

Evolución Temporal

En este capítulo nos concentraremos en la descripción de una de las transformaciones físicas más fundamentales de la Mecánica Cuántica: la evolución temporal. Es decir, cómo se describe el cambio de los estados con el tiempo. El Postulado 5 nos habla de una evolución muy particular que es la debida a una medición, y no tiene un análogo en la física clásica. Aquí nos concentraremos en la evolución de lo que llamamos sistemas *cerrados* (sistemas que no interactúan con agentes exteriores y por lo tanto no involucra a las mediciones), esta dinámica es el equivalente a la evolución Hamiltoniana de la Mecánica Clásica. La evolución temporal en este sentido es simplemente una transformación entre estados y puede ser descrita con el formalismo introducido en el capítulo anterior. Sin embargo, requiere un tratamiento especial ya que es uno de los pilares de la teoría cuántica y adquiere el estatus de postulado dentro de la misma.

7.1. Operador evolución temporal.

La evolución temporal es un caso fundamental de transformación física. Clásicamente, como fue descrito anteriormente, la evolución temporal está generada por el Hamiltoniano que determina completamente la dinámica. Esta afirmación es ciertamente un postulado que da lugar a las ecuaciones clásicas de movimiento. La misma idea es la que se adopta en la Mecánica Cuántica. Antes de continuar, es importante remarcar nuevamente que esto es un postulado (y no algo que puede deducirse de alguna otra manera). En efecto, el postulado se puede formular de la siguiente forma.

Postulado 6 *El operador de evolución temporal infinitesimal es generado por el Hamiltoniano.*

De esta manera, llamaremos $\hat{U}(t_2, t_1)$ al *operador evolución* que transforma estados a tiempo t_1 en estados a tiempo t_2 :

$$|\phi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2, t_1)|\phi(t_1)\rangle. \quad (7.1)$$

Al igual que sucede con las transformaciones físicas que vimos en el capítulo anterior, el operador evolución cumple con dos propiedades importantes: (i) Unitariedad: $\hat{U}^\dagger(t_2, t_1) \hat{U}(t_2, t_1) = \mathbb{1}$. (ii) Composición: $\hat{U}(t_3, t_2) \hat{U}(t_2, t_1) = \hat{U}(t_3, t_1)$, donde $t_3 > t_2 > t_1$. La unitariedad nos indica que la evolución temporal preserva el producto interno entre estados: dados dos estados $|\phi(t_1)\rangle$ y $|\psi(t_1)\rangle$ sometidos a la misma evolución temporal, se verifica que $\langle\psi(t_2)|\phi(t_2)\rangle = \langle\psi(t_1)|\phi(t_1)\rangle$. La segunda propiedad indica que, naturalmente, la evolución entre dos tiempos t_1 y t_3 , se puede descomponer a partir de la evolución con cualquier tiempo intermedio.

Teniendo en cuenta lo visto en el capítulo anterior y el Postulado 6, podemos escribir a primer orden en dt :

$$\hat{U}(t+dt, t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) dt.$$

Donde $\hat{H}(t)$ es el operador Hamiltoniano a tiempo t que tiene unidades de energía y, como sucede con los otros generadores que vimos, es un operador hermítico. En este caso es necesario incluir la constante que se determina empíricamente, y es la constante de Planck $\hbar = 1,05457 \times 10^{-34}$ Joules \times seg, para tener las unidades correctas. El Hamiltoniano, además puede depender del tiempo, de manera que no es inmediato deducir la forma del operador evolución para un desplazamiento temporal finito. Sin embargo, podemos deducir la ecuación diferencial que debe obedecer el operador evolución. En efecto, si queremos obtener una ecuación para $\hat{U}(t, t_0)$ podemos escribir que $\hat{U}(t+dt, t_0) = \hat{U}(t+dt, t) \times \hat{U}(t, t_0)$ y entonces

$$\hat{U}(t+dt, t_0) - \hat{U}(t, t_0) = (\hat{U}(t+dt, t) - \mathbb{1}) \hat{U}(t, t_0).$$

Por lo tanto, usando la expresión para el operador de evolución entre t y $t+dt$ resulta que

$$\hat{U}(t+dt, t_0) - \hat{U}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) dt.$$

Tomando el límite para $dt \rightarrow 0$ arribamos a la siguiente ecuación diferencial para el operador de evolución temporal

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0). \quad (7.2)$$

Esta ecuación puede integrarse y, de este modo, es posible obtener una expresión formal para el operador evolución $\hat{U}(t, t_0)$. Notemos primero que $\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$, luego podemos integrar la Ec. (7.2) a ambos lado y por lo tanto:

$$\hat{U}(t, t_0) - \mathbb{1} = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \hat{U}(t_1, t_0).$$

Utilizando esta última expresión es posible obtener $\hat{U}(t_1, t_0)$ en forma de integral y reemplazarlo en la misma ecuación, luego podemos iterar este procedimiento y llegar a la siguiente expresión en términos de una serie:

$$\begin{aligned}\hat{U}(t, t_0) &= \mathbb{1} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) + \dots \\ &+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \dots \hat{H}(t_n) + \dots \\ &\equiv \sum_n I_n\end{aligned}$$

donde $t_1 > t_2 > \dots > t_n > \dots$. Las integrales temporales se encuentran anidadas por lo que los tiempos aparecen siempre ordenados de izquierda (el mayor) a derecha (el menor).

Esta expresión puede reescribirse de manera compacta luego de definir el *producto temporalmente ordenado*, $\mathcal{T}[A(t_1)A(t_2)] = \theta(t_1 - t_2)A(t_1)A(t_2) + \theta(t_2 - t_1)A(t_2)A(t_1)$, esta expresión se encuentra evaluada para dos operadores, pero la generalización de este producto a n operadores es inmediata. Tomemos el tercer término de la serie ($n = 2$) que podemos reescribir de la siguiente manera:

$$I_2 \equiv \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \theta(t_1 - t_2) \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2),$$

donde incluimos la función $\theta(t_1 - t_2)$ para eliminar la integral en la región $t_2 > t_1$. Es fácil ver ahora que la integral cuando $t_1 > t_2$ es equivalente a realizar la integral sobre $t_2 > t_1$ pero intercambiando los operadores. Es decir, este término puede reescribirse de la siguiente manera:

$$I_2 = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \frac{1}{2} \left\{ \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \theta(t_1 - t_2) \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \theta(t_2 - t_1) \hat{H}(t_2) \hat{H}(t_1) \right\}.$$

Ahora a partir de la definición del producto temporalmente ordenado llegamos a:

$$I_2 = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathcal{T}[\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2)].$$

Luego, realizando el mismo procedimiento para el elemento n -ésimo de la serie donde hay $n!$ ordenes posibles de operadores a tiempos t_1, \dots, t_n :

$$I_n = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{T}[\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \dots \hat{H}(t_n)]. \quad (7.3)$$

Y, finalmente, el operador evolución puede escribirse en forma compacta como:

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_n I_n \equiv \mathcal{T} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t')} \right]. \quad (7.4)$$

donde el n -ésimo elemento de esta serie se encuentra dado por la Ec. (7.4). A esta serie se la conoce como *Serie de Dyson*. La solución en términos de series se conoce como *serie de Dyson* que, como veremos a continuación, es posible simplificar en determinadas situaciones.

