



**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**

**FACULTAD DE CIENCIAS**

**CARRERA DE BIOFÍSICA**

**“ESTUDIO DE LA ESPECTROSCOPIA DE ABSORCIÓN  
SATURADA MEDIANTE EL FORMALISMO DE MATRIZ  
DENSIDAD PARA REVELAR LA ESTRUCTURA HIPERFINA DEL  
ÁTOMO DEL LITIO”**

**Trabajo de titulación**

Tipo: Proyecto de Investigación

Presentado para optar al grado académico de:

**BIOFÍSICA**

**AUTORA: SANDY ANAEL QUINLLIN CONDO**

**DIRECTOR: Dr. RICHARD WILLIANS PACHACAMA CHOCA**

Riobamba – Ecuador

2020

© 2020, **Sandy Anael Quinllin Condo**

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho del Autor.

Yo, Sandy Anael Quinllin Condo, declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autora asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este trabajo de titulación; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 27 de agosto de 2020

**Sandy Anael Quinllin Condo**

**060410489-3**

**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**CARRERA DE BIOFÍSICA**

El Tribunal del Trabajo de Titulación certifica que: El trabajo de titulación: Tipo: Proyecto de Investigación, “**ESTUDIO DE LA ESPECTROSCOPIA DE ABSORCIÓN SATURADA MEDIANTE EL FORMALISMO DE MATRIZ DENSIDAD PARA REVELAR LA ESTRUCTURA HIPERFINA DEL ÁTOMO DEL LITIO**”, realizado por la señorita: **SANDY ANAEL QUINLLIN CONDO**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del trabajo de titulación, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	<b>FIRMA</b>	<b>FECHA</b>
Biof. María Fernanda Heredia Moyano <b>PRESIDENTE DEL TRIBUNAL</b>	_____	2020-08-28
Dr. Richard Willians Pachacama Choca <b>DIRECTOR DE TRABAJO DE TITULACIÓN</b>	_____	2020-08-28
Mat. Luis Marcelo Cortez Bonilla <b>MIEMBRO DEL TRIBUNAL</b>	_____	2020-08-28

## **DEDICATORIA**

El presente Trabajo de Titulación está dedicado a todos los jóvenes apasionados por la Física, en particular aquellos interesados en conocer la fenomenología inmersa en el proceso de radiación-materia.

Sandy Anael

## AGRADECIMIENTO

En esta época donde muchos estudiantes tuvimos que adaptarnos a cambios abruptos debido a la contingencia mundial por el Covid-19. Tengo una lista extensa de todos los seres increíbles que han aportado significativamente para llegar a esta etapa final de mis estudios de pregrado.

Principalmente, agradezco a mis padres, en especial a Martha, por ser una pieza fundamental durante este viaje, quien como toda madre ha sabido apoyar incondicionalmente todas mis decisiones académicas; gracias por confiar en mi capacidad y por ser el motor que impulsa mis sueños. A Wendy, quien con su amor de hermana siempre estuvo pendiente de mi alimentación y salud.

A Jorge Seman, a quien agradezco el haberme brindado, sin conocerme, la oportunidad de realizar mi trabajo de titulación en el Laboratorio de Materia Ultrafría (LMU). Agradezco tu confianza y tu espíritu de solidaridad que me impulsaron a adentrarme en el mundo de las ciencias físicas.

Un eterno agradecimiento a Jackson Poveda, por no dejarme sola durante mi estancia en la CDMX. Constituye un pilar fundamental para el desarrollo de este proyecto de investigación; gracias por todas las clases sobre física atómica y mecánica cuántica, han permitido orientar mi vocación profesional. Mi gratitud se resume a una corta frase: “🎵 ...Una vida sin tu, es como un libro de Física, pero de Berman... 🎵”.

A Rosario Paredes por aceptar mi solicitud para realizar una estancia de investigación en el LMU del Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México.

A todos los chicos que pertenecen al LMU, Diego, Eduardo, Andrés, Sebastián, Melaní, Alejandra y Juan David por compartir sus ideas para el entendimiento de este proyecto, y por aquellas conversaciones que ayudaron a adaptarme a la cultura mexicana.

Un afectuoso agradecimiento a el Dr. Richard Pachacama por el apoyo y motivación para la ejecución del presente trabajo, gracias por todos sus consejos y por su carisma que demuestra apoyo absoluto a la iniciativa estudiantil.

A uno de mis estimados amigos, Paúl, por toda su admiración, gracias por tu sincera amistad y por mantener vivo el ímpetu hacia la búsqueda de una educación superior mejor.

A mis compañeros de clase, en particular a Víctor (Pili), Marlon y Joselyne porque juntos compartimos momentos únicos dentro y fuera del aula, recordando siempre nuestra frase inolvidable: “No se aprende, pero se goza”.

Un profundo agradecimiento a la ESPOCH por proporcionar docentes de calidad, quienes sin escatimar esfuerzo dotaron de vastos conocimientos para mi formación profesional. De igual forma, expreso mi gratitud a todas las autoridades de la Facultad de Ciencias, por toda su incommensurable gestión para asegurar una educación de excelencia.

Sandy Anael

## TABLA DE CONTENIDOS

ÍNDICE DE FIGURAS.....	x
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	xi
ÍNDICE DE TABLAS.....	xii
RESUMEN .....	xiii
SUMMARY .....	xiv
INTRODUCCIÓN .....	1

## CAPÍTULO I

<b>1. MARCO TEÓRICO REFERENCIAL.....</b>	<b>3</b>
<b>1.1. Antecedentes.....</b>	<b>3</b>
<b>1.2. Planteamiento del problema.....</b>	<b>4</b>
<i>1.2.1. Enunciado del problema .....</i>	<i>4</i>
<i>1.2.2. Formulación del problema (hipótesis) .....</i>	<i>5</i>
<b>1.3. Justificación.....</b>	<b>5</b>
<b>1.4. Objetivos.....</b>	<b>6</b>
<i>1.4.1. Objetivo General.....</i>	<i>6</i>
<i>1.4.2. Objetivos Específicos .....</i>	<i>6</i>
<b>1.5. Marco Teórico .....</b>	<b>6</b>
<i>1.5.1. Nociones de mecánica cuántica .....</i>	<i>6</i>
<i>1.5.1.1. Teoría de momento angular .....</i>	<i>6</i>
<i>1.5.1.2. Suma de momento angular .....</i>	<i>7</i>
<i>1.5.1.3. Átomo de un electrón.....</i>	<i>9</i>
<i>1.5.1.4. Teoría de perturbaciones .....</i>	<i>11</i>
<i>1.5.1.5. Estructura fina .....</i>	<i>13</i>
<i>1.5.1.6. Estructura hiperfina .....</i>	<i>15</i>
<i>1.5.2. Litio... ..</i>	<i>19</i>
<i>1.5.3. Sistemas de interacción radiación-materia .....</i>	<i>20</i>
<i>1.5.3.1. Imagen de Schrödinger .....</i>	<i>20</i>
<i>1.5.3.2. Imagen de interacciones.....</i>	<i>21</i>
<i>1.5.3.3. Imagen de interacción del campo.....</i>	<i>22</i>

1.5.4. Átomos de dos niveles .....	23
1.5.5. Matriz densidad .....	28
1.5.5.1. Matriz densidad para un átomo.....	29
1.5.5.2. Matriz densidad para un ensamble.....	34
1.5.6. Motivación experimental de la SAS .....	35

## CAPÍTULO II

2. MARCO METODOLÓGICO.....	37
2.1. Coeficientes de absorción .....	37
2.2. Inclusión del movimiento atómico .....	39
2.3. Forma Hidrodinámica de la matriz densidad .....	41
2.3.1. Generalización de la matriz densidad .....	42
2.3.2. Teoría de perturbaciones para la matriz densidad.....	44
2.4. Absorción saturada.....	47
2.5. Dos niveles con estructura interna.....	51
2.5.1. Importancia de la estructura fina e hiperfina.....	51
2.5.2. Teorema de Wigner-Eckart .....	53
2.5.3. Forma hidrodinámica para la estructura hiperfina .....	55

## CAPÍTULO III

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS .....	57
3.1. Análisis de la Espectroscopía de la Absorción Saturada.....	57
3.2. Análisis de la estructura hiperfina y el átomo de Litio.....	60

CONCLUSIONES.....	62
-------------------	----

RECOMENDACIONES.....	63
----------------------	----

## BIBLIOGRAFÍA

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>Figure 1-1.</b> Esquemas de la estructura fina e hiperfina de los isótopos ${}^6\text{Li}$ y ${}^7\text{Li}$ , incluyendo las longitudes de onda de luz que pueden ser usadas. ....	19
<b>Figure 2-1.</b> Excitación casi resonante de un átomo de dos niveles. ....	23
<b>Figure 3-1.</b> Procesos de interacción radiación-materia, proceso de emisión espontánea y emisión estimulada. ....	34
<b>Figure 4-1.</b> Esquema matriz densidad para un conjunto de átomos. ....	35
<b>Figure 5-1.</b> Esquema simplificado de un montaje experimental para la SAS .....	36
<b>Figure 1-2.</b> Porción infinitesimal del medio localizada entre las posiciones $x_3$ y $dx_3$ . ....	38
<b>Figure 2-2.</b> Esquema abstracto de la absorción saturada para conjunto de átomos con dos haces contra-propagantes. ....	48

## ÍNDICE DE GRÁFICOS

<b>Gráfico 1-3.</b> Perfil de absorción del vapor (en unidades arbitrarias) como función del <i>desintonía</i> . Los perfiles de una Lorentziana (negro) y de una Gaussiana (naranja). .....	57
<b>Gráfico 2-3.</b> Densidad de población del estado estable como función de la velocidad en el llamado esquema de agujeros (unidades arbitrarias). .....	58
<b>Gráfico 3-3.</b> Densidad de población del estado base en el esquema de agujeros para diferentes intensidades de la luz (unidades arbitrarias). .....	59
<b>Gráfico 4-3.</b> Densidad de población del estado base en el esquema de agujeros para diferentes <i>desintonías</i> (unidades arbitrarias). .....	60

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1-2.</b> Estado fundamental y primer estado excitado para los isótopos de ${}^6\text{Li}$ (fermión) y ${}^7\text{Li}$ .....	52
---	----

## RESUMEN

El objetivo del presente proyecto de investigación fue estudiar la espectroscopia de absorción saturada usando el formalismo de matriz densidad para desvelar la estructura hiperfina del átomo de Litio. Para ello, se utilizó el esquema de átomo de dos niveles que representa la interacción de un campo monocromático sobre un conjunto de átomos. Se postuló la ecuación de Liouville para obtener los efectos de coherencia dentro del formalismo de matriz densidad. Se aplicó una distribución tipo Maxwell-Boltzmann para introducir la temperatura en el gas de átomos y el efecto Doppler debido al movimiento. Se aplicó teoría de perturbaciones en la matriz densidad para determinar las ecuaciones hidrodinámicas del sistema para  $N$ -campos electromagnéticos. Se consideró un caso simplificado de dos haces contra-propagantes, haz de bombeo y haz de prueba, y se estudió la SAS. Se introdujo el efecto de las degeneraciones producidas por los números cuánticos hiperfinos provenientes de la suma de todos los momentos angulares. Se utilizó el teorema de Wigner-Eckart para plantear la forma hidrodinámica de la estructura hiperfina del átomo de Litio. Como resultado, se obtuvo un espectro de absorción, que muestra el *esquema de agujeros* dado por la SAS. De igual forma, de acuerdo al análisis cualitativo de las ecuaciones hidrodinámicas del Litio se infirió que la distribución de los sub-niveles hiperfinos del estado base en el límite de altas temperaturas también mostrará el *esquema de agujeros*. Se concluye, que los efectos de la estructura hiperfina manifestados en el espectro de absorción de Litio dentro del marco de formulación hidrodinámica corresponden a una forma análoga pero inconclusa, por el gran número de ecuaciones dinámicas que tiene el sistema. A partir de estos principios básicos se recomienda hacer una extensión hacia el cálculo numérico.

