resultado en este caso es evidenciado en las figuras 5.10 donde nuevamente la emisión espontánea no tiene efectos significativos sobre el resultado y se pueden dar aumentos escalados en el número de excitaciones, sin embargo, cuando las fugas de la cavidad están presentes, la pérdida de la coherencia del estado hace que el mecanismo fuera de resonancia pierda su efectividad para aumentar el número medio de excitaciones.

Los resultados anteriores evidencian que las fugas de cavidad son las que reducen el protagonismo y efectividad el mecanismo fuera de resonancia, debido a la pérdida de coherencia. La pregunta que surge al analizar este comportamiento es cuál es el estado estacionario una vez es apagado el pulso externo. Las evidencias de la simulación sugieren que la molécula reposará en $|g\rangle$, sin embargo, el aumento del número de excitación y a la distinguibilidad del estado de la molécula, sugiere que el estado de radiación en la cavidad es un estado puro para esto utilizaremos la función de correlación $g^{(2)}(\tau)$ de segundo orden dada por:

$$g^{(2)}(\tau) = \frac{\langle a^\dagger(\tau)a^\dagger(0)a(\tau)a(0) \rangle}{\langle a^\dagger(0)a(0) \rangle^2}, \quad (5.5.3)$$

que según su valor indicará la naturaleza de la estadística del estado de radiación de modo que:

$$g^{(2)}(\tau) \begin{cases} < 1 & \text{Sub-Poissoniana,} \\ = 1 & \text{Poissoniana,} \\ > 1 \text{ y } \leq 2 & \text{Súper Poissoniana.} \end{cases}$$

Para analizar el estado estacionario se activará un pulso continuo sobre el estado base con 0 excitaciones, durante un tiempo de $t = 30/g$ de modo que se aumente a en promedio 1 excitación,

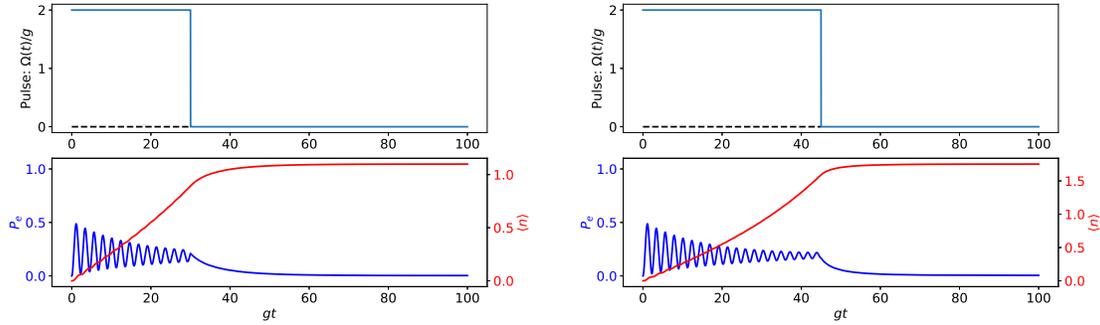


Figura 5.11: Formación del estado estacionario con pulso continuo de $30/g$ y $45/g$ de duración.

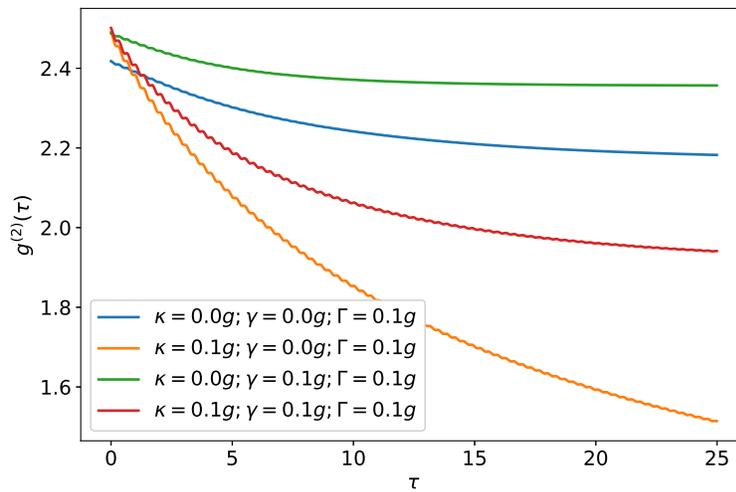


Figura 5.12: Función $g^{(2)}(\tau)$ para el estado estacionario formado tras un pulso continuo de $30/g$ de duración.

una vez apagado el pulso se analizará la correlación con tiempos posteriores, es decir $\tau = gt - 30$. En la figura 5.11 se muestra como cuando los mecanismos de decoherencia adicionales están desactivados el aumento del número de excitación permanece constante a pesar de que la molécula es obligada a permanecer en su estado base, el resultado de la $g^{(2)}$ indica que el estado debe poseer estadística súper-poissoniana, por lo que este aumento en el número de excitación corresponde a que su estado estacionario forma una superposición de estados de Fock donde a medida que la duración del pulso aumente también lo hará su número medio de excitaciones, particularmente para pulsos con duraciones $30/g$ y $45/g$ el aumento del promedio de excitaciones es de aproximadamente 0.5 excitaciones. Finalmente, la figura 5.12 indica que el estado estacionario formado tiene una estadística súper-poissoniana, en todos los casos donde κ y γ están prendidos o apagados.