(i) Consideremos ahora el caso particular en que el *Hamiltoniano conmuta a todo tiempo*, esto equivale a $[\hat{H}(t), \hat{H}(t')] = 0$ para todo par de tiempos t y t' . Es fácil ver que por ejemplo, $\mathcal{T}[\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)] = (\theta(t_1 - t_2) + \theta(t_2 - t_1))\hat{H}(t_2)\hat{H}(t_1) = \hat{H}(t_2)\hat{H}(t_1)$. Es decir, el producto temporalmente ordenado de operadores actúa trivialmente sobre cualquier producto $\mathcal{T}[\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\cdots\hat{H}(t_n)] = \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\cdots\hat{H}(t_n)$, y por lo tanto la Ec. (7.4) resulta:

$$\begin{aligned} I_n &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\cdots\hat{H}(t_n). \\ &= \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t')\right)^n. \end{aligned}$$

De manera que en este caso $\hat{U}(t, t_0) = \sum_n I_n$, y el operador evolución adquiere esta expresión simple:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t')}. \quad (7.5)$$

(ii) Obviamente, la situación más sencilla es aquella en la cual el *Hamiltoniano es independiente del tiempo*. En ese caso, el operador de evolución es:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)}. \quad (7.6)$$

Tal como lo describimos más arriba, el operador $\hat{U}(t, t_0)$ es el que nos permite conocer el estado a tiempo t , si conocemos el estado a tiempo t_0 . En algún sentido, el operador nos permite actualizar la información que poseemos sobre el sistema. Como vimos, el estado es información (por ejemplo, es la información recogida a partir de los resultados de un conjunto de experimentos que se realiza en el proceso de preparación del sistema). Así que la dinámica actualiza esa información. Pero esta no es la única manera de describir la evolución temporal en Mecánica Cuántica. Veremos dos enfoques, uno debido a Schrödinger y otro debido a Heisenberg. Ambos son formulaciones totalmente equivalentes, pero en cada uno de ellos la evolución temporal de un sistema se describe de manera distinta, siempre apelando al uso del operador de evolución \hat{U} . Pero antes, es importante destacar una de las consecuencias más notables e importantes de la unitariedad de la evolución temporal.

7.2. Consecuencias de la Unitariedad: No es posible clonar un estado cuántico

La mecánica cuántica acepta el hecho de que no es posible medir las propiedades de un sistema físico sin alterar su estado. La medición es, inevitablemente, un

proceso de interacción y la Mecánica Cuántica establece un límite preciso (cuantitativo) sobre la forma en que la interacción generada en el proceso de medición afecta al estado del sistema medido (y establece que esta perturbación nunca puede hacerse infinitamente pequeña). Sin embargo, podría haber una vía de escape para este argumento que, aparentemente, nos permitiría obtener toda la información sobre un sistema sin perturbar su estado. En efecto, supongamos que tenemos un sistema preparado en un estado descrito por el vector $|\phi\rangle$. Ahora podemos asumir que mediante algún procedimiento físico podemos “copiar” (o clonar) dicho estado. ¿Qué entendemos por eso? Supongamos que tenemos otro sistema preparado inicialmente en algún estado conocido, que arbitrariamente llamaremos $|0\rangle$. El estado inicial del conjunto formado por los dos sistemas (a los que denominaremos A y B respectivamente) es $|\Phi\rangle_{AB} = |\phi\rangle_A \otimes |0\rangle_B$. Realizar una copia del estado $|\phi\rangle$ quiere decir lograr que el conjunto $A - B$ evolucione de alguna manera (con algún operador de evolución temporal que denominaremos \hat{U}_{copy}) de modo tal que el estado inicial se transforme de la siguiente manera:

$$\hat{U}_{copy}(|\phi\rangle_A \otimes |0\rangle_B) \rightarrow |\phi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B. \quad (7.7)$$

En este procedimiento, el sistema B pasa a estar en el mismo estado en el que originalmente se encontraba el sistema A , mientras que A permanece en el mismo estado que antes. Evidentemente, si esto fuera posible, podríamos realizar múltiples copias del estado $|\phi\rangle$, reteniendo el original en el sistema A . De ese modo, podríamos realizar tantos experimentos como los que quisieramos sobre las copias, reteniendo el original. En ese caso, ¿sería posible medir sin perturbar! Es notable que este procedimiento de copiado o clonado está prohibido por el postulado de evolución temporal que establece que la evolución es unitaria. Este hecho fue notado por Wootters y Zurek a fines de la década de 1980 y se conoce con el nombre de *no cloning theorem*, teniendo grandes consecuencias sobre el procesamiento cuántico de la información.

La demostración de la no clonabilidad cuántica es muy simple. Supongamos que existe el operador de copia \hat{U}_{copy} y lo aplicamos para copiar dos estados distintos $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$. Para realizar las copias tendremos que aplicar el operador \hat{U}_{copy} a los estados $|\Phi\rangle_{AB} = |\phi\rangle_A \otimes |0\rangle_B$ y $|\Psi\rangle_{AB} = |\psi\rangle_A \otimes |0\rangle_B$. Haciendo esto obtenemos los estados

$$\begin{aligned} |\Phi'\rangle_{AB} &= \hat{U}_{copy}|\Phi\rangle_{AB} = |\phi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B, \\ |\Psi'\rangle_{AB} &= \hat{U}_{copy}|\Psi\rangle_{AB} = |\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B. \end{aligned}$$

Siendo que la evolución temporal es unitaria, podemos afirmar que

$$\langle \Phi' | \Psi' \rangle_{AB} = \langle \Phi | \Psi \rangle_{AB}.$$

Esta ecuación nos conduce inmediatamente a que la identidad

$$\langle \phi | \psi \rangle^2 = \langle \phi | \phi \rangle \langle \psi | \psi \rangle,$$

debe ser válida para todo par de estados $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$. Esto es evidentemente absurdo (la identidad solamente vale si los estados son idénticos u ortogonales). El absurdo proviene de suponer la existencia de \hat{U}_{copy} . Por lo tanto, no es posible copiar un estado como consecuencia de la unitariedad de la evolución temporal. Es notable que este postulado sea el que nos rescata del posible colapso de otra de las reglas básicas de la mecánica cuántica: la imposibilidad de medir sin perturbar.

7.3. Representación de Schrödinger

Esta descripción de la evolución temporal es la que implícitamente estuvimos usando hasta ahora, y se caracteriza por representar a los estados en función del tiempo. Es decir, si el sistema se encuentra inicialmente en un dado estado $|\phi(t_0)\rangle$, la dinámica lo transforma en otro estado a otro tiempo. El operador de evolución nos permite encontrar un estado en función del otro: $|\phi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\phi(t_0)\rangle$. Teniendo en cuenta que hemos demostrado que el operador de evolución temporal satisface una ecuación diferencial (Ec. (7.2)), la expresión anterior nos permite deducir una ecuación diferencial para el estado como función del tiempo. Esta es:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\phi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\phi(t)\rangle. \quad (7.8)$$

Esta es la famosa ecuación de Schrödinger (escrita en forma un tanto abstracta) que nos dice cómo evoluciona el vector que describe al estado. Esencialmente nos dice que el ritmo de variación del estado está dado por el Hamiltoniano (la energía del sistema). En materias anteriores han aprendido que la ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial en derivadas parciales. Veamos que la ecuación anterior puede escribirse de ese modo.