**Palabras claves:** <BIOFÍSICA>, <LITIO (Li)>, <MATRIZ DENSIDAD>, <ESTRUCTURA HIPERFINA>, <ESPECTROSCOPIA DE ABSORCION SATURADA>, <ESPECTRO DE ABSORCIÓN>

LUIS  
ALBERTO  
CAMINOS  
VARGAS

Firmado digitalmente por  
LUIS ALBERTO CAMINOS  
VARGAS  
Nombre de reconocimiento  
(DN): c=EC, l=RIOBAMBA,  
serialNumber=0602766974,  
cn=LUIS ALBERTO  
CAMINOS VARGAS  
Fecha: 2020.09.29 13:32:28  
-05'00'



0331-DBRAI-UPT-2020

## SUMMARY

The objective of the present investigation project was to study the saturated absorption spectroscopy using the density matrix formalism to reveal the hyperfine structure of Lithium atom. For that, it was used the two-level atom scheme which represents the interaction of the monochromatic field on a set of atoms. It was postulated the Liouville equation to get the coherence effects within of density matrix formalism. It was applied a Maxwell-Boltzmann type distribution to introduce the temperature in the gas atoms y the Doppler effect due to the motion. It was applied perturbation theory in the density matrix to determine the system hydrodynamics equations for N-electromagnetic fields. It was considered simplified case of two counter-propagating beams, pump beam and probe beam, and it was studied the SAS. It was introduced the degenerations effects produced by the hyperfine quantum numbers come from the sum of whole the angular momentums. It was used the Wigner-Eckart theorem to propose the hyperfine structure hydrodynamic form of the Lithium atom. As a result, it was got an absorption spectrum, which shows the holding scheme given by the SAS. Similarly, according to the qualitative analysis of the hydrodynamics equations of Lithium it was inferred that the distribution of the sub-levels hyperfine of the ground state in the high temperatures limit will also show the holding scheme. It concludes that the hyperfine structure effects manifested in the Lithium absorption spectrum within del hydrodynamic formulation frame corresponds to an analogous form but unfinished, because of the large number of equations that has the system. From these basic principles it is recommend making an extension towards the numerical calculation.

**Keywords:** <BIOPHYSICS>, <LITHIUM (Li)>, <DENSITY MATRIX>, <HYPERFINE STRUCTURE>, <SATURATED ABSORPTION SPECTROSCOPY>, <ABSORPTION SPECTRUM>

## INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas la tecnología ha comenzado a orientarse al control y la manipulación de sistemas cuánticos y sus grados de libertad, ya que existe una amplia gama de posibles aplicaciones dentro de la industria. El control a nivel atómico resulta crucial en sistemas relacionados con espectroscopía, pues tienen una gran relevancia dentro de la llamada ingeniería cuántica. Las técnicas experimentales desarrolladas para esta clase de sistemas poseen una elevada versatilidad y un control fino de los grados de libertad internos a partir del control de los parámetros externos. Así, las diferentes técnicas existentes de física atómica y óptica nos permiten tener acceso al comportamiento cuántico de la muestra, y por lo tanto tenemos una calidad sin precedentes en el control de los llamados sistemas de interacción radiación-materia.

Esto significa, que la piedra angular de esta clase de esquemas es el dominio experimental de la interacción de la luz con la materia. En particular, para la radiación electromagnética hay una gran variedad de parámetros que son potencialmente accesibles como la intensidad, la frecuencia, la fase y la *desintonía*, que tienen efectos claramente observables en ensambles atómicos, en especial en los gases. Es en este punto, en donde la espectroscopía de absorción saturada (SAS, de sus siglas en inglés Saturated Absorption Spectroscopy) tiene una gran relevancia en el control y manipulación sistemas atómicos. En particular, la línea de espectroscopía puede fijarse como referencia la frecuencia de los átomos asociada a la transición del estado base al primer estado excitado, dentro de la llamada estructura hiperfina, esta frecuencia resulta ser una referencia absoluta que depende apenas de la cuantización energética de los niveles.

Para este proyecto, existen varias estrategias a fin de desarrollar la SAS en el formalismo de matriz densidad y así poder revelar la estructura hiperfina del átomo del Litio, por lo tanto, es necesario entender conceptos fundamentales que deben ser organizados de manera escalonada desde las nociones más básicas de mecánica cuántica hasta los fundamentos de sistemas atómicos en campos de radiación. La secuencia de esta dialéctica se describirá en las próximas secciones, sin perder el objetivo más esencial, desarrollar el formalismo de matriz densidad y hacer una extensión hacia la estructura hiperfina para el entendimiento de las líneas D1 como D2 del átomo de Litio.

El presente trabajo de titulación consta de 3 capítulos:

En el Capítulo I se aborda los antecedentes, planteamiento del problema, justificación, objetivos y el marco teórico referencial que será esencial para el desarrollo y comprensión del trabajo.

El Capítulo II describe la metodología general para el desarrollo del trabajo, se resuelven las ecuaciones de Liouville en el equilibrio para obtener el coeficiente de absorción, se incluye el patrón de movimiento atómico y por tanto de la temperatura, se formaliza la forma hidrodinámica

de la matriz densidad, se aplica la teoría de perturbaciones para abordar la SAS y finalmente se incluye la estructura hiperfina.

El Capítulo III está dedicado a los resultados obtenidos con su respectiva discusión sobre el *esquema de agujeros* en el marco de la SAS y se detalla generalidades de la estructura hiperfina del Litio.

# CAPÍTULO I

## 1. MARCO TEÓRICO REFERENCIAL

### 1.1. Antecedentes

La SAS es una técnica que ha sido ampliamente estudiada desde la perspectiva teórica, y con mayor profundidad durante los años 80 (Meystre y Sargent, 2007, p. 222). De hecho, fue en esta época, en donde más se desarrollaron modelos para interpretar los espectros de los vapores atómicos que se observaban en los laboratorios durante los años 70 (Berman y Malinovsky, 2010, p.136). Dichos modelos fueron muy elaborados e involucran procesos conceptuales altamente complejos. El desarrollo y entendimiento de las nociones más fundamentales de la interacción radiación-materia, llevó consigo al mejoramiento de las propias técnicas espectroscópicas, en especial aquellas relacionadas con el acceso a la estructura hiperfina de los átomos.

En 1972, Haroche S. y Hartmann F. estudiaron la SAS en un átomo de dos niveles en presencia de dos radiaciones contra-propagantes de la misma frecuencia, un campo fuerte (haz de bombeo) y el otro campo débil (haz de prueba). Mostraron que cuando el haz de bombeo es muy fuerte puede haber una modificación apreciable en la forma de la línea del pico de transición en el haz de prueba (Haroche y Hartmann, 1972, p. 1280-1281).

En el estudio de (Bordé et al., 1976, p. 256) introducen el formalismo de matriz densidad para el cálculo de perturbaciones de tercer orden de la forma de línea de absorción, donde incluyen también los tiempos de relajación, efectos de tránsito y efecto Doppler. Proporcionando ecuaciones generales que describen la forma de la línea espectroscópica, así como ecuaciones aproximadas válidas en varios dominios.

Un estudio teórico de la SAS del  $^{85}\text{Rb}$  usando el formalismo de matriz densidad para átomos de muchos niveles se reporta en (Maguire et al., 2006, pp. 2709-2711); en el cual, se derivan un conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas para el estado interno del átomo en un campo de luz de onda estacionaria. Sus resultados muestran que la absorción en cada *desintonía* (del inglés detuning) del láser se encuentra a partir de un promedio de la absorción para una serie de velocidades a lo largo del campo de radiación.

Desde el enfoque de sistema de dos niveles, Noh H. en 2009 presenta un estudio teórico de soluciones analíticas para SAS donde enfatiza los efectos de la saturación y del bombeo óptico sobre el espectro. Sus respectivas ecuaciones muestran que el espectro libre de Doppler tiene una forma Lorentziana (Noh, 2009, p. 1181-1187).

En el estudio teórico-experimental descrito por (Kim et al., 2009, p. 1-7), presentan espectros de absorción no lineal en celdas de vapor causados por absorción saturada y resonancias oscuras

coherentes; en el cual, en función de la matriz densidad identifican teóricamente que el bombeo óptico domina la forma de la línea en SAS. Proporcionando una perspectiva para el estudio de SAS en vapores alcalinos a partir de una descripción de sistema de tres niveles.

En 2013, Rowan M. en su trabajo teórico-experimental presenta las formas de línea de las transiciones  $D_1$  y  $D_2$  de Litio obtenidas mediante retroreflexión del láser diodo. Sus resultados de los perfiles libres de efecto Doppler para frecuencia centrales de las transiciones son corroborados con los cálculos de la matriz densidad para un átomo de dos niveles (Rowan, 2013, p.3).

En 2018, Moon G, y Noh H. presentan una fórmula empírica para identificar el FWHM (Full width half maximum) en SAS de un átomo de dos niveles, tomando en cuenta tanto el *esquema de agujeros* (o hole burning del inglés) como el término de coherencia en el límite del ensanchamiento Doppler (Moon y Noh, 2018, p. 3881).

## **1.2. Planteamiento del problema**

### **1.2.1. Enunciado del problema**

La técnica de SAS es un sistema constituido por dos haces de luz láser derivados de un único haz que son enviados a través de una celda de vapor atómica, a uno de ellos se le llama haz de bombeo y al otro haz de prueba, los cuales se entrecruzan dentro del gas atómico ya sea en una configuración contra-propagante superpuestos uno sobre el otro, o a 90 grados formando una cruz (Levenson, 1982, pp. 66-73). Mientras que el haz de bombeo tiene una alta intensidad y sirve para que el gas sea transparente, la transmitancia del haz de prueba a través del vapor atómico se registra en un fotodiodo proporcionando la señal de espectroscopía devalada (Das y Natarajan, 2007, p. 1-9), permitiendo observar y acceder a la estructura hiperfina de los átomos. Esta técnica ha resultado fundamental en el estudio de la estructura electrónica de los átomos, pues elimina el ensanchamiento de las líneas de absorción debido a los efectos térmicos del gas. Idealmente, la resolución de las líneas espectrales medidas utilizando SAS se encuentra limitada únicamente por la anchura natural de la transición observada. Esto significa que para estudiar la estructura interna o hiperfina de un átomo es necesario conocer las reglas de suma de momento angular cuántico y en particular, el correcto entendimiento de las reglas de transición entre el estado base y el primer estado excitado (Belluzzi, Landi Degl'Innocenti y Trujillo, 2015, pp. 1-2).