Estos mecanismos fuera de resonancia resultan entonces muy efectivos para controlar el número medio de excitación siempre y cuando se supriman de manera efectiva las fugas mediadas por κ por lo que las moléculas de punto cuántico pueden ser utilizadas como depósitos de energía.

Conclusiones y perspectivas

Las principales conclusiones y perspectivas que emergen de este trabajo son:

- Creemos que un resultado importante sobre la búsqueda de estados estacionarios, es la expresión encontrada para el operador Θ (1.2.13) ya que brinda una alternativa a la hora de lidiar con Hamiltonianos dependientes del tiempo que son usuales en la óptica cuántica. Usualmente, cuando el campo de forzamiento externo es semiclásico, existen términos exponenciales de la forma $e^{\pm i\omega t}$ que generan dinámicas singulares desde el punto de vista de la teoría de perturbaciones, lo que trae grandes inconvenientes para analizar su convergencia [Fer00]. La solución de la ecuación (1.2.13), en los casos usuales de la aproximación de onda rotante, tiene infinitas soluciones que son sencillas de determinar y como se ha demostrado la solución exacta del estado estacionario en el cuadro rotante, no solamente permite conocer la respuesta óptica de los materiales, sino que con una expansión en series de Taylor, es posible encontrar la respuesta a diferentes órdenes, recuperando los resultados de la teoría de perturbaciones con mayor facilidad y una mayor certeza de la convergencia.
- Sería interesante generalizar la solución para los operadores Θ a otros hamiltonianos de la óptica cuántica fuera de la aproximación de onda rotante, e incluso a hamiltonianos de la dinámica molecular con forzamientos dependientes del tiempo, pues en estos casos, la solución de los estados estacionarios es un problema no trivial, que puede ser atacado desde un punto de vista de cuadro rotante.
- Otra contribución del trabajo es presentar las deducciones de los hamiltonianos propios de la óptica cuántica desde primeros principios, con las ecuaciones de Maxwell clásicas, han sido discutidas con profundidad en el capítulo 2. Estas deducciones, tienen como fin la profundización y generalización de estos modelos a estructuras físicas tan dispares como lo son los gases atómicos y los puntos cuánticos. Los gases atómicos han sido sumamente importantes en la óptica cuántica dado que las principales predicciones de la teoría, como la transparencia inducida electromagnéticamente, han sido observadas experimentalmente [BIH91; LI01; HFI90]. Las nuevas tecnologías y los nuevos desarrollos basados en estructuras semiconductoras, como los puntos cuánticos y las moléculas de puntos cuánticos [Müc+10; Wei+12; Alo+07], requieren un modelamiento adecuado basado en los órdenes de magnitud observados en los experimentos. Desde el punto de vista de la óptica cuántica, existen grandes similitudes en la fenomenología de estas estructuras, como sus esquemas de dos y tres niveles de energía. A pesar de ello, también existen grandes diferencias, como los procesos de acople fuera de la resonancia y la asistencia fonónica, propios de los materiales semiconductores [Kan+08; Lau+11; Hoh10; Hoh+09; Maj+11], esto motiva a que la profundización desde primeros principios sobre los modelos usuales pueda traer nuevas ideas que permitan modelar con mayor precisión las observaciones del laboratorio.
- Las moléculas de puntos cuánticos en su conformación tienen una gran variabilidad en su espectro de niveles de energía, que puede ser contralado mediante técnicas experimentales

[WW14]. Con esto en mente, se pueden conformar estructuras que posean estructuras de tres niveles, tipo Λ , tipo V o escalera que pueden acoplarse a corrientes y campos ópticos externos capaces de manipular a fondo sus propiedades ópticas intrínsecas. Como se demostró en el capítulo 4, las moléculas de punto cuántico de tres niveles, como los gases atómicos, poseen la virtud de volverse transparentes por los fenómenos de interferencia cuántica. El cálculo de estas propiedades puede ser encontrado mediante los formalismos usuales de teorías perturbativas pero también mediante métodos exactos en el cuadro rotante. Esto hace que las moléculas de puntos cuánticos, usualmente en forma de películas delgadas como se ilustra en la figura 5.1, sean unos buenas candidatas a aplicaciones interesantes como los switches o transistores ópticos.