Consideremos una partícula que se mueve en tres dimensiones sometida a un potencial central cuyo Hamiltoniano es de la forma $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$. En este caso, el espacio de estados $\mathcal{H}_{\vec{r}}$ es el producto tensorial de los espacios que describen a partículas en movimiento en las tres direcciones cartesianas. En efecto $\mathcal{H}_{\vec{r}} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z$. En este espacio, la base de autoestados de la posición formada por los estados $|\vec{r}\rangle$ es el producto tensorial de las tres bases formadas respectivamente por los estados $|x\rangle$, $|y\rangle$ y $|z\rangle$. Es decir $|\vec{r}\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle = |x, y, z\rangle$, y dado un estado $|\phi\rangle$ su función de onda se representa en forma similar al caso unidimensional $\phi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \phi \rangle$. Por lo tanto, la ecuación (7.8) puede escribirse en representación posición de la siguiente manera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{r} | \phi(t) \rangle = \langle \vec{r} | \hat{H} | \phi(t) \rangle.$$

La función de onda es $\phi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \phi(t) \rangle$ y el término de la energía cinética puede ser reescrito usando el resultado que obtuvimos anteriormente: $\langle \vec{r} | \hat{p}^2 | \phi(t) \rangle = -\hbar^2 \vec{\nabla}^2 \phi(\vec{r}, t)$. De este modo, la ecuación anterior se reduce a su forma originalmente escrita por Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) = \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(r) \right\} \phi(\vec{r}, t). \quad (7.9)$$

7.3.1. Ejemplo: Hamiltoniano independiente del tiempo

Resolver la ecuación de Schrödinger, en general, es una tarea difícil. Para sistemas cuyos Hamiltonianos no dependen del tiempo, se reduce a encontrar los autovalores y autovectores del Hamiltoniano. En efecto, supongamos que conocemos los vectores $|\psi_n\rangle$ tales que

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle.$$

Teniendo en cuenta que el Hamiltoniano es hermítico sabemos que los autovalores son reales y los autovectores son ortogonales. Como los estados $|\psi_n\rangle$ forman una base del espacio de estados, podemos escribir al estado del sistema en cualquier instante como combinación lineal de estos vectores. Es decir,

$$|\phi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\psi_n\rangle.$$

Reemplazando esta expresión en la ecuación (7.8) y usando la ortogonalidad de los vectores $|\psi_n\rangle$, podemos demostrar que la ecuación de Schrödinger se reduce al siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales para los coeficientes $c_k(t)$:

$$\dot{c}_k(t) = -i \frac{E_k}{\hbar} c_k(t).$$

Esta ecuación puede resolverse fácilmente, y por lo tanto podemos escribir al estado en cualquier instante como:

$$|\phi(t)\rangle = \sum_k c_k(t_0) e^{-i\frac{E_k}{\hbar}(t-t_0)} |\psi_k\rangle.$$

Esta es la solución formal de la ecuación de Schrodinger para sistemas cuyo Hamiltoniano es independiente del tiempo. Lo único que necesitamos hacer es escribir el estado inicial como combinación lineal de los autoestados del Hamiltoniano. El estado a tiempo t tendrá la misma expresión salvo por el hecho de que aparecen las fases $\exp(-iE_k t/\hbar)$ multiplicando a cada coeficiente $c_k(0)$. Por otro lado, es sencillo mostrar que conocidos los autovalores y autovectores del Hamiltoniano, el operador evolución de la ec. (7.6) puede expresarse como:

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_k e^{-i\frac{E_k}{\hbar}(t-t_0)} |\psi_k\rangle\langle\psi_k|. \quad (7.10)$$

Además, luego podemos verificar que la expresión anterior para la evolución temporal del estado también se obtiene a partir de $|\phi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\phi(t_0)\rangle$.

Finalmente, es interesante notar que usando la última expresión podemos calcular la evolución temporal del valor medio de cualquier operador \hat{A} . En efecto, esto resulta ser:

$$\begin{aligned} \langle\phi(t)|\hat{A}|\phi(t)\rangle &= \langle\phi(t_0)|\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0)|\phi(t_0)\rangle \\ &= \sum_{k,m} c_k(t_0) c_m^*(t_0) e^{-i\omega_{km}(t-t_0)} \langle\psi_m|\hat{A}|\psi_k\rangle \end{aligned}$$

donde las frecuencias ω_{km} , denominadas "frecuencias de Bohr" del sistema, se definen como $\omega_{km} = (E_k - E_m)/\hbar$.

Cuando el Hamiltoniano depende del tiempo, el problema es técnicamente más complejo y será discutido (sobre todo apelando a algunos ejemplos importantes) más adelante en este capítulo. Esta forma de tratar la evolución temporal, usando la representación de Schrödinger, es conceptualmente sencilla y puede usarse para hacer cálculos de manera simple y sistemática. Sin embargo, existe otro enfoque que no sólo aporta una visión diferente, sino que además permite abordar problemas desde otra perspectiva que resulta más útil en determinados casos.

7.4. Representación de Heisenberg

El objetivo de la Mecánica Cuántica es realizar predicciones sobre los resultados de los experimentos. Pero, como vimos, las únicas predicciones son de naturaleza estadística, de manera que se predice son probabilidades. Estas probabilidades siempre se calculan como valores medios de ciertos operadores (los proyectores sobre el subespacio asociado al autovalor medido). En consecuencia, podríamos decir que el cálculo de valores medios observables (y cómo estos varían con el tiempo) es fundamental para realizar predicciones en Mecánica Cuántica. Tal como dijimos más arriba, esto puede hacerse apelando a la representación de Schrödinger evolucionando los estados y obteniendo:

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle(t) &= \langle \phi(t) | \hat{A} | \phi(t) \rangle \\ &= \langle \phi(0) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) | \phi(0) \rangle.\end{aligned}\tag{7.11}$$

A partir de aquí, para simplificar la notación, utilizaremos $\hat{U}(t) \equiv \hat{U}(t, 0)$. Teniendo en cuenta esta expresión vemos que en realidad es totalmente equivalente atribuir la evolución temporal al vector que representa el estado del sistema (tal como hacíamos en la representación de Schrodinger) a atribuírsela a los operadores. En efecto, dado un operador \hat{A} podemos definir un operador $\hat{A}_H(t)$ en representación de Heisenberg¹ que evoluciona en el tiempo de modo tal que

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t).\tag{7.12}$$

La diferencia entre $\hat{A}_H(t)$ y \hat{A} es clara. El operador \hat{A} no tiene dinámica, es decir que no depende del tiempo a menos que exista alguna dependencia explícita con este parámetro (que puede ser introducida por el acoplamiento del sistema con alguna fuente externa que varíe con el tiempo de alguna forma predeterminada). En cambio, la dependencia temporal del operador $\hat{A}_H(t)$ se origina en el operador de evolución $\hat{U}(t)$ que aparece en la expresión anterior. Por supuesto, si \hat{A} depende explícitamente del tiempo, esta dependencia explícita también afectará a $\hat{A}_H(t)$. Asumiremos que existe es dependencia simplemente para derivar la ecuación más