Desde el enfoque teórico, hacer una deducción a partir del llamado cálculo de primeros principios, es decir, a partir de un Hamiltoniano que contenga todas las interacciones y los efectos de la estructura interna, resulta ser un problema altamente complicado y engorroso de resolver, ya que involucra un sistema de muchas partículas con muchos grados de libertad internos cuánticos (el espín del electrón y del núcleo, por ejemplo) (Maneekhum, 2009, pp. 20-21). ¿Será posible tener un

**modelo** que permita hacer una descripción razonable? ¿Cómo se puede introducir una descripción que además incluya la estructura hiperfina atómica? ¿Cómo se incluyen los efectos de la temperatura de manera práctica en dicho modelo?

### **1.2.2. Formulación del problema (hipótesis)**

¿Será posible el estudio de la espectroscopia de absorción saturada mediante el formalismo de matriz densidad para revelar la estructura hiperfina del átomo del Litio?

### **1.3. Justificación**

La técnica de SAS toma relevancia para resolver los espectros de la estructura hiperfina de los átomos de Litio, cuyos anchos de línea están limitadas apenas por el natural de las transiciones  $\Gamma \sim 2\pi \times 6 \text{ MHz}$  (Das y Natarajan, 2007, p.2). A saber, desde el ámbito experimental, se usa al propio átomo con estas líneas tan estrechas como candidatos para establecer una referencia de frecuencia absoluta, con la cual se compara la frecuencia de emisión láser y se estabiliza activamente.

Existen ya, una gran variedad de experimentos que tienen por sede países Latinoamericanos, en particular México tiene una diversidad de experimentos relacionados con física atómica y molecular, como por ejemplo la condensación de Bose-Einstein en el Laboratorio de Materia Ultrafría (LMU) del Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México. En donde, la técnica de la SAS resulta relevante e importante como infraestructura fundamental para el enfriamiento y confinamiento de gases atómicos. Siendo que, la propia SAS constituye una herramienta esencial para la ejecución de los experimentos relacionados con materia cuántica, así como motivo de investigación *per se*.

Este trabajo de titulación se acopla y encaja perfectamente con las necesidades del LMU, pues pretende abordar temas especializados a través de la teoría de la matriz densidad, usando el modelo de dos niveles. Por lo que, el estudio profundo de la SAS desde una perspectiva teórica permitirá mejorar y contrastar las metodologías ya existentes en el laboratorio, comparando directamente los resultados obtenidos vía matriz densidad con los fenómenos que ocurren en la celda de espectroscopía de los isótopos de Litio. Además, proporcionará un panorama más amplio y un posible salto o extensiones a nuevas técnicas experimentales, así como potenciales aportes al desarrollo de estas. También se podrá iniciar bases para el desarrollo de software especializado y abierto, para implementarse dentro del propio LMU y en otros grupos de investigación que se encuentran desarrollando técnicas experimentales similares.

Es en este punto, en donde este trabajo de investigación toma relevancia, actualmente las necesidades experimentales demandan el desarrollo de modelos con la elegancia de los métodos de la matriz densidad, ya que como fue mencionado, permite no sólo estudiar sistemas con

estructura, sino que también permite abordar el problema de grandes ensambles de átomos que se encuentran a una temperatura finita.

## 1.4. Objetivos

### 1.4.1. *Objetivo General*

Estudiar de manera detallada la espectroscopía de absorción saturada usando el formalismo de matriz densidad para desvelar la estructura hiperfina del átomo de Litio.

### 1.4.2. *Objetivos Específicos*

- Comprender la estructura hiperfina de un átomo hidrogenoide a partir de los primeros principios del Hamiltoniano formulado en mecánica cuántica.
- Estudiar el sistema de dos niveles usando el formalismo de matriz densidad.
- Introducir los efectos de la temperatura en un gas atómico dentro del formalismo de matriz densidad.
- Extender el formalismo de la matriz densidad en el estudio de la estructura hiperfina de un gas de Litio.

## 1.5. Marco Teórico

### 1.5.1. *Nociones de mecánica cuántica*

#### 1.5.1.1. *Teoría de momento angular*

En la mecánica clásica se estudia una clase de potenciales, llamados potenciales centrales, y estos se caracterizan porque tienen una cantidad conservada, el momento angular orbital. Como es natural, los sistemas microscópicos, en especial los de física atómica, se diferencian porque para cada uno de sus componentes, como los núcleos y electrones, tienen además del momento angular orbital otro momento angular intrínseco conocido como espín. En el átomo, estas cantidades se presentan mediante operadores y la suma de todos los momentos angulares conforman el espín hiperfino (Foot, 2005, p.102), esto es

$$\hat{F} = \hat{L} + \hat{S} + \hat{I}. \quad (1)$$

En donde  $\hat{L}$  es el momento angular orbital,  $\hat{S}$  es el espín del electrón e  $\hat{I}$  es el espín del núcleo. En general, las rotaciones en mecánica cuántica satisfacen un álgebra general específica, conocida como álgebra de momento angular y se representa mediante un conmutador de operadores:

$$[\hat{F}_k, \hat{F}_l] = \sum_m i\hbar \epsilon_{klm} \hat{F}_m. \quad (2)$$

En donde  $\hbar$  es la constante de Planck y los subíndices  $k, l, m \equiv x, y, z$  pueden ser cualquiera de las componentes espaciales.  $\epsilon_{klm}$  es el símbolo de Levi-Civita, y este puede tener valores  $0, +1, -1$ , si se repiten los índices son cíclicos o anticíclicos, respectivamente.

Una buena base para estos operadores se encuentra escogiendo el cuadrado del operador de la ecuación (1) y la componente-3, esto es:

$$\hat{F}^2|F, M_F\rangle = F(F+1)\hbar^2|F, M_F\rangle, \quad \hat{F}_3|F, M_F\rangle = M_F\hbar|F, M_F\rangle, \quad (3)$$

donde  $F$  y  $M_F$  son números cuánticos asociados a los operadores  $\hat{F}^2$  y  $\hat{F}_3$ . Por un lado, se tiene momento angular total con  $F = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3, \dots$ . Sin embargo, esto no significa necesariamente que  $F$  debe tomar todos estos valores. Por otro lado, para un valor dado de  $F$  existen  $2F+1$  valores posibles de proyecciones asociadas con  $-F \leq M_F \leq F$  y consecuentemente el espacio también será de dimensión  $2F+1$ . Los valores de dichos números cuánticos estarán restringidos no solo por su álgebra, sino también por los valores correspondiente a la suma de los operadores  $\hat{L}, \hat{S}$  e  $\hat{I}$  los cuales son diferentes para cada átomo y para cada isótopo (Bransden y Joachain, 1973, pp. 95-96). Es decir, en general,  $F$  determina si los átomos presentan características bosónicas (con espín entero) o fermiónicas (con espín semi-entero).

Además, se puede definir la relación de ortogonalidad y completez en términos de  $F$  y  $M_F$ :

$$\langle F', M'_F | F, M_F \rangle = \delta_{F',F} \delta_{M'_F, M_F}, \quad \sum_F \sum_{M_F=-F}^F |F, M_F\rangle \langle F, M_F| = \hat{1}. \quad (4)$$

Adicionalmente, se sabe que el espín total determina completamente el comportamiento global de un grupo o una colección de átomos. Finalmente, se puede inferir que cuando se conocen las reglas de momento angular se comprende completamente la estructura individual (interna) de cada uno.

#### 1.5.1.2. Suma de momento angular

Como es natural, es admisible encontrar estrategias para describir la suma de momentos angulares. De esta forma, se considera tres momentos angulares, cuyos operadores se suman de la siguiente forma:

$$\hat{J} = \hat{J}^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} \otimes \hat{1}^{(3)} + \hat{1}^{(1)} \otimes \hat{J}^{(2)} \otimes \hat{1}^{(3)} + \hat{1}^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} \otimes \hat{J}^{(3)} \equiv \hat{J}^{(1)} + \hat{J}^{(2)} + \hat{J}^{(3)},$$

tal que  $\hat{1}^{(1)}, \hat{1}^{(2)}$  y  $\hat{1}^{(3)}$  son los operadores de identidad en cada uno de los sub-espacios de Hilbert. Sabiendo, que un sistema «acoplado» tiene un espacio de Hilbert que es el producto tensorial de los sub-espacios, es decir:  $H = H^{(1)} \otimes H^{(2)} \otimes H^{(3)}$ . De esta manera, podemos sumar los operadores de tres formas distintas (Yutsis, Levinson y Vanagas, 1962, pp. 16-19):

1.  $\hat{\mathbf{J}}^{(12)} = \hat{\mathbf{J}}^{(1)} + \hat{\mathbf{J}}^{(2)}$  y luego sumamos  $\hat{\mathbf{J}}^{(3)}$ .
2.  $\hat{\mathbf{J}}^{(23)} = \hat{\mathbf{J}}^{(2)} + \hat{\mathbf{J}}^{(3)}$  y luego sumamos  $\hat{\mathbf{J}}^{(1)}$ .
3.  $\hat{\mathbf{J}}^{(13)} = \hat{\mathbf{J}}^{(1)} + \hat{\mathbf{J}}^{(3)}$  y luego sumamos  $\hat{\mathbf{J}}^{(2)}$ .