- Los sistemas de moléculas de puntos cuánticos pueden ser acoplados a cavidades ópticas, que por diseño y geometría, tendrán la capacidad de confinar frecuencias específicas de radiación. En este tipo de estructuras, los acoples no resonantes han tenido un gran impacto en los estudios recientes de fotoluminiscencia y espectroscopia [Kan+08; Lau+11; Hoh10]. La fenomenología asociada a las observaciones ha sido atribuida a los acoples entre las moléculas y a los fonones generados por los modos vibracionales de los sólidos [Hoh+09; Maj+11]. Hemos encontrado que los acoples asociados a mecanismos de decoherencia fuera de resonancia, descritos por las ecuaciones (3.5.4) y (3.5.5) se producen efectos asociados de aumento o disminución del número medio de fotones, de una manera robusta como se muestra en la figura 5.8. La idea que surge de inmediato es en la posibilidad de preparar un estado de luz donde $\langle n \rangle = 1$. Los resultados expuestos en las figuras 5.9 y 5.10 indican que en presencia de mecanismos de emisión espontánea para la molécula, el mecanismo es robusto y se sobrepone aumentando de manera efectiva el número de excitaciones. Sin embargo cuando las pérdidas por fugas de la cavidad son considerables, disminuyen la efectividad del mecanismo en su totalidad. Además, la función $g^{(2)}(\tau)$ representada en la figura 5.12 indica que el estado formado en presencia de los distintos mecanismos de decoherencia usuales en las moléculas de puntos cuánticos, posee una naturaleza de estadística súper-poissoniana quedando descartada para ser una posible fuente de fotones individuales.
- Finalmente, como una posible continuación de este trabajo, se encuentra la posibilidad de aplicación de moléculas de puntos cuánticos acopladas a radiación fuera de resonancia, como posibles depósitos de energía, la asistencia fonónica puede tener un rol fundamental para mantener o aumentar el número medio de fotones dentro de la cavidad óptica a control. Además la teoría cuántica de la susceptibilidad es un área todavía en desarrollo, donde la radiación incidente sobre los materiales esté cuantizada y pueda presentar comportamientos diferentes según el estado de la radiación y recuperar las observaciones en la aproximación semiclásica de las bien conocidas observaciones sobre transparencia inducida electromagnéticamente, donde las soluciones exactas del cuadro rotante pueden desligarnos de la costumbre sobre las teorías perturbativas en virtud de resultados más confiables.

Referencias

- [AGP09] Alexia Auffeves, Jean-Michel Gérard y Jean-Philippe Poizat. «Pure emitter dephasing: A resource for advanced solid-state single-photon sources». En: *Physical Review A* 79.5 (2009), pág. 053838.
- [Alb18] Victor V Albert. «Lindbladians with multiple steady states: theory and applications». En: *arXiv preprint arXiv: 1802.00010* (2018).
- [Alo+07] Pablo Alonso-González y col. «Formation and optical characterization of single InAs quantum dots grown on GaAs nanoholes». En: *Applied Physics Letters* 91.16 (2007), pág. 163104.
- [Bay+01] M Bayer y col. «Coupling and entangling of quantum states in quantum dot molecules». En: *Science* 291.5503 (2001), págs. 451-453.
- [BIH91] K-J Boller, A Imamoglu y Stephen E Harris. «Observation of electromagnetically induced transparency». En: *Physical Review Letters* 66.20 (1991), pág. 2593.
- [BJ03] Brian Harold Bransden y Charles Jean Joachain. *Physics of atoms and molecules*. Pearson Education India, 2003.
- [Boy20] Robert W Boyd. *Nonlinear optics*. Academic Press, 2020.
- [BP02] Heinz-Peter Breuer y Francesco Petruccione. *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press, 2002.
- [DH14] Peter D Drummond y Mark Hillery. *The quantum theory of nonlinear optics*. Cambridge University Press, 2014.
- [Fan57] Ugo Fano. «Description of states in quantum mechanics by density matrix and operator techniques». En: *Reviews of Modern Physics* 29.1 (1957), pág. 74.
- [Fer00] Francisco M Fernández. *Introduction to perturbation theory in quantum mechanics*. CRC press, 2000.
- [FIM05] Michael Fleischhauer, Atac Imamoglu y Jonathan P Marangos. «Electromagnetically induced transparency: Optics in coherent media». En: *Reviews of Modern Physics* 77.2 (2005), pág. 633.
- [Fri78] Alberto Frigerio. «Stationary states of quantum dynamical semigroups». En: *Communications in Mathematical Physics* 63.3 (1978), págs. 269-276.
- [GKL13] Andrew D Greentree, Jens Koch y Jonas Larson. «Fifty years of Jaynes-Cummings physics». En: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 46.22 (2013), pág. 220201.
- [Hen+07] Kevin Hennessy y col. «Quantum nature of a strongly coupled single quantum dot-cavity system». En: *Nature* 445.7130 (2007), págs. 896-899.
- [HFI90] Stephen E Harris, JE Field y A Imamoglu. «Nonlinear optical processes using electromagnetically induced transparency». En: *Physical Review Letters* 64.10 (1990), pág. 1107.