¹En la literatura se suele además utilizar la notación \hat{A}_S para denotar a los operadores en representación de Schrödinger. Aquí no adoptaremos esa convención, es decir, los operadores sin subíndice se encuentran en la representación usual de Schrödinger.

general. Entonces a partir de la definición del operador $\hat{A}_H(t)$ y la Ec. 7.2 podemos deducir una ecuación diferencial que gobierna su evolución:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H(t) = -\hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{A} \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{H} \hat{U}(t) + i\hbar \hat{U}^\dagger(t) \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right) \hat{U}(t).$$

Finalmente, a partir de la definición de operadores en la representación de Heisenberg, que indicamos con el subíndice H , llegamos a:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)] + \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right)_H. \quad (7.13)$$

Ahora si además asumimos que el operador \hat{A} no depende explícitamente del tiempo, algo que sucede en la mayoría de las situaciones de interés físico, entonces:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)]. \quad (7.14)$$

En este punto, cabe recordar que el conmutador $[\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)] = \hat{U}^\dagger(t) [\hat{A}, \hat{H}] \hat{U}(t)$ es simplemente el conmutador usual en representación de Heisenberg.

Esta forma de tratar a la evolución temporal, donde los operadores evolucionan pero el vector que describe al estado permanece inmutable, permite resolver de manera muy simple algunos problemas que ilustraremos más adelante. Además, tal como veremos, es la forma más simple de describir la evolución del campo electromagnético. Y su interpretación física sencilla: el estado es información que se genera al prepararlo. Esa información permanece inmutable (el vector que describe al sistema es siempre el mismo, no evoluciona) mientras que lo que cambian son las propiedades observables del sistema. Pero en cualquier caso estas son cuestiones de interpretación. En efecto, en la representación de Heisenberg los valores medios de los operadores se calculan como:

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \langle \phi_H | \hat{A}_H(t) | \phi_H \rangle, \quad (7.15)$$

donde el estado en la representación de Heisenberg es $|\phi_H\rangle = |\phi(0)\rangle$. Por lo tanto, estas cantidades en ambas representaciones (Ecs. (7.11) y (7.15)) son idénticas y conducen a las mismas predicciones físicas.

Finalmente, es importante mencionar la existencia de un vínculo estrecho entre ambas representaciones que permite extraer información físicamente relevante. Supongamos que tenemos un estado $|\psi_H\rangle = |\psi(0)\rangle$ que es autoestado del operador $\hat{A}_H(t)$ con autovalor $a_0(t)$. Entonces, podemos afirmar que si evolucionamos al estado $|\psi(0)\rangle$ hasta el instante t (en la representación de Schrödinger), obtendremos un autoestado del operador \hat{A} con el mismo autovalor $a_0(t)$. Esto surge simplemente de considerar que si:

$$\hat{A}_H(t) |\psi(0)\rangle = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle = a_0(t) |\psi(0)\rangle,$$

entonces $\hat{A} \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle = a_0(t) \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle$, y por lo tanto

$$\hat{A} |\psi(t)\rangle = a_0(t) |\psi(t)\rangle.$$

Es decir, si logramos conocer por algún medio el operador $\hat{A}_H(t)$ y encontramos sus autovectores entonces sabremos cuáles son los estados iniciales que, en la representación de Schrödinger, dan lugar a autoestados de \hat{A} a tiempo t . Veamos algunas aplicaciones inmediatas de este enfoque.

7.4.1. Ejemplo 1: Ecuaciones de Heisenberg para el oscilador armónico.

Consideremos el oscilador armónico en una dimensión, cuyo Hamiltoniano es:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2\hat{x}^2$$

El Hamiltoniano cuántico en este caso, se encuentra definido a partir del Hamiltoniano clásico simplemente reemplazando las variables clásicas por operadores. En general, este es el procedimiento que se adopta para obtener el Hamiltoniano cuántico de sistemas con análogos clásicos. Cuando se encuentre alguna ambigüedad, por ejemplo cuando aparezcan producto de x y p , el producto de operadores se tomará de modo que el Hamiltoniano final sea hermítico (recurriendo a anti-conmutadores por ejemplo). En general, para sistemas físicos sin análogo clásico debemos acertar la forma del Hamiltoniano de manera que las predicciones que resulten coincidan con los resultados experimentales.

En este caso tenemos un Hamiltoniano independiente del tiempo y estaremos interesados en describir a los operadores momento y posición en la representación de Heisenberg. Dado que estos operadores no tienen dependencia temporal explícita utilizaremos la Ec. (7.14) para obtener las respectivas ecuaciones de movimiento. En este sentido, basta con evaluar $[\hat{x}, \hat{H}]$ y $[\hat{p}, \hat{H}]$. Teniendo en cuenta la siguiente igualdad: $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$, es sencillo mostrar que $[\hat{x}, \hat{p}^2] = 2i\hbar\hat{p}$ y $[\hat{p}, \hat{x}^2] = -2i\hbar\hat{x}$. Finalmente:

$$\begin{aligned}\dot{\hat{x}}_H(t) &= \frac{\hat{p}_H(t)}{m}, \\ \dot{\hat{p}}_H(t) &= -m\omega^2\hat{x}_H(t).\end{aligned}$$

Estas ecuaciones son idénticas a las ecuaciones clásicas de un oscilador y por lo tanto pueden resolverse fácilmente a partir de las condiciones iniciales $\hat{x}_H(0) = \hat{x}$, $\hat{p}_H(0) = \hat{p}$ (ya que a inicialmente ambas representaciones coinciden):

$$\begin{aligned}\hat{x}_H(t) &= \hat{x}\cos(\omega t) + \frac{\hat{p}}{m\omega}\sin(\omega t), \\ \hat{p}_H(t) &= \hat{p}\cos(\omega t) - m\omega\hat{x}\sin(\omega t).\end{aligned}$$

Notemos que los operadores $\hat{x}_H(t)$ y $\hat{p}_H(t)$ oscilan, y coinciden con \hat{x} y \hat{p} para ciertos tiempos, tal como sucede con su contraparte clásica. Por lo tanto, lo mismo sucede con los valores medios de esas cantidades para cualquier estado inicial. Estas consecuencias son evidentes a partir del análisis de las ecuaciones de Heisenberg pero demostrarlas usando la representación de Schrödinger resulta mucho más trabajoso.

7.4.2. Teorema de Ehrenfest

Usando las ecuaciones de Heisenberg podemos deducir inmediatamente ecuaciones de evolución para los valores medios de cualquier operador. Supongamos que el sistema es una partícula que se mueve en una dimensión con un Hamiltoniano independiente del tiempo $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{x})$. En ese caso, las ecuaciones de Heisenberg son

$$\begin{aligned}\dot{\hat{x}}_H(t) &= \frac{\hat{p}_H(t)}{m} \\ \dot{\hat{p}}_H(t) &= -V'(\hat{x}_H(t))\end{aligned}$$

Donde hemos usado que $[\hat{p}, g(\hat{x})] = -i\hbar\partial_x g(\hat{x})$, que se obtiene de usar recursivamente $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$, y por completitud incluimos la relación análoga $[\hat{x}, f(\hat{p})] = i\hbar\partial_p f(\hat{p})$.