De forma práctica, se analiza la forma del caso 1, en la cual el vector de estado en la base desacoplada está definido por

$$|j_1, j_2, j_3; m_1, m_2, m_3\rangle \equiv |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \otimes |j_3, m_3\rangle,$$

en donde los sistemas de momento angular etiquetados (1), (2) y (3) satisfacen las siguientes relaciones de conmutación

$$[\hat{J}_K^{(a)}, \hat{J}_l^{(a)}] = \sum_m i\hbar \epsilon_{klm} \hat{J}_m^{(a)}, \quad (5)$$

con  $a = 1, 2, 3$  que está relacionado con los sistemas de momento angular. Separadamente en cada uno de los sistemas desacoplados, las bases asociadas al cuadrado de los momentos angulares son

$$\hat{J}^{(a)2} |j_a, m_a\rangle = j_a(j_a + 1)\hbar^2 |j_a, m_a\rangle, \quad (6)$$

y a la componente-3 en cada uno de los espacios

$$\hat{J}_3^{(a)} |j_a, m_a\rangle = m_a \hbar |j_a, m_a\rangle. \quad (7)$$

Ahora, construyendo la base acoplada usual tomando los momentos  $\hat{\mathbf{J}}^{(12)} = \hat{\mathbf{J}}^{(1)} + \hat{\mathbf{J}}^{(2)}$ , de tal forma que:

$$|j_{12}, m_{12}\rangle = \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} |j_1, j_2, j_3; m_1, m_2, m_3\rangle \langle j_1, j_2, j_3; m_1, m_2, m_3 | j_{12}, m_{12}\rangle,$$

en donde se cumplen las reglas de selección usuales, esto es, considerando los coeficientes de Clebsch-Gordan ( $\langle j_1, j_2, j_3; m_1, m_2, m_3 | j_{12}, m_{12}\rangle$ ) que son diferentes de cero tomando  $m_{12} = m_1 + m_2$  y  $|j_1 - j_2| \leq j_{12} \leq j_1 + j_2$ , con  $-j_{12} \leq m_{12} \leq j_{12}$ . A esta base se la llama parcialmente acoplada por cuestiones de simplicidad.

El siguiente paso es sumar el tercer momento angular asociado a  $\hat{\mathbf{J}}^{(3)}$ , entonces

$$|j_{12}; j, m\rangle = \sum_{m_3=-j_3}^{j_3} \sum_{m_{12}=-j_{12}}^{j_{12}} |j_{12}, j_3; m_{12}, m_3\rangle \langle j_{12}, j_3; m_{12}, m_3 | j_{12}; j, m\rangle,$$

tal que  $m = m_{12} + m_3 = m_1 + m_2 + m_3$  y  $|j_{12} - j_3| \leq j \leq j_{12} + j_3$ , con  $-j \leq m \leq j$ . En este caso es necesario etiquetar la base con el número cuántico  $M_{F_{12}}$ . Por otra parte, tomando en cuenta

las nociones de suma de dos momentos angulares, la dimensión del espacio acoplado debe ser  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2j_3 + 1)$  equivalente al número de vectores en la base.

Los operadores de ascenso y descenso en la base acoplada deberían ser:

$$\hat{J}_{\pm} |j_{12}; j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \hbar |j_{12}; j, m \pm 1\rangle, \quad (8)$$

y además debe existir la siguiente equivalencia

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_{\pm}^{(1)} + \hat{J}_{\pm}^{(2)} + \hat{J}_{\pm}^{(3)}.$$

### 1.5.1.3. Átomo de un electrón

Dentro de las características de la mecánica cuántica se encuentra la cuantización de la energía. En especial, la física atómica es un área relevante en donde los efectos de esta cuantización se manifiestan de manera concreta. Así, el análisis del átomo de Hidrógeno cobra importancia, ya que se puede resolver de manera analítica y su estructura de niveles energéticos es bien conocida. De hecho, el Hidrógeno corresponde uno de las bases fundamentales para la comprensión de un espectro atómico (Rowan, 2013, p.7).

Siguiendo esta idea, en esta sección se presenta la derivación dada en (Bransden y Joachain, 1973, pp. 128-134) para el estudio del átomo de Hidrógeno que representa un sistema de interacción de dos partículas puntuales, protón y electrón, quienes debido a la atracción de Coulomb siguen un potencial central dado por:

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r},$$

donde  $e$  es la carga del electrón,  $\epsilon_0$  es la permitividad eléctrica,  $r$  es el radio-vector. En este trabajo se usará el sistema de unidades internacional metro-kilogramo-segundo (MKS). La energía del átomo puede separarse en dos partes, una que corresponde a la energía del movimiento relativo de las dos partículas y la otra que evidencie el movimiento traslacional del centro de masa como un todo.

De esta manera, el Hamiltoniano para la energía del movimiento relativo es

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{k}{r}, \quad (9)$$

donde  $\hat{p}$  es el operador del momento relativo y  $\mu$  es la masa reducida. Además, tomando en cuenta que el átomo puede ser analizado desde el punto de vista de masa reducida, la energía del movimiento traslacional es cero, y la ecuación de Schrödinger del átomo es

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{k}{r}\right)\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \quad (10)$$

Para resolver esta ecuación, es necesario plantear la separación de variables, y por ello es conveniente utilizar coordenadas esféricas y aplicar la siguiente sustitución

$$\Psi(\mathbf{r}) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi), \quad (11)$$

donde  $R(r)$  es la parte radial,  $\Theta(\theta)$  la parte angular cenital y  $\Phi(\varphi)$  es la parte angular azimutal. Convenientemente, se puede reescribir la parte radial de la ecuación (10) como

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{d^2}{dr^2}(rR) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} R - \frac{k}{r} R = ER. \quad (12)$$

Para simplificar esta ecuación, se consideran las siguientes sustituciones

$$\bar{r} = \sqrt{-\frac{8\mu E}{\hbar^2}} r, \quad \lambda = \frac{k}{\hbar} \sqrt{-\frac{\mu}{2E}}, \quad R = A\bar{r}^l e^{-\bar{r}/2} F(\bar{r}),$$

que conlleva a expresar (10) de la siguiente manera

$$\bar{r} \frac{d^2 F}{d\bar{r}^2} + [\bar{r} - 2(l+1)] \frac{dF}{d\bar{r}} + (\lambda - l - 1)F = 0.$$

Esta ecuación diferencial tiene una solución en serie de potencias, requiere que

$$\lambda = 1 + l + n_r,$$

en cual  $n_r = 0, 1, 2, \dots$  es el número cuántico radial, entonces la cuantización de la energía está dada por

$$E = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \frac{1}{(1 + l + n_r)^2} \simeq -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}, \quad (13)$$

donde  $n = 1, 2, \dots$  es el número cuántico principal y  $a_0$  es el radio de Bohr.

De este modo, introduciendo los números cuánticos  $n$ ,  $l$  y  $m$  es posible hallar la solución completa de la función de onda (11), entonces

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi),$$

donde

$$\Theta_{lm}(\theta) = \left\{ \frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!} \right\}^{1/2} P_l^{|m|}(\cos\theta),$$

$$R_{nl}(r) = - \left[ \left( \frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\{(n+l)!\}^3} \right]^{1/2} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho),$$

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi},$$

con

$$l = 0, 1, \dots, n-1, \quad m = -l, l+1, \dots, l-1,$$

que representan el número cuántico orbital y número cuántico magnético respectivamente.

#### 1.5.1.4. Teoría de perturbaciones

En teoría de perturbaciones se considera que el problema a resolver es un poco diferente del problema original, en donde la desviación entre los dos problemas es pequeña. Aplicando teoría de perturbaciones es posible calcular la contribución asociada a dicha desviación, la cual, es añadida a una corrección en la energía y función de onda del Hamiltoniano (Zetilli, 2001, p.469). Por lo tanto, la teoría de perturbaciones constituye una solución exacta para obtener soluciones aproximadas.

Existen dos tipos de teorías, la dependiente e independiente del tiempo. Para la sección de estructura fina solo compete analizar la independiente del tiempo. En este aspecto, la aplicación de este método para el estudio de estados estacionarios consiste en encontrar los valores propios de  $E_n$  y los vectores propios de  $|\psi_n\rangle$  de un Hamiltoniano independiente del tiempo dado por

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}, \quad (14)$$

en donde,  $\hat{W}$  representa la perturbación y es muy pequeña comparada con  $\hat{H}_0$  (Hamiltoniano no perturbado del sistema), por lo que sus efectos en los valores de energía y vectores propios serán muy pequeños. Los valores propios de (14) están dados por

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{W})|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle. \quad (15)$$

donde  $\lambda$  es un parámetro real adimensional.

Ahora, es importante analizar dos tipos de aproximaciones que van a depender del comportamiento de  $\hat{H}_0$ , es decir, si éste está degenerado o no.

- Teoría de perturbaciones no degenerada

En este caso,  $\hat{H}_0$  no tiene valores propios degenerados, esto implica que para cada nivel de energía  $E_n^{(0)}$  existe un solo vector de estado  $|\phi_n\rangle$ :

$$\hat{H}_0|\phi_n\rangle = E_n^{(0)}|\phi_n\rangle. \quad (16)$$

La principal idea de teoría de perturbaciones consiste en asumir que tanto los valores y vectores propios son expandidos en series de potencia (expansión de Rayleigh)

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots, \quad |\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots,$$

los parámetros  $E_n^{(k)}$  y kets  $|\psi_n^k\rangle$  representan la  $k$ -ésimas correcciones de los valores y vectores propios, respectivamente. Realizando las sustituciones pertinentes y tomando en cuenta que  $\langle \phi_n | \hat{H}_0 | \psi_n \rangle = \langle \phi_n | \psi_n^1 \rangle = 0$  y  $\langle \phi_n | \psi_n \rangle = 1$  se obtiene que la corrección de primer orden de la energía está dada por

$$E_n^{(1)} = E_n^{(0)} + \langle \phi_n | \hat{W} | \phi_n \rangle, \quad (17)$$

mientras que los vectores de estado  $|\psi_n\rangle$  de  $\hat{H}$  para primer orden 0 está dado por

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \hat{W} | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m\rangle.$$

- Teoría de perturbaciones degenerada

En este caso, se aplica teoría de perturbaciones para determinar el espectro de energía y los estados del sistema donde  $\hat{H}_0$  está degenerado

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{W})|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle.$$

Como los niveles de energía  $E_n^{(0)}$  están degenerados, se tiene

$$\hat{H}_0|\phi_{n_\alpha}\rangle = E_n^{(0)}|\phi_{n_\alpha}\rangle, \quad (\alpha = 1, 2, 3, \dots). \quad (18)$$

Además, se puede escribir los vectores de  $|\psi_n\rangle$  como una combinación lineal en función del estado  $|\phi_{n_\alpha}\rangle$ :

$$|\psi_n\rangle = \sum_{\alpha=1} a_\alpha |\phi_{n_\alpha}\rangle, \quad (19)$$

considerando  $|\phi_{n_\alpha}\rangle$  ortonormal con respecto a  $\alpha$  y su norma  $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$ , los coeficientes  $a_\alpha$  obedecen la siguiente relación

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = \sum_{\alpha, \beta} a_\alpha^* a_\beta \delta_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha=1} |a_\alpha|^2 = 1.$$

Con estas ideas es viable calcular los valores propios a primer orden y los vectores de estados a orden 0 para un estado degenerado, para lo cual se realiza el siguiente procedimiento

1. Para cada nivel degenerado, calcular el determinante de la matriz  $fxf$  de la perturbación  $\hat{W}$ :

$$\widehat{W} = \begin{pmatrix} \widehat{W}_{11} & \cdots & \widehat{W}_{1f} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \widehat{W}_{f1} & \cdots & \widehat{W}_{ff} \end{pmatrix}$$

donde  $\widehat{W}_{\alpha\beta} = \langle \phi_{n_\alpha} | \widehat{W} | \phi_{n_\beta} \rangle$ .