- [Hoh+09] Ulrich Hohenester y col. «Phonon-assisted transitions from quantum dot excitons to cavity photons». En: *Physical Review B* 80.20 (2009), pág. 201311.
- [Hoh10] Ulrich Hohenester. «Cavity quantum electrodynamics with semiconductor quantum dots: Role of phonon-assisted cavity feeding». En: *Physical Review B* 81.15 (2010), pág. 155303.
- [Hug+11] S Hughes y col. «Influence of electron-acoustic phonon scattering on off-resonant cavity feeding within a strongly coupled quantum-dot cavity system». En: *Physical Review B* 83.16 (2011), pág. 165313.
- [JC63] Edwin T Jaynes y Frederick W Cummings. «Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser». En: *Proceedings of the IEEE* 51.1 (1963), págs. 89-109.
- [JNN12] J Robert Johansson, Paul D Nation y Franco Nori. «QuTiP: An open-source Python framework for the dynamics of open quantum systems». En: *Computer Physics Communications* 183.8 (2012), págs. 1760-1772.
- [Kan+08] M Kaniber y col. «Investigation of the nonresonant dot-cavity coupling in two-dimensional photonic crystal nanocavities». En: *Physical Review B* 77.16 (2008), pág. 161303.
- [Lar07] Jonas Larson. «Dynamics of the Jaynes-Cummings and Rabi models: old wine in new bottles». En: *Physica Scripta* 76.2 (2007), pág. 146.
- [Lau+11] A Laucht y col. «Nonresonant feeding of photonic crystal nanocavity modes by quantum dots». En: *Journal of Applied Physics* 109.10 (2011), pág. 102404.
- [LI01] MD Lukin y Ataç Imamoğlu. «Controlling photons using electromagnetically induced transparency». En: *Nature* 413.6853 (2001), págs. 273-276.
- [Maj+11] Arka Majumdar y col. «Phonon mediated off-resonant quantum dot-cavity coupling under resonant excitation of the quantum dot». En: *Physical Review B* 84.8 (2011), pág. 085309.
- [Man20] Daniel Manzano. «A short introduction to the Lindblad master equation». En: *AIP Advances* 10.2 (2020), pág. 025106.
- [Mar98] Jonathan P Marangos. «Electromagnetically induced transparency». En: *Journal of Modern Optics* 45.3 (1998), págs. 471-503.
- [Müc+10] Martin Mücke y col. «Electromagnetically induced transparency with single atoms in a cavity». En: *Nature* 465.7299 (2010), págs. 755-758.
- [Sak06] Jun John Sakurai. *Advanced quantum mechanics*. Pearson Education India, 2006.
- [Sch05] Maximilian Schlosshauer. «Decoherence, the measurement problem, and interpretations of quantum mechanics». En: *Reviews of Modern physics* 76.4 (2005), pág. 1267.
- [SK93] Bruce W Shore y Peter L Knight. «The Jaynes-Cummings model». En: *Journal of Modern Optics* 40.7 (1993), págs. 1195-1238.
- [SN14] J Sakurai y J Napolitano. *Modern Quantum Mechanics. 2-nd edition*. Person New International Edition, 2014.
- [SZ99] Marlan O Scully y M Suhail Zubairy. *Quantum optics*. American Association of Physics Teachers, 1999.
- [Tar02] Vasily E Tarasov. «Pure stationary states of open quantum systems». En: *Physical Review E* 66.5 (2002), pág. 056116.
- [Wan+07] Zh M Wang y col. «Nanoholes fabricated by self-assembled gallium nanodril on GaAs (100)». En: *Applied Physics Letters* 90.11 (2007), pág. 113120.

- [Wei+12] KM Weiss y col. «Coherent two-electron spin qubits in an optically active pair of coupled InGaAs quantum dots». En: *Physical Review Letters* 109.10 (2012), pág. 107401.
- [WW14] Jiang Wu y Zhiming M Wang. *Quantum dot molecules*. Springer, 2014.
- [Xie+95] Qianghua Xie y col. «Vertically self-organized InAs quantum box islands on GaAs (100)». En: *Physical review letters* 75.13 (1995), pág. 2542.
- [Yos+04] Tomoyuki Yoshie y col. «Vacuum Rabi splitting with a single quantum dot in a photonic crystal nanocavity». En: *Nature* 432.7014 (2004), págs. 200-203.
- [Zur03] Wojciech Hubert Zurek. «Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical». En: *Reviews of modern physics* 75.3 (2003), pág. 715.