Estas ecuaciones para los operadores son idénticas a las ecuaciones de Hamilton del sistema clásico. Sin embargo, cuando tomamos el valor medio en cualquier estado $|\psi(0)\rangle$ obtenemos las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned}\langle \dot{\hat{x}}_H(t) \rangle &= \frac{\langle \hat{p}_H(t) \rangle}{m}, \\ \langle \dot{\hat{p}}_H(t) \rangle &= -\langle V'(\hat{x}_H(t)) \rangle.\end{aligned}$$

Este análogo cuántico de las ecuaciones de Hamilton se conoce como *teorema de Ehrenfest*, que naturalmente puede extenderse a un movimiento en tres dimensiones. Sin embargo, existe una diferencia fundamental que aparece en ciertos potenciales no lineales donde $\langle V'(\hat{x}) \rangle \neq V'(\langle \hat{x} \rangle)$. En estos potenciales los valores medios de posición y momento *no* siguen las ecuaciones de Hamilton. Es decir, los valores medios evolucionan con las ecuaciones clásicas sólo en ciertos casos, como por ejemplo sucede con el oscilador armónico que vimos en la sección anterior. Es posible preparar estados para los cuales la función de onda se encuentre suficientemente localizada de modo tal que el valor medio del potencial es aproximadamente igual al potencial evaluado en el valor medio de la posición. Pero esta relación se perderá para tiempos largos de la evolución. El tiempo para el cual los valores medios cuánticos se desvían de sus contrapartes clásicas es denominado tiempo de Ehrenfest.

7.4.3. Ejemplo 2: Spin 1/2 en un campo magnético

Consideremos una partícula de spin 1/2 en reposo en un campo magnético uniforme de intensidad B_0 que apunta en la dirección del versor \vec{e}_n . En ese caso, el Hamiltoniano es:

$$\hat{H} = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B}.$$

donde $\vec{S} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ es el operador de spin. Es sencillo entonces encontrar las ecuaciones de Heisenberg para las tres componentes del spin. Estas ecuaciones son:

$$\dot{\vec{S}}_H(t) = \vec{S}_H(t) \wedge \vec{\omega},$$

donde $\vec{\omega} = \gamma B_0 \vec{e}_n$. La interpretación de estas ecuaciones es muy sencilla: el vector $\vec{S}_H(t)$ precece alrededor de la dirección \vec{e}_n con una velocidad angular ω llamada *frecuencia de Larmor*. Es decir, la componente de \vec{S} en la dirección de \vec{e}_n se conserva mientras las componentes perpendiculares rotan con velocidad angular ω . Tomando los valores medios en esta ecuación obtenemos inmediatamente las ecuaciones de evolución para las componentes del vector de Bloch. En este caso, el valor medio de \hat{S} evoluciona como su contraparte clásica (ver Fig. 7.1).

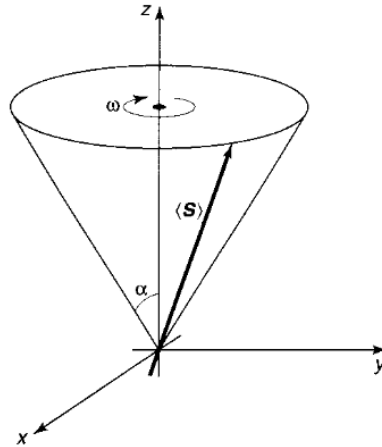


Figura 7.1: Precesión del valor medio del spin en un campo magnético uniforme en la dirección z . La componente paralela a la dirección del campo se conserva mientras que las componentes ortogonales al campo oscilan con la frecuencia de Larmor ω .

7.5. Representación de Interacción

En la mayoría de los casos la ecuación de Schrödinger no puede ser resuelta exactamente. Ejemplos típicos de este tipo son casos en los que no es posible encontrar expresiones analíticas para los autoestados del Hamiltoniano. También surgen dificultades para resolver esta ecuación (al menos siguiendo la estrategia descrita en la sección anterior) con Hamiltonianos que dependen explícitamente del tiempo. Veremos aquí que en muchos casos resulta muy útil usar una descripción de la evolución temporal, llamada *representación de interacción*, que conceptualmente es un híbrido entre las representaciones de Heisenberg y Schrödinger. Este enfoque resulta útil cuando sabemos cómo resolver la dinámica de un determinado Hamiltoniano \hat{H}_0 , y el sistema de interés evoluciona con un Hamiltoniano de la forma $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$. En este caso a \hat{V} se lo suele llamar *hamiltoniano de interacción*, y puede describir términos de interacción de \hat{H}_0 con otros sistemas o bien entre componentes del mismo sistema.

Consideremos el operador de evolución $\hat{U}_0(t)$ asociado al Hamiltoniano \hat{H}_0 . Este operador satisface la ecuación $i\hbar\partial_t\hat{U}_0(t) = \hat{H}_0\hat{U}_0(t)$. Por el contrario, el operador de evolución completo satisface la ecuación $i\hbar\partial_t\hat{U}(t) = \hat{H}\hat{U}(t)$. Supongamos que

el estado del sistema en un dado instante $t = 0$ es $|\phi(0)\rangle$. Definiremos al estado del sistema en la representación de interacción, al que denotaremos $|\phi_I(t)\rangle$, como aquel que evoluciona de acuerdo a la ecuación

$$|\phi_I(t)\rangle = \hat{\mathcal{U}}_0^\dagger(t) \hat{\mathcal{U}}(t) |\phi(0)\rangle. \quad (7.16)$$

Es decir, el estado $|\phi_I(t)\rangle$ se obtiene a partir del estado del sistema en la representación de Schrödinger $|\phi(t)\rangle$ descontando la evolución asociada al Hamiltoniano H_0 . Por otra parte, para todo operador \hat{A} definiremos su representación de interacción de la siguiente manera

$$\hat{A}_I(t) = \hat{\mathcal{U}}_0^\dagger(t) \hat{A} \hat{\mathcal{U}}_0(t). \quad (7.17)$$

Es decir, los operadores en la representación de interacción evolucionan tal como lo harían en la representación de Heisenberg si el Hamiltoniano fuera \hat{H}_0 . Es evidente que si tomamos el valor medio de cualquier operador $\hat{A}_I(t)$ en el estado $|\phi_I(t)\rangle$, obtenemos

$$\langle \phi_I(t) | \hat{A}_I(t) | \phi_I(t) \rangle = \langle \phi(t) | \hat{A} | \phi(t) \rangle = \langle \phi_H(t) | \hat{A}_H(t) | \phi_H(t) \rangle$$

El estado en la representación de interacción satisface una ecuación muy sencilla que se deduce a partir de su definición. En efecto,

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t |\phi_I(t)\rangle &= i\hbar (\partial_t \hat{\mathcal{U}}_0^\dagger(t)) \hat{\mathcal{U}}(t) |\phi(0)\rangle + i\hbar \hat{\mathcal{U}}_0^\dagger(t) (\partial_t \hat{\mathcal{U}}(t)) |\phi(0)\rangle \\ &= \hat{\mathcal{U}}_0^\dagger(t) (\hat{H} - \hat{H}_0) \hat{\mathcal{U}}(t) |\phi(0)\rangle \\ &= \hat{\mathcal{U}}_0^\dagger(t) V \hat{\mathcal{U}}_0(t) \hat{\mathcal{U}}_0^\dagger(t) \hat{\mathcal{U}}(t) |\phi_S(0)\rangle \end{aligned}$$

Finalmente, la ecuación de evolución del estado en la representación interacción resulta ser:

$$i\hbar \partial_t |\phi_I(t)\rangle = \hat{V}_I(t) |\phi_I(t)\rangle. \quad (7.18)$$

Entonces, el estado en la representación de interacción evoluciona solamente movido por el hamiltoniano de interacción. Esta representación resulta sumamente útil para estudiar problemas dependientes del tiempo, entre los cuales veremos un ejemplo muy importante a continuación.