2. Diagonalizar la matriz y encontrar los valores propios de  $E_{n_\alpha}^{(1)}$  y sus correspondientes vectores propios

$$a_\beta = \begin{pmatrix} a_{\alpha 1} \\ \vdots \\ a_{\alpha f} \end{pmatrix}, \quad (\beta = 1, 2, \dots).$$

3. Finalmente, los valores propios de energía a primer orden están dados por

$$E_{n_\alpha} = E_n^{(0)} + E_{n_\alpha}^{(1)} \quad (\alpha = 1, 2, \dots). \quad (20)$$

y sus correspondientes vectores propios a orden cero estarán definidos por:

$$|\psi_{n_\alpha}\rangle = \sum_{\beta=1} a_{\alpha\beta} |\phi_{n_\beta}\rangle.$$

#### 1.5.1.5. Estructura fina

La estructura fina de los niveles de energía del átomo de Hidrógeno está dada por dos efectos: el acoplamiento del espín-órbita y la corrección relativista de la energía cinética. Utilizando teoría de perturbaciones es posible calcular dichas correcciones; para ello, se parte del siguiente Hamiltoniano

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{H}_{FS}, \quad (21)$$

en la cual el Hamiltoniano no perturbado  $\widehat{H}_0$  está definido por (9) y el Hamiltoniano que determina la estructura fina corresponde a la suma de (Hertel y Schulz, 2015, pp. 396-398)

$$\widehat{H}_{FS} = \widehat{H}_R + \widehat{H}_{SO}. \quad (22)$$

El primer término está relacionado con las correcciones a la energía cinética debido a los efectos relativistas. Mientras que el segundo término, se debe a la interacción entre el momento angular orbital debido al movimiento relativo entre el electrón y el protón y momento angular magnético del espín del electrón.

La corrección relativista para la energía cinética está dada por:

$$\widehat{H}_R = -\frac{\hat{p}^4}{8m_e^2c^2}, \quad (23)$$

para determinar las correcciones de primer orden de la perturbación (23) basta con calcular su valor esperado en el estado  $|nljm_j\rangle$  que corresponde a la base en la suma de momento angular, es decir la suma del momento angular orbital más el espín:

$$E_R^{(1)} = \langle nljm_j | \hat{H}_R | nljm_j \rangle = -\frac{\alpha_{FS}^2 |E_n^{(0)}|}{n^2} \left( \frac{8n}{2l+1} - 3 \right), \quad (24)$$

donde  $\alpha_{FS} = \frac{\hbar}{m_e c a_0} \simeq \frac{1}{137}$  corresponde a la constante de estructura fina, que es una medida de la magnitud de los efectos relativistas en el átomo (Auzinsh, Budker y Rochester, 2010, p.15) y en la aproximación no relativista  $E_n^{(0)}$  corresponde a la energía (13) donde se despreció el momento angular intrínseco del electrón.

En otro orden de ideas, como se mencionó  $\hat{H}_{SO}$  representa el acoplamiento espín-órbita dado por la interacción entre el momento magnético del espín del electrón ( $\boldsymbol{\mu}_S$ ) y el campo magnético orbital del núcleo ( $\mathbf{B}$ ) expresado como

$$\hat{H}_{SO} = -\boldsymbol{\mu}_S \cdot \mathbf{B},$$

en la cual

$$\boldsymbol{\mu}_S = -\frac{e\hat{\mathbf{S}}}{m_e c}, \quad \mathbf{B} = \frac{1}{em_e c} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \hat{\mathbf{L}},$$

entonces

$$\hat{H}_{SO} = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}. \quad (25)$$

Definiendo el momento angular total  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$  y considerando la identidad  $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$ , los valores propios para un conjunto en la base de estados  $|nljm\rangle$  con números cuánticos  $l, s, j$  y  $m_j$  son

$$\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} |nljm\rangle = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] |nljm\rangle,$$

como  $j = l \pm \frac{1}{2}$ , debido a las proyecciones del espín del electrón, se tiene

$$\langle nljm | \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} | nljm \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] = \begin{cases} \frac{1}{2} l \hbar^2, & j = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} (l+1) \hbar^2, & j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Los valores propios dados para correcciones de primer orden en este tipo de interacción espín-órbita está dado por

$$E_{SO}^{(1)} = \langle nlm_j | \hat{H}_{SO} | nlm_j \rangle = \frac{e^2 \hbar^2}{4m_e^2 c^2} \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \langle nl | \frac{1}{r^3} | nl \rangle,$$

en la cual

$$\langle nl | \frac{1}{r^3} | nl \rangle = \frac{2}{n^3 l(l+1)(2l+1) a_0^3},$$

por lo tanto

$$E_{SO}^{(1)} = \frac{|E_n^{(0)}| \alpha_{FS}^2}{n^2} \left[ \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(2l+1)} \right]. \quad (26)$$

Finalmente, la corrección de la estructura fina de primer orden se obtiene sumando las expresiones (24) y (26)

$$E_{FS}^{(1)} = E_{SO}^{(1)} + E_R^{(1)} = E_n^{(0)} \left[ 1 + \frac{\alpha_{FS}^2}{n^2} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (27)$$

De este modo, se observa que la energía no perturbada  $E_n^{(0)}$  se encuentra degenerada en  $l$ , por tanto los efectos de la estructura fina en  $E_{FS}^{(1)}$  rompen la degeneración y de esta manera existen dos posibles valores cuando  $j = l \pm \frac{1}{2}$ , permitiendo que los niveles de energía se dividan o se desdoblén (Rowan, 2013, p.14).

#### 1.5.1.6. Estructura hiperfina

En el espectro atómico existe otro nivel de división más allá de la estructura fina, conocida como estructura hiperfina que resulta de la interacción entre el momento dipolar magnético del núcleo ( $\boldsymbol{\mu}_N$ ) con el momento dipolar magnético del electrón ( $\boldsymbol{\mu}_S$ ). Las correcciones de energía debido a este efecto están en el orden de  $10^{-7} eV$  (Hertel y Schulz, 2015, pp. 447-448), lo cual corresponde a una millonésima parte en la energía de (13). Estas correcciones darán origen a nuevos desdoblamientos en la estructura fina.

Usando este conjunto de ideas, se puede plantear el Hamiltoniano de perturbación debido a la presencia de  $\boldsymbol{\mu}_N$  y es quien permitirá las correcciones más pequeñas que corresponde a la estructura hiperfina, ya que el momento magnético del núcleo es más pequeño que el magnético producido por el electrón. Dicho Hamiltoniano es de la forma:

$$\hat{H}_{HFS} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \quad (28)$$

donde

$$\hat{H}_1 = -\frac{i\hbar e}{m} \mathbf{A} \cdot \nabla, \quad (29)$$

en el cual, el vector potencial  $\mathbf{A}$  debido al dipolo puntual localizado en el origen, está definido mediante

$$\mathbf{A} = \frac{\mu_0}{4\pi} (\boldsymbol{\mu}_N \times \mathbf{r}) \frac{1}{r^3}, \quad (30)$$

con  $\boldsymbol{\mu}_N = g_I \mu_N \frac{\hat{\mathbf{l}}}{\hbar}$  (donde  $g_I = 5.586$  es el factor de Landé nuclear,  $\mu_N = \mu_B \frac{m_e}{M_p} \simeq \frac{\mu_B}{1836}$  es el magnetón nuclear y  $\mu_B$  es el magnetón de Bohr). Introduciendo (23) en (29) se obtiene

$$\hat{H}_1 = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2}{\hbar^2} g_I \mu_B \mu_N \frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{l}}, \quad (31)$$

en el cual  $\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}$  y  $\mu_0 = 1/\epsilon_0 c^2$  es la permeabilidad magnética.

Por otro lado, el Hamiltoniano  $\hat{H}_2$  está dado por la interacción entre el espín del electrón y el campo magnético ( $\mathbf{B}$ ) asociado al potencial vector (30)

$$\hat{H}_2 = -\boldsymbol{\mu}_S \cdot \mathbf{B}, \quad (32)$$

donde

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[ \boldsymbol{\mu}_N \nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) - \nabla (\boldsymbol{\mu}_N \cdot \nabla) \right],$$

conociendo que el momento dipolar magnético del electrón puede definirse como  $\boldsymbol{\mu}_S = -g_s \mu_B \hat{S}/\hbar$  ( $g_s = 2$  representa el factor de giromagnético para el electrón) y  $\nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta(\mathbf{r})$ , así el Hamiltoniano (32) se reescribe como

$$\hat{H}_2 = -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2}{\hbar^2} g_I \mu_B \mu_N \left[ \hat{S} \cdot \hat{\mathbf{l}} \nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) - (\hat{S} \cdot \nabla) (\hat{\mathbf{l}} \cdot \nabla) \frac{1}{r} \right]. \quad (33)$$

Partiendo de la idea que el campo magnético en el núcleo es más largo y considerando que los electrones tienen una distribución de carga de densidad  $-e|\psi(\mathbf{r})|^2$ , es conveniente examinar  $\hat{H}_2$  para dos casos  $r \neq 0$  y  $r = 0$  (Bransden y Joachain, 1973, pp. 236-240).

- $r \neq 0$

Para este caso se considera que el primer término de (26) desaparece y aplicando  $\nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta(\mathbf{r})$  ( $\delta(\mathbf{r}) = \int |\psi_{n00}(0)|^2$  función delta), se obtiene

$$(\hat{S} \cdot \nabla) (\hat{\mathbf{l}} \cdot \nabla) \frac{1}{r} = \frac{1}{r^3} \left[ \hat{S} \cdot \hat{\mathbf{l}} - 3 \frac{(\hat{S} \cdot \mathbf{r})(\hat{\mathbf{l}} \cdot \mathbf{r})}{r^2} \right], \quad (34)$$

introduciendo (34) en la expresión en (33), se tiene

$$\hat{H}_2 = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{r^3} \left[ \mu_S \cdot \mu_N - 3 \frac{(\hat{S} \cdot r)(\hat{I} \cdot r)}{r^2} \right], \quad (35)$$

Ahora, introduciendo (31) y (35) en el Hamiltoniano (28), se obtiene la interacción entre el  $\mu_N$  y  $\mu_S$  para el cual  $l \neq 0$

$$\hat{H}_{HFS} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2}{\hbar^2} g_I \mu_B \mu_N \frac{1}{r^3} \left[ \hat{L} \cdot \hat{I} - \hat{S} \cdot \hat{I} + 3 \frac{(\hat{S} \cdot r)(\hat{I} \cdot r)}{r^2} \right] = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2}{\hbar^2} g_I \mu_B \mu_N \frac{1}{r^3} \hat{G} \cdot \hat{I}, \quad (36)$$

donde

$$\hat{G} = \hat{L} - \hat{S} + 3 \frac{(\hat{S} \cdot r)r}{r^2}. \quad (37)$$

Conociendo, que los vectores de estado de orden cero  $|lsjm_jIM_I\rangle$  están  $(2j+1)(2I+1)$  degenerados en  $m_j$  y  $M_I$ . La diagonalización de la perturbación (29) se simplifica al introducir el momento angular total,  $\hat{F}$ . Siempre que  $F$  y  $M_F$  permanezcan como números cuánticos idóneos para (28), es conveniente formar nuevos vectores de estado de orden cero  $|lsjIFM_F\rangle$  que son una combinación lineal de  $|lsjm_jIM_I\rangle$ . Por lo tanto, los valores propios dados para correcciones de primer orden para (28) está dada mediante

$$E_{HFE}^{(1)} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2}{\hbar^2} g_I \mu_B \mu_N \langle lsjIFM_F | \frac{1}{r^3} \hat{G} \cdot \hat{I} | lsjIFM_F \rangle, \quad l \neq 0, \quad (38)$$

utilizando el elemento de matriz  $\hat{G} \cdot \hat{I} = [j(j+1)\hbar^2]^{-1} (G \cdot \hat{f})(\hat{I} \cdot \hat{f})$  tomada entre estados con igual  $j$ , y aplicando

$$\hat{F}^2 = \hat{I}^2 + \hat{I} \cdot \hat{f} + \hat{f}^2, \quad \hat{I} \cdot \hat{f} = \frac{1}{2} (\hat{F}^2 + \hat{I}^2 + \hat{f}^2),$$

(31) se simplifica a

$$E_{HFE}^{(1)} = \frac{C}{2} [F(F+1) - I(I+1) - j(j+1)] \quad l \neq 0, \quad (39)$$

donde

$$C = \frac{\mu_0}{4\pi} 2g_I \mu_B \mu_N \frac{1}{j(j+1)\hbar^2} \left\langle \frac{1}{r^3} G \cdot \hat{f} \right\rangle, \quad (40)$$

Finalmente, para resolver  $\left\langle \frac{1}{r^3} \hat{G} \cdot \hat{f} \right\rangle$  tomamos (30) y aplicamos  $\hat{L} \cdot r = 0$ , por tanto

$$\hat{G} \cdot \hat{f} = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 3 \frac{(\hat{S} \cdot r)}{r^2},$$

que conlleva a

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \hat{G} \cdot \hat{J} \right\rangle = l(l+1) \hbar^2 \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle,$$

entonces (33) se reduce a

$$C = \frac{\mu_0}{4\pi} 2g_I \mu_B \mu_N \frac{l(l+1)}{j(j+1)} \frac{Z^3}{a_\mu^3 n^3 (l+1/2)(l+1)}, \quad (41)$$

con  $a_\mu = a_0(m_e/\mu)$ , con  $\mu$  es la masa reducida del electrón con respecto al núcleo.

- $r = 0$

En este caso la función de onda se comporta como  $r^l$  en el origen, la expresión (28) será relevante para vectores de estados con  $l = 0$ . Por otra parte, para los elementos de la matriz que involucran estados esféricamente simétricos (con  $l = 0$ ), la ecuación (34) se expresa como

$$(\hat{S} \cdot \nabla)(\hat{I} \cdot \nabla) \frac{1}{r} = \hat{S} \cdot \hat{I} - \frac{4\pi}{3} \delta(\mathbf{r}).$$

Del mismo modo, se determina que  $\hat{H}_1$  no contribuye para estados  $l = 0$ , así, la interacción entre momento magnético y momento dipolar del núcleo y un electrón esta dado por

$$\hat{H}_{HFS} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2}{\hbar^2} g_I \mu_B \mu_N \frac{8\pi}{r^3} \delta(\mathbf{r}) \hat{S} \cdot \hat{I} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{8\pi}{r^3} \mu_S \cdot \mu_N \delta(\mathbf{r}), \quad (42)$$

a esta expresión se la conoce como interacción de contacto.

Calculando las correcciones de energía de primer orden debido a la perturbación (42), se obtiene

$$E_{HFE}^{(1)} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2}{\hbar^2} g_I \mu_B \mu_N \frac{8\pi}{r^3} \langle \delta(\mathbf{r}) \hat{S} \cdot \hat{I} \rangle, \quad l = 0 \quad (43)$$

y utilizando

$$\hat{F} = \hat{I} + \hat{S}, \quad \hat{S} \cdot \hat{I} = (\hat{F}^2 - \hat{I}^2 - \hat{S}^2),$$

(43) se reduce a

$$E_{HFE}^{(1)} = \frac{C_0}{2} [F(F+1) - I(I+1) - s(s+1)], \quad l = 0, \quad s = 1/2, \quad (44)$$

$$C_0 = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{16}{3} g_I \mu_B \mu_N \frac{Z^3 \alpha_{FS}^2}{a_\mu^3 n^3}, \quad (45)$$

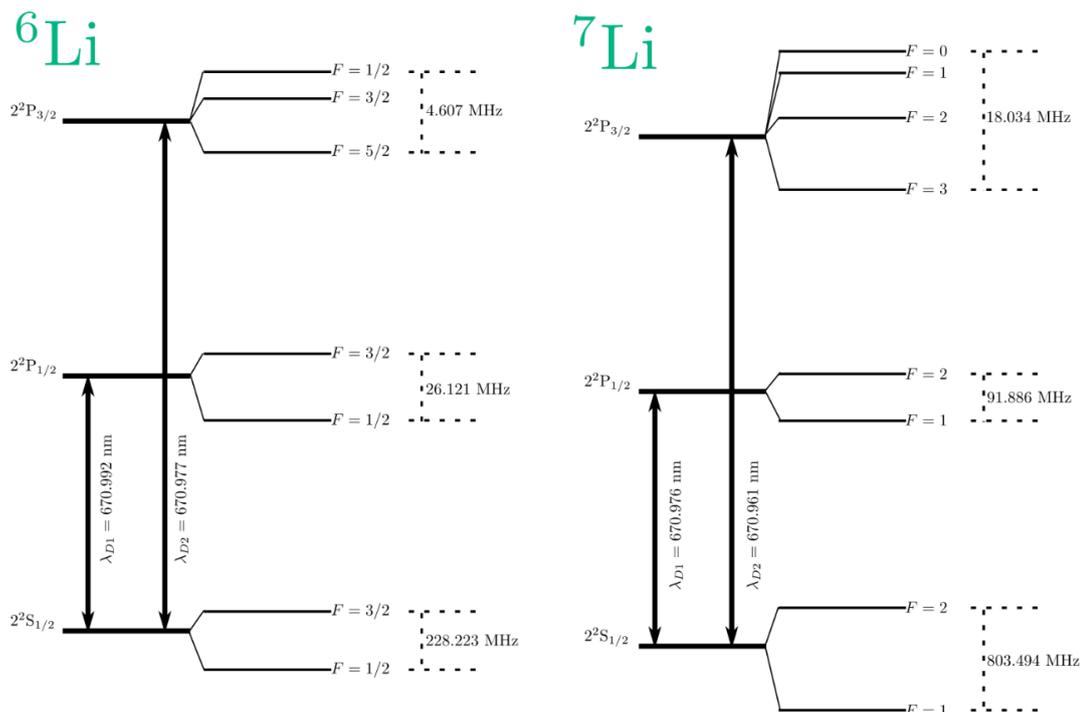
Finalmente, introduciendo la constante de estructura fina  $\alpha_{FS}$ , comparando (32) con (44) y sustituyendo  $j = s = \frac{1}{2}$ , las correcciones de energía de primer orden de (44) pueden ser escrita como

$$E_{HFE}^{(1)} = \frac{1}{2} \frac{m_e}{m_p} g_I \frac{Z^3 \alpha_{FS}^2}{n^3} \left( \frac{\mu}{m_e} \right)^3 \frac{F(F+1) - I(I+1) - j(j+1)}{j(j+1)(2l+1)}, \quad l = 0, \quad l \neq 0. \quad (46)$$

### 1.5.2. Litio

El átomo objetivo de este trabajo de investigación es el Litio. En su estado sólido es un metal alcalino considerado el más ligero de la tabla periódica. Posee dos isótopos estables:  ${}^6\text{Li}$  y  ${}^7\text{Li}$ , con abundancias naturales de 7.59% y 92.41%, respectivamente. Posee un solo electrón en su último nivel energético (Hernández, 2018, p.14). Su estructura electrónica sencilla permite aproximar su comportamiento al modelo de átomo de un electrón y así determinar su estructura fina e hiperfina.

En este contexto, la estructura fina de los dos isótopos del Litio es mostrada en la Figura 1-1, la cual evidencia que el  ${}^6\text{Li}$  tiene espín nuclear entero  $I = 1$  y el  ${}^7\text{Li}$  tiene espín nuclear semi-entero  $I = \frac{3}{2}$ . Además, se observa que el estado base etiquetado como  $2^2S_{1/2}$  de los isótopos de Litio, que es en donde se lo encuentra con mayor probabilidad en la naturaleza, tienen esencialmente dos niveles hiperfinos, por un lado, el  ${}^6\text{Li}$  tiene estados  $F = \frac{1}{2}$  y  $F = \frac{3}{2}$ , mientras que el  ${}^7\text{Li}$  tiene estados  $F = 1$  y  $F = 2$ . En contraste, el primer estado excitado se compone de dos niveles el  $2^2P_{1/2}$  y el  $2^2P_{3/2}$ , conocidos como las líneas  $D_1$  y  $D_2$ , respectivamente. De esta manera, como se aprecia en la Figura 1-1. las diferentes transiciones hiperfinas en la línea  $D_1$ ,  $2^2S_{1/2} \rightarrow 2^2P_{1/2}$ , están bien separadas y no se superponen. Sin embargo, para las transiciones en la línea  $D_2$ ,  $2^2S_{1/2} \rightarrow 2^2P_{3/2}$ , los niveles hiperfinos están excesivamente juntas como consecuencia cada pico tiene dos o tres niveles hiperfinos del estado excitado, que no se pueden resolver, pero que se encuentran sujetas a las reglas de selección del momento angular (Das y Natarajan, 2007, p. 1-9).



**Figure 1-1.** Esquemas de la estructura fina e hiperfina de los isótopos  ${}^6\text{Li}$  y  ${}^7\text{Li}$ , incluyendo las longitudes de onda de luz que pueden ser usadas.

Realizado por: Quinllin, Sandy. 2020

### 1.5.3. Sistemas de interacción radiación-materia

En mecánica cuántica hay varias representaciones del vector de estado y los operadores; cada representación o imagen se diferencian unas de otras en la manera como manejan la evolución temporal del sistema (Zetilli, 2001, p.539). Comenzaremos describiendo las diferentes imágenes en la que se pueden representar dichos vectores de estado, para luego explicar un sistema específico, el cual corresponde al átomo de dos niveles.