7.5.1. Ejemplo 1: Oscilaciones de Rabi

Consideraremos un sistema de dos niveles (una partícula de spin 1/2 o un átomo de dos niveles). El Hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H}_0 = E_e |e\rangle\langle e| + E_g |g\rangle\langle g|.$$

La frecuencia de Bohr del sistema es $\omega_{eg} = (E_e - E_g)/\hbar$. Cuando el sistema es irradiado por un campo electromagnético de frecuencia ω , la interacción entre el átomo y el campo se modela mediante el Hamiltoniano

$$\hat{V} = \hbar \Omega |e\rangle\langle g| e^{-i\omega t} + h.c.,$$

donde *h.c.* es la abreviación correspondiente a hermítico conjugado del primer término.

Hay diversas situaciones de interés físico que se describen de este modo. Mencionaremos solamente dos de ellas. En primer lugar, el sistema de dos niveles puede ser el asociado al spin nuclear de ciertos elementos (como el hidrógeno, el C_{13} , etc). En ese caso el Hamiltoniano H_0 está generado por un campo magnético intenso orientado en alguna dirección (que llamaremos \vec{e}_z). Es decir, $H_0 = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, que puede reescribirse como $\hat{H}_0 = \hbar\omega_{eg}(|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|)/2$. Esto es lo que ocurre en un resonador magnético en el que se aprovecha el fenómeno que se denomina RMN (resonancia magnética nuclear) y podemos describir con el modelo en cuestión. En ese caso, la diferencia de energías entre el nivel excitado y el fundamental es tal que la frecuencia de Bohr está en el rango de las microondas. Por ejemplo, para un espectrómetro con un imán de 11 Tesla (como el que existen en la FCEyN) esa frecuencia es de 500MHz (las frecuencias de resonancia de otros espines nucleares son menores ya que son inversamente proporcionales a la masa del isótopo en cuestión). En este caso, el campo externo es generado por bobinas que producen un campo magnético variable en el plano perpendicular al campo \vec{B} . Para el caso en que el campo de radio frecuencias sea $\vec{B}_{rf}(t) = B_0(\cos \omega t \vec{e}_x + \sin \omega t \vec{e}_y)$ el Hamiltoniano de interacción resulta ser tal como el que describimos más arriba.

Otra aplicación importante es la que veremos más adelante cuando estudiemos la interacción entre átomos y fotones. En ese contexto, el sistema de dos niveles representa a un subespacio de todos los niveles atómicos cuya dimensión es igual a dos. Estos niveles son los únicos que son explorados (poblados) en el experimento y por ese motivo el átomo puede aproximarse por un sistema de dos niveles. En la aplicación que tenemos en vista, estos dos niveles serán estados altamente excitados asociados a átomos de Rydberg y son tales que la frecuencia de Bohr también está en el rango de las micro ondas. El problema que estamos estudiando es relevante para describir lo que sucede con un átomo de estas características que ingresa a un dispositivo que se denomina “zona de Ramsey”: en el cual interactúa con un campo electromagnético (clásico) con el que se acopla por vía del dipolo eléctrico. El campo oscila en el rango de las micro ondas y, como veremos, el Hamiltoniano anterior también es una buena descripción de este problema.

Resolveremos la dinámica del sistema usando la representación de interacción (también podremos obtener el estado en la representación de Schrödinger). Lo interesante es que veremos que la interacción con el campo induce un comportamiento oscilante del sistema entre $|e\rangle$ y $|g\rangle$. En efecto, podremos obtener una fórmula simple para la probabilidad de encontrar al sistema en cualquiera de estos estados y veremos que la misma depende fuertemente de la relación entre la frecuencia del forzado (ω) y la frecuencia de Bohr del sistema.

Entonces \hat{H}_0 será el Hamiltoniano para el cual podemos obtener el operador evolución asociado $\hat{U}_0(t) = \exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar)$. El Hamiltoniano de interacción en la representación de interacción es

$$\begin{aligned}\hat{V}_I(t) &= \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{V} \hat{U}_0(t) \\ &= \hbar \Omega e^{i\delta t} |e\rangle\langle g| + h.c.\end{aligned}$$

donde definimos $\delta = \omega_{eg} - \omega$ como la desintonía entre el campo y el átomo (o el espín). La desintonía indica cuán distinta es la frecuencia del campo de la frecuencia de Bohr que caracteriza la transición entre los estados $|e\rangle$ y $|g\rangle$. Para deducir la expresión anterior basta con usar la identidad:

$$\hat{U}_0^\dagger(t) |e\rangle\langle g| \hat{U}_0(t) = e^{i(E_e - E_g)t/\hbar}.$$

Ahora podemos escribir el estado más general en la representación de interacción (Eq. (7.16)) como combinación lineal en la base de dos niveles:

$$\begin{aligned} |\psi_I(t)\rangle &= \hat{U}_0^\dagger(t) |\psi(t)\rangle, \\ &= \alpha(t) |e\rangle + \beta(t) |g\rangle. \end{aligned}$$

La ecuación de evolución del estado, análoga a la ecuación de Schrödinger, en la representación de interacción es:

$$i\hbar\partial_t |\psi_I(t)\rangle = \hat{V}_I(t) |\psi_I(t)\rangle.$$

Esta ecuación se reduce al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales para $\alpha(t)$ y $\beta(t)$:

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}(t) &= -i\Omega \beta(t) e^{i\delta t}, \\ \dot{\beta}(t) &= -i\Omega \alpha(t) e^{-i\delta t}. \end{aligned}$$

El sistema de dos ecuaciones diferenciales de primer orden es equivalente a la siguiente ecuación de segundo orden para α :

$$\ddot{\alpha}(t) + \Omega^2 \alpha(t) - i\delta \dot{\alpha}(t) = 0.$$

Proponiendo soluciones de la forma $\alpha(t) \propto \exp(i\lambda t)$, resulta que λ debe ser tal que

$$\lambda_{\pm} = \frac{\delta}{2} \pm \sqrt{\frac{\delta^2}{4} + \Omega^2}.$$

En consecuencia:

$$\alpha(t) = e^{i\frac{\delta}{2}t} (A e^{i\Omega't} + B e^{-i\Omega't})$$

donde $\Omega' = \sqrt{\frac{\delta^2}{4} + \Omega^2}$ y tanto A como B son dos constantes que dependen de las condiciones iniciales. Una vez obtenido $\alpha(t)$ es inmediato calcular $\beta(t)$ ya que $\beta(t) = i\dot{\alpha}(t)e^{-i\delta t}/\Omega$. El resultado es

$$\beta(t) = -\frac{\delta}{2\Omega} e^{-i\frac{\delta}{2}t} (A e^{i\Omega't} + B e^{-i\Omega't}) - \frac{\Omega'}{\Omega} e^{-i\frac{\delta}{2}t} (A e^{i\Omega't} - B e^{-i\Omega't}).$$