Así, una descripción general puede ser hecha a través de un Hamiltoniano que contiene dos términos esencialmente (Pauling y Wilson Jr, 1935, p.233):

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}, \quad (47)$$

en donde  $\hat{H}_0$  representa al Hamiltoniano no-perturbado o integrable directamente.  $\hat{W}$  es conocido como Hamiltoniano perturbado y en general, usando las ecuaciones dinámicas de manera directa no puede ser integrado. Para resolver el Hamiltoniano del sistema se tienen varias estrategias dependiendo de las características del sistema que se está estudiando *per se*. Para esto, es necesario conocer las propiedades de la evolución dinámica y por tanto de las imágenes o representaciones que deben considerarse.

Vale la pena mencionar, que la dinámica del sistema no sólo puede ser descrita en términos de los vectores de estado, sino que también en términos de los coeficientes en una base adecuada. Es decir que, las propiedades del sistema serán ahora caracterizadas por dichos coeficientes.

#### 1.5.3.1. Imagen de Schrödinger

En este esquema los operadores en general son independientes del tiempo y los vectores de estado llevan la dependencia temporal. A partir de ello, es posible describir sistemas con Hamiltonianos independientes del tiempo. Así, los vectores de estado evolucionan temporalmente de la siguiente forma (Zetilli, 2001, p.550):

$$|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}_0(t)|\psi_S(0)\rangle, \quad (48)$$

donde  $\hat{U}_0 = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$  corresponde al operador de evolución temporal y  $|\psi_S(0)\rangle$  es el vector de estado en el tiempo inicial  $t = 0$ . Además, los vectores base del operador  $\hat{H}_0$  son ortonormales y completos. De esta manera, usando una relación de completéz, se puede expresar (48) en función de su amplitud de probabilidad  $a_n(t)$  asociado a  $|\psi_S(t)\rangle$  mediante

$$|\psi_S(t)\rangle = \sum_{n,\alpha} |n, \alpha\rangle \langle n, \alpha | \psi_S(t)\rangle = \sum_{n,\alpha} a_{n,\alpha}(t) |n, \alpha\rangle, \quad (49)$$

en donde  $a_{n,\alpha}(t) = \langle n, \alpha | \psi_S(t) \rangle$ . Por otro lado, la ecuación de movimiento para este sistema puede ser descrita como

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_S(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}_S |\psi_S(t)\rangle, \quad (50)$$

reemplazando (49) en (50) se tiene

$$i\hbar \dot{a}_{n,\alpha} = a_{n,\alpha} E_n + \sum_{m,\alpha} a_{m,\alpha} \hat{W}_{nm}^{(S)}, \quad (51)$$

donde  $\hat{W}_{nm}^{(S)} = \langle m | \hat{W}_S | n \rangle \delta_{\alpha,\beta}$  corresponde al elemento de matriz.

### 1.5.3.2. Imagen de interacciones

En esta representación equivalente a la representación de Schrödinger, tanto los operadores como los vectores de estado son dependientes del tiempo. Por consiguiente, esta imagen es útil para describir fenómenos cuánticos con Hamiltonianos dependientes del tiempo. Así, los vectores de estado en este tipo de imagen están definidos en términos de  $|\psi_S(t)\rangle$  mediante (Zetilli, 2001, p.551):

$$|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}_0^\dagger(t) |\psi_S(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi_S(t)\rangle, \quad (52)$$

y expresando  $|\psi_I(t)\rangle$  en términos de un coeficiente de expansión  $c_{n,\alpha}(t)$  se tiene

$$|\psi_I(t)\rangle = \sum_{n,\alpha} e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} c_{n,\alpha}(t) |n, \alpha\rangle = c_1 e^{-i\omega_{12} t/2} |1\rangle + c_2 e^{-i\omega_{12} t/2} |2\rangle, \quad (53)$$

para encontrar los valores de  $c_{n,\alpha}(t)$  se parte de la siguiente ecuación dinámica

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = \hat{W}_I |\psi_I(t)\rangle, \quad (54)$$

entonces reemplazando (52) en (54) se obtiene

$$i\hbar \dot{c}_n = \sum_{n,\alpha} e^{i\omega_{mn} t} c_{m,\alpha} \hat{W}_{nm}^{(I)}, \quad (55)$$

donde

$$\omega_{mn} = \frac{(E_m - E_n)}{\hbar}, \quad (56)$$

es la frecuencia de transición o la muy conocida regla de Bohr, que establece que cuando hay una transición entre estados, la frecuencia de la radiación emitida es proporcional a la diferencia entre las energías de los estados (Darrigol et al., 2016, p.7).

Luego de este análisis, utilizando las ecuaciones (51) y (54) se puede establecer una conexión entre las imágenes de Schrödinger y de interacción, mediante

$$\widehat{W}_{nm}^{(I)} = \widehat{U}_0^\dagger \widehat{W}_{nm}^{(S)} \widehat{U}_0, \quad (57)$$

es decir, que los operadores entre las dos imágenes se distinguen apenas por una diferencia de energía contenida dentro de una fase.

### 1.5.3.3. Imagen de interacción del campo

Este tipo de representación es importante cuando el campo electromagnético de la luz induce transiciones entre dos niveles (Berman y Malinovsky, 2010, p.32), pero dicho campo puede considerarse cuasi-monocromático. También este puede entenderse, como una extensión de la representación de interacción, en el cual, bajo una rotación cuántica sobre el vector de estado  $|\tilde{\psi}_I\rangle$  alrededor de un eje preferencial y convenientemente escogido transformará mediante un operador de rotación  $\widehat{R}$  (Auzinsh, Budker y Rochester, 2010, p.30), es decir, la función de onda transformará a través de

$$|\tilde{\psi}_I(t)\rangle = \widehat{R}^\dagger |\psi_I(t)\rangle. \quad (58)$$

Se sabe que la función de onda en mecánica cuántica se encuentra descrita en un espacio lineal complejo, conocido como espacio de Hilbert (Ashtekar y Schilling, 1999, p.1). De la misma forma, los operadores se encuentran también mapeados dentro de este espacio. Se puede entender al operador  $\widehat{R}$  no necesariamente definido en los reales, pero sí en el espacio complejo. Así, se lo considera que es un unitario, es decir  $\widehat{R}\widehat{R}^\dagger = \widehat{R}^\dagger\widehat{R} = \widehat{1}$ , en donde el operador auto-adjunto es igual a su inverso,  $\widehat{R}^{-1} = \widehat{R}^\dagger$ . Además, este operador de rotaciones puede ser expresado en términos generales de las matrices de Pauli  $\sigma$  sobre un eje  $n$

$$\widehat{R} = e^{-i\sigma \cdot n \phi t/2}, \quad \widehat{R}^\dagger = e^{i\sigma \cdot n \phi t/2}. \quad (59)$$

Igualmente, mediante una relación de completez, se puede expresar (58) en función de su amplitud de probabilidad  $\tilde{c}_{n,\alpha}$  asociado a  $|\tilde{\psi}_I(t)\rangle$  a través de

$$|\tilde{\psi}_I(t)\rangle = \sum_{n,\alpha} |n,\alpha\rangle \langle n,\alpha | \tilde{\psi}_I(t)\rangle = \sum_{n,\alpha} |n,\alpha\rangle \langle n,\alpha | \widehat{R}\widehat{U}^\dagger | \psi_S(t)\rangle = \sum_{n,\alpha} \tilde{c}_{n,\alpha} |n(t),\alpha\rangle. \quad (60)$$

La ecuación de dinámica en esta imagen está dada por

$$i\hbar \frac{\partial |\tilde{\psi}_I(t)\rangle}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial \widehat{R}^\dagger}{\partial t} \widehat{R}\widehat{R}^\dagger |\psi_I(t)\rangle + i\hbar \widehat{R}^\dagger \widehat{R}^\dagger \widehat{W}_I \widehat{R} \frac{\partial |\psi_I(t)\rangle}{\partial t} = \widehat{H}_I |\tilde{\psi}_I(t)\rangle, \quad (61)$$

donde se define al Hamiltoniano en la representación de interacción del campo como

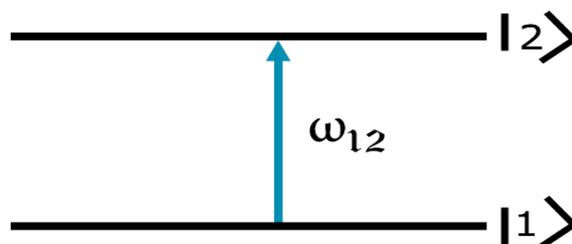
$$\hat{H}_I = i\hbar \frac{\partial \hat{R}^\dagger}{\partial t} \hat{R} + \hat{R}^\dagger \hat{W}_I \hat{R}. \quad (62)$$

#### 1.5.4. Átomos de dos niveles

Una aproximación de un sistema real atómico que represente la interacción entre una colección de átomos de dos niveles con un campo de luz óptico es conocido como sistema atómico de dos niveles o átomo de dos niveles, el cual, permite describir de manera simplificada la fenomenología intrínseca de varios procesos físicos como: el efecto Stark, las oscilaciones Rabi, saturación óptica, etc. (Joshi y Min, 2012, p.6).

Considerando esta simplificación, el átomo de dos niveles se puede representar mediante dos vectores que corresponde a la base del Hamiltoniano  $\hat{H}_0$ , uno corresponderá al estado base etiquetado con  $|1\rangle$  y el otro corresponderá al estado excitado etiquetado con  $|2\rangle$ . La diferencia energética sigue la regla de Bohr (56), y corresponde a los valores propios del Hamiltoniano no-perturbado.

En este contexto, considerando un átomo que interactúa con un campo de radiación, donde el campo óptico es casi resonante con la frecuencia de transición ( $\omega_{12}$ ) del estado  $|1\rangle$  al estado  $|2\rangle$ , este interactuará eficazmente solo con los dos niveles del átomo, ver Figura 2-1. Para simplificar el problema, se considera que la luz es monocromática y no se toma en cuenta la polarización de esta. Además, este concepto se encuentra muy motivado, ya que en el contexto experimental los haces de luz provienen de un láser, el cual es monocromático y con una polarización adecuada. En otro orden ideas, también se ha ignorado el hecho de que los niveles atómicos tienen varios subniveles que pueden contribuir a una transición resonante; lo que implica complicaciones cuando se intenta comprobar la aproximación de átomo de dos niveles a nivel experimental (Meystre y Sargent, 2007, p.72).



**Figure 2-1.** Excitación casi resonante de un átomo de dos niveles.

Realizado por: Quinllin, Sandy. 2020.