Ahora analicemos lo que sucede para un átomo que inicialmente se encuentra en el estado fundamental, es decir cuando las condiciones iniciales son $\alpha(0) = 0$ y

$\beta(0) = 1$. Dadas estas condiciones iniciales tenemos $A+B = 0$, y además $\dot{\alpha}(0) = -i\Omega$. Por consiguiente, $A = -\Omega/2\Omega'$ y entonces

$$\begin{aligned}\alpha(t) &= -i\frac{\Omega}{\Omega'} e^{i\frac{\delta}{2}t} \sin(\Omega't), \\ \beta(t) &= e^{-i\frac{\delta}{2}t} \left(i\frac{\delta}{2\Omega'} \sin(\Omega't) + \cos(\Omega't) \right).\end{aligned}$$

La expresión anterior nos permite hallar la probabilidad de encontrar al átomo en el estado excitado. En este punto vale la pena recordar que es sencillo obtener la representación del estado en representación de Schrödinger. En efecto, dado que $|\psi(t)\rangle = \hat{U}_0(t)|\psi_I(t)\rangle$ resulta que $|\psi(t)\rangle = \alpha(t)e^{-iE_e t/\hbar}|e\rangle + \beta(t)e^{-iE_g t/\hbar}|g\rangle$. Por lo tanto, $|\alpha(t)|^2$ es la probabilidad de encontrar al sistema en el estado excitado. Entonces,

$$\text{Prob}(E = E_e) = \frac{1}{1 + \frac{\delta^2}{4\Omega^2}} \sin^2(\Omega't). \quad (7.19)$$

La interpretación de este resultado es interesante e importante: La población del nivel excitado oscila con una amplitud cuyo valor es $\text{Prob}(E = E_e)|_{\max} = 1/(1 + \frac{\delta^2}{4\Omega^2})$. Esta amplitud alcanza su máximo valor igual a 1 para el *caso resonante*, cuando $\delta = 0$. Por lo tanto, para tiempos $t_j = (2j+1)\pi/2\Omega$ (con j un número entero) el estado del sistema es $|\psi(t_j)\rangle = |e\rangle$ (a menos de una fase). A estas oscilaciones de sistemas de dos niveles sometidas a un forzado externo se las conoce como *oscilaciones de Rabi* y tienen múltiples aplicaciones. En cambio, para $2\Omega \ll \delta$ las oscilaciones tienen una amplitud muy pequeña y por lo tanto el átomo tiene una probabilidad muy baja de pasar al estado $|e\rangle$. En efecto, $\text{Prob}(E = E_e) \approx \frac{4\Omega^2}{\delta^2} \sin^2(\Omega't)$.

Para tiempos intermedios, el estado se encuentra en una superposición de $|e\rangle$ y $|g\rangle$. Por ejemplo, para tiempos $T = \pi/4\Omega'$ las expresiones anteriores se reducen a

$$\begin{aligned}\alpha(T) &= -i\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{e^{i\frac{\delta\pi}{8\Omega'}}}{\sqrt{1 + \frac{\delta^2}{4\Omega^2}}}, \\ \beta(T) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{e^{-i\frac{\delta\pi}{8\Omega'}}}{\sqrt{1 + \frac{\delta^2}{4\Omega^2}}} \left(i\frac{\delta}{2\Omega} + 1 \right).\end{aligned}$$

Nuevamente, el caso resonante es particularmente simple ya que se tiene $\alpha(T) = -i/\sqrt{2}$ y $\beta(T) = 1/\sqrt{2}$. En esos instantes el estado es una superposición de ambos autoestados de \hat{H}_0 con igual peso.

Por completitud hallemos el operador evolución (como matriz de 2×2) en esta representación $\hat{U}(t) = \hat{U}_0^\dagger(t)\hat{U}(t)$. Para ello basta con analizar la evolución del estado para una condición inicial particular, algo que ya hicimos más arriba. En efecto, sabemos que el operador de evolución es tal que

$$\begin{aligned}|\psi_I(t)\rangle &= \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle, \\ \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} u_1(t) & u_2(t) \\ -u_2(t)^* & u_1(t)^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha(0) \\ \beta(0) \end{pmatrix},\end{aligned}$$

donde $u_1(t)$ y $u_2(t)$ son dos funciones del tiempo que determinan la evolución (para escribir esto, hemos usado la forma general de una matriz unitaria de 2×2 que tiene que ser tal que las filas y columnas sean las componentes de vectores ortonormales, lo que implica también que $|u_1(t)|^2 + |u_2(t)|^2 = 1$). De esta manera, es fácil ver que

$$u_1(t) = \beta^*(t) \quad \text{y} \quad u_2(t) = \alpha(t). \quad (7.20)$$

Es particularmente sencillo el *caso resonante*. Cuando la desintonía δ se anula, tenemos que

$$\hat{U}(t) = \begin{pmatrix} \cos \Omega t & -i \sin \Omega t \\ -i \sin \Omega t & \cos \Omega t \end{pmatrix}$$

Finalmente, también podemos obtener el operador evolución en representación de Schrödinger simplemente como $\hat{U}(t) = \hat{U}_0(t) \hat{U}(t)$.

7.5.2. Ejemplo 2: Oscilaciones de Raman

Consideremos ahora un sistema similar al anterior, sólo que ahora el átomo tiene tres niveles y su Hamiltoniano es

$$\hat{H}_0 = E_e |e\rangle\langle e| + E_{g_1} |g_1\rangle\langle g_1| + E_{g_2} |g_2\rangle\langle g_2|.$$

El átomo es irradiado por dos láseres de frecuencias ω_1 y ω_2 . Uno de los láseres acopla los estados $|e\rangle$ y $|g_1\rangle$ mientras que el otro acopla los niveles $|e\rangle$ y $|g_2\rangle$. Los niveles $|g_1\rangle$ y $|g_2\rangle$ no están acoplados directamente por ningún láser. El Hamiltoniano de interacción entre el átomo y los láseres entonces puede aproximarse como

$$\hat{V} = \hbar \Omega_1 |e\rangle\langle g_1| e^{-i\omega_1 t} + \hbar \Omega_2 |e\rangle\langle g_2| e^{-i\omega_2 t} + h.c.$$

Los láseres tienen la misma desintonía, es decir, son tales que $\delta = (E_e - E_{g_1})/\hbar - \omega_1 = (E_e - E_{g_2})/\hbar - \omega_2$.

Como primer punto resolveremos la dinámica del sistema en representación interacción. Para ello comenzaremos escribiendo a \hat{V} en la representación de interacción con $\hat{U}_0(t) = \exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar)$:

$$\begin{aligned} \hat{V}_I(t) &= \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{V} \hat{U}_0(t) \\ &= \hbar \Omega_1 |e\rangle\langle g_1| e^{i\delta t} + \hbar \Omega_2 |e\rangle\langle g_2| e^{i\delta t} + h.c. \end{aligned}$$

Ahora definiendo al estado $|\chi\rangle$ como

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\tilde{\Omega}} (\Omega_1 |g_1\rangle + \Omega_2 |g_2\rangle),$$

con $\tilde{\Omega} = \sqrt{\Omega_1^2 + \Omega_2^2}$, el operador anterior puede escribirse como

$$\hat{V}_I(t) = \hbar \tilde{\Omega} |e\rangle\langle \chi| e^{i\delta t} + h.c.$$

Es decir, este problema se reduce al de las oscilaciones de Rabi entre $|\chi\rangle$ y $|e\rangle$ (o sea, los dos láseres combinados inducen oscilaciones de Rabi entre los estados $|e\rangle$ y $|\chi\rangle$). Cabe destacar que el espacio de estados del átomo de tres niveles tiene una base formada por los vectores $|e\rangle$, $|\chi\rangle$ y $|\chi_\perp\rangle$ donde $|\chi_\perp\rangle$ es un estado ortogonal a los dos primeros. Este estado resulta ser:

$$|\chi_\perp\rangle = \frac{1}{\tilde{\Omega}}(\Omega_2|g_1\rangle - \Omega_1|g_2\rangle).$$

Estos estados toman una forma particularmente simple cuando $\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega$ ya que en ese caso se obtiene $|\chi\rangle = (|g_1\rangle + |g_2\rangle)/\sqrt{2}$ y $|\chi_\perp\rangle = (|g_1\rangle - |g_2\rangle)/\sqrt{2}$.

Escribiendo el estado del sistema en la representación de interacción como

$$|\psi_I(t)\rangle = \alpha(t)|e\rangle + \beta(t)|\chi\rangle + \gamma(t)|\chi_\perp\rangle,$$

al igual que hicimos en el ejemplo anterior, podemos usar la ecuación para la evolución de estados (Ec. (7.18)) en la representación interacción para encontrar ecuaciones diferenciales para $\alpha(t)$, $\beta(t)$ y $\gamma(t)$. Es fácil ver que $\dot{\gamma}(t) = 0$, y que $\alpha(t)$ y $\beta(t)$ satisfacen ecuaciones idénticas a las obtenidas en el caso de las oscilaciones de Rabi (reemplazando Ω por $\tilde{\Omega}$). Teniendo en cuenta la solución del ejemplo anterior, podemos escribir que $\gamma(t) = \gamma(0)$ y $\alpha(t) = C e^{i\delta t/2} \sin(\tilde{\Omega}'t + \phi)$ donde $\tilde{\Omega}' = \sqrt{\frac{\delta^2}{4} + \tilde{\Omega}^2}$ y tanto C como ϕ dependen de las condiciones iniciales. Por su parte $\beta(t) = i\dot{\alpha}(t)e^{-i\delta t}/\tilde{\Omega}$.

Analizaremos el caso en el que el estado inicial se encuentra en el estado fundamental g_1 : $|\psi(0)\rangle = |g_1\rangle = (\Omega_1|\chi\rangle + \Omega_2|\chi_\perp\rangle)/\tilde{\Omega}$. En ese caso las condiciones iniciales son:

$$\alpha(0) = 0, \quad \beta(0) = \Omega_1/\tilde{\Omega}, \quad \gamma(0) = \Omega_2/\tilde{\Omega}.$$

Estas condiciones implican que $\phi = 0$, $\dot{\alpha}(0) = -i\Omega_1$ y $\gamma(0) = \Omega_2/\tilde{\Omega}$. En consecuencia la constante C es simplemente $C = -i\Omega_1/\tilde{\Omega}'$. Por consiguiente tenemos que

$$\begin{aligned} \alpha(t) &= -i\frac{\Omega_1}{\tilde{\Omega}'}e^{i\delta t/2}\sin(\tilde{\Omega}'t) \\ \beta(t) &= \frac{\Omega_1}{\tilde{\Omega}}e^{-i\delta t/2}\left(i\frac{\delta}{2\tilde{\Omega}'}\sin(\tilde{\Omega}'t) + \cos(\tilde{\Omega}'t)\right) \\ \gamma(t) &= \frac{\Omega_2}{\tilde{\Omega}} \end{aligned}$$

En el caso en que $\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega$ esto implica que $\gamma(t) = \beta(0) = 1/\sqrt{2}$.

El caso más interesante para analizar es aquel en el que los láseres se encuentran muy lejos de la resonancia, lo que implica que δ es mucho mayor que Ω_1 y Ω_2 (recordemos que en ese caso las oscilaciones de Rabi estaban suprimidas). En efecto, en ese caso $\tilde{\Omega}' \approx \delta/2$. Entonces, la amplitud de la oscilación de $\alpha(t)$ es despreciable (dicha amplitud es $\Omega_1/\tilde{\Omega}' \approx \Omega_1/\delta \ll 1$). En consecuencia, la probabilidad de encontrar al átomo en el estado excitado $|e\rangle$ es siempre despreciable. Este nivel nunca está poblado, aunque juega un rol fundamental en el mecanismo que describimos.

Ahora prestemos atención a lo que sucede con la dinámica de los otros niveles en ese límite. De las ecuaciones anteriores se deduce que

$$\beta(t) \approx \frac{\Omega_1}{\tilde{\Omega}} \exp(i\tilde{\Omega}^2 t/\delta), \quad \gamma(t) = \frac{\Omega_2}{\tilde{\Omega}}.$$

Por lo tanto, el estado del sistema es $|\psi_I(t)\rangle = \beta(t)|\chi\rangle + \gamma(t)|\chi_\perp\rangle$ que, usando los resultados anteriores, no es otra cosa que

$$|\psi_I(t)\rangle = \frac{1}{\tilde{\Omega}} \left(\Omega_1 e^{i\tilde{\Omega}^2 t/\delta} |\chi\rangle + \Omega_2 |\chi_\perp\rangle \right).$$

Este estado puede escribirse además como:

$$|\psi_I(t)\rangle = \frac{1}{\tilde{\Omega}^2} \left((\Omega_1^2 e^{i\tilde{\Omega}^2 t/\delta} + \Omega_2^2) |g_1\rangle - \Omega_1 \Omega_2 (1 - e^{i\tilde{\Omega}^2 t/\delta}) |g_2\rangle \right)$$

Es decir, el estado cuántico oscila coherentemente entre los niveles $|g_1\rangle$ y $|g_2\rangle$ a pesar de que estos niveles no están directamente acoplados por ningún láser. En el caso particularmente simple en el que la intensidad de los dos láseres es la misma, tenemos que $\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega$ y $\tilde{\Omega}^2 = 2\Omega^2$. Entonces el estado resulta ser

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{i\Omega^2 t/\delta} \left(\cos\left(\frac{\Omega^2}{\delta} t\right) |g_1\rangle + i \sin\left(\frac{\Omega^2}{\delta} t\right) |g_2\rangle \right).$$

Tal como mencionamos más arriba, el estado oscila coherentemente entre $|g_1\rangle$ y $|g_2\rangle$ con una frecuencia $2\Omega^2/\delta$. Este proceso se conoce como *efecto Raman*. El estado $|e\rangle$ juega un rol interesante: es el intermediario gracias al cual la oscilación entre los dos estados que inicialmente están desacoplados se acoplan efectivamente. Es un estado virtual que nunca está poblado pero sin el cual la oscilación de Raman sería imposible.