El sistema de dos niveles de átomo puede describirse en términos de la imagen de Schrödinger mediante

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_S\rangle}{\partial t} = \hat{H}_S |\psi_S\rangle,$$

siguiendo la idea propuesta en la ecuación (47), el operador Hamiltoniano ( $\hat{H}_S$ ) está definido como

$$\hat{H}_S = \hat{H}_0(\mathbf{r}) + \hat{W}_S(\mathbf{r}, t), \quad (63)$$

$\hat{H}_0(\mathbf{r}) \equiv \hat{H}_0$  es el Hamiltoniano no perturbado y es independiente del tiempo, mientras que el Hamiltoniano perturbado tiene toda dependencia temporal  $\hat{W}_S(\mathbf{r}, t) \equiv \hat{W}_S$ . En este sistema, el Hamiltoniano perturbado representa la energía de interacción con el campo aplicado, es decir, contiene toda la información de interacción átomo-campo electromagnético. En general,  $\hat{H}_0$  puede tener valores propios degenerados, de tal forma la ecuación de valores propios puede ser escrita como (Zetilli, 2001, pp. 476-478):

$$\hat{H}_0 |n, \alpha\rangle = E_n |n, \alpha\rangle, \quad (64)$$

en el cual  $E_n$  y  $|n, \alpha\rangle$  son los valores y vectores propios de  $\hat{H}_0$ , respectivamente.  $n$  etiqueta los números cuánticos del sistema dos niveles.  $\alpha$  representa el número de degeneraciones del sistema; esta propiedad comienza a ser relevante cuando se incluyen los grados de libertad internos, que a su vez restringe las posibles transiciones que ocurren cuando se induce luz con una “polarización” bien definida. Además,  $|n, \alpha\rangle$  es una base completa y ortonormal que cumple

$$\langle n, \alpha | m, \beta \rangle = \delta_{n,m} \delta_{\alpha,\beta}, \quad \sum_{n,\alpha} |n, \alpha\rangle \langle n, \alpha| = \hat{1}. \quad (65)$$

Considerando un sistema muy simplificado en el cual no se toman en cuenta las degeneraciones del sistema, es decir  $\alpha = 1$  tanto para el estado base  $|1\rangle$  como para el estado excitado  $|2\rangle$ . Siguiendo esta idea, en el sistema de dos niveles  $\hat{H}_0$  esta dado por (Gerry y Knight, 2005, p.105)

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_{12} (|2\rangle \langle 2| - |1\rangle \langle 1|), \quad (66)$$

el cual es muy similar a un sistema de espín- $\frac{1}{2}$  que interactúa con un campo magnético constante en el contexto de resonancia magnética nuclear (Foot, 2005, K. Blum). Siguiendo la ecuación (65), se tiene que

$$\langle n | m \rangle = \delta_{n,m}, \quad \sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1},$$

es decir, es una base ortonormal y completa. Para este caso  $n, m = 1, 2$ . Así, escribiendo (58) en forma matricial, se obtiene

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_{12} \begin{pmatrix} \langle 1 | \hat{H}_0 | 1 \rangle & \langle 1 | \hat{H}_0 | 2 \rangle \\ \langle 2 | \hat{H}_0 | 1 \rangle & \langle 2 | \hat{H}_0 | 2 \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar \omega_{12}}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar \omega_{12}}{2} \hat{\sigma}_3 \quad (67)$$

donde  $\hat{\sigma}_3$  es la matriz de Pauli a lo largo del eje-3.

Imaginando al átomo como un átomo con un solo electrón, el Hamiltoniano de interacción puede ser descrito por la aproximación de dipolo eléctrico, en la cual la interacción del electrón y el campo electromagnético puede escribirse como:

$$\hat{W}_S = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{R}, t), \quad (68)$$

donde  $\hat{\boldsymbol{\mu}}$  es el operador de momento dipolar atómico con respecto al origen,  $\mathbf{R}$  es la posición del centro de masa atómico y  $\mathbf{E}(\mathbf{R}, t)$  es el campo eléctrico del campo aplicado (Meystre y Sargent, 2007, p.75-76) en la aproximación semiclásica. Por motivos de simplicidad, en esta sección se ignora la dependencia espacial, entonces, el campo eléctrico varía mediante

$$\mathbf{E}(t) = E_0 e^{-i\omega_L t} + E_0^* e^{i\omega_L t}, \quad (69)$$

donde  $\omega_L$  es la frecuencia del campo y  $\mathbf{E}_0 \equiv E_0(\mathbf{R}, k)$ . Además, la forma matricial de (68) para un sistema de dos niveles es

$$\hat{W}_S = - \begin{pmatrix} \langle 1 | \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{E} | 1 \rangle & \langle 1 | \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{E} | 2 \rangle \\ \langle 2 | \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{E} | 1 \rangle & \langle 2 | \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{E} | 2 \rangle \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 & \hat{\boldsymbol{\mu}}_{12} \cdot \mathbf{E} \\ \hat{\boldsymbol{\mu}}_{21}^* \cdot \mathbf{E} & 0 \end{pmatrix}, \quad (70)$$

donde los elementos de la diagonal del Hamiltoniano de interacción desaparecen debido a la simetría, es decir  $\langle 1 | \hat{\boldsymbol{\mu}} | 1 \rangle = 0$  y  $\langle 2 | \hat{\boldsymbol{\mu}} | 2 \rangle = 0$ . Por otra parte, los elementos de matriz fuera de la diagonal no desaparecen,  $\hat{\boldsymbol{\mu}}_{12} = \langle 1 | \hat{\boldsymbol{\mu}} | 2 \rangle = \langle 2 | \hat{\boldsymbol{\mu}} | 1 \rangle^* = \hat{\boldsymbol{\mu}}_{21}^*$  (Joshi y Xiao, 2012, p.8). Ahora aplicando (68) en (70) se tiene

$$\hat{W}_S = -\hbar \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\hbar} \hat{\boldsymbol{\mu}}_{12} E_0 e^{-i\omega_L t} + \frac{1}{\hbar} \hat{\boldsymbol{\mu}}_{12} E_0^* e^{i\omega_L t} \\ \frac{1}{\hbar} \hat{\boldsymbol{\mu}}_{21} E_0 e^{-i\omega_L t} + \frac{1}{\hbar} \hat{\boldsymbol{\mu}}_{21}^* E_0^* e^{i\omega_L t} & 0 \end{pmatrix},$$

adicionalmente definiendo

$$\Omega_{ij} = \frac{\hat{\boldsymbol{\mu}}_{ij} E_0}{\hbar}, \quad \Omega_{ij}^* = \frac{\hat{\boldsymbol{\mu}}_{ij}^* E_0}{\hbar} \quad (71)$$

correspondiente a la frecuencia de Rabi, que representa la interacción entre el átomo y el campo (Berman y Malinovsky, 2010, p.25). Dicha frecuencia, es una característica que se manifiesta como consecuencia de la excitación de los átomos por una fuente de luz monocromática, resonante con la transición atómica, en una escala de tiempo mucho más pequeña que la vida media del estado excitado (Wolf, 2006, p.104). En consecuencia  $\hat{W}_S$  estará definida en función de esta frecuencia

$$\widehat{W}_S = -\hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega_{12} e^{-i\omega_L t} + \Omega_{12}^* e^{i\omega_L t} \\ \Omega_{21} e^{-i\omega_L t} + \Omega_{21}^* e^{i\omega_L t} & 0 \end{pmatrix}. \quad (72)$$

Desde otro punto de vista, se puede reescribir  $\widehat{W}_S$  en términos de la imagen de interacción utilizando la relación (57); para ello es necesario expresar el operador unitario en su forma matricial

$$\widehat{U}_0 = \begin{pmatrix} e^{i\omega_{12}t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_{12}t/2} \end{pmatrix}, \quad \widehat{U}_0^\dagger = \begin{pmatrix} e^{-i\omega_{12}t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega_{12}t/2} \end{pmatrix},$$

entonces aplicando (57)

$$\widehat{W}_I = \widehat{U}_0^\dagger \widehat{W}_S \widehat{U}_0, \quad (73)$$

se obtiene

$$\widehat{W}_I = -\hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega_{12} e^{-i(\omega_L + \omega_{12})t} + \Omega_{12}^* e^{-i(\omega_{12} - \omega_L)t} \\ \Omega_{21} e^{i(\omega_{12} - \omega_L)t} + \Omega_{21}^* e^{i(\omega_L + \omega_{12})t} & 0 \end{pmatrix},$$

y recordando que el campo de radiación tiene una frecuencia cercana a la resonancia atómica en  $\omega_{12}$ , por lo que  $|\omega_{12} - \omega_L| \ll (\omega_{12} + \omega_L)$ , entonces  $\omega_{12} + \omega_L \sim 2\omega_{12}$ , que permite despreciar los términos que contienen el factor  $(\omega_{12} + \omega_L)$ . El hecho de despreciar la suma de frecuencias corresponde a eliminar las fluctuaciones rápidas del sistema, y esta aplicación es conocida como la *aproximación de onda rotante* (RWA) (Foot, 2005, p.125). Por esta razón  $\widehat{W}_I$  se reduce a

$$\widehat{W}_I = -\hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega_{12}^* e^{-i(\omega_{12} - \omega_L)t} \\ \Omega_{21} e^{i(\omega_{12} - \omega_L)t} & 0 \end{pmatrix}, \quad (74)$$

En este contexto, utilizando  $\widehat{W}_S = \widehat{U}_0^\dagger \widehat{W}_I \widehat{U}_0$ , se puede expresar (72) como

$$\widehat{W}_S = -\hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega_{12}^* e^{i\omega_L t} \\ \Omega_{21} e^{-i\omega_L t} & 0 \end{pmatrix}, \quad (75)$$

entonces el Hamiltoniano (63) puede reescribirse como:

$$\widehat{H}_S = -\hbar \begin{pmatrix} \frac{\omega_{12}}{2} & \Omega_{12}^* e^{i\omega_L t} \\ \Omega_{21} e^{-i\omega_L t} & -\frac{\omega_{12}}{2} \end{pmatrix}. \quad (76)$$

Ahora definiendo una nueva variable conocida como la *desintonía* del átomo-campo definida como:

$$\delta = \omega_{12} - \omega_L, \quad (77)$$

que representa una comparación entre las frecuencias de transición atómica y del láser; la cual según Meystre y Sargent (2007) tiene tres posibilidades: (i)  $\omega_L < \omega_{12}$ , determinada como *desintonía* hacia rojo, es decir  $\delta < 0$ . (ii) Cuando  $\omega_L > \omega_{12}$ , se conoce como *desintonía* hacia el azul donde  $\delta > 0$ . (iii)  $\omega_L = \omega_{12}$ , en el que la luz se encuentra en resonancia con la transición, esto es  $\delta = 0$ . De esta manera, se puede reescribir el Hamiltoniano de interacción (74) en términos de esta *desintonía*

$$\widehat{W}_I = -\hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega_{12}^* e^{-i\delta t} \\ \Omega_{21} e^{i\delta t} & 0 \end{pmatrix}. \quad (78)$$

Finalmente, para describir como el átomo absorbe energía del campo de luz, basta con encontrar las ecuaciones de movimiento (54) en la imagen de interacción. La dinámica será descrita en términos de los cambios de los coeficientes,  $c_{n,\alpha}$ . Para ello, primero es necesario expresar el vector de estado (53) en su forma matricial

$$|\psi_I\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\omega_{12}t/2} c_1 \\ e^{i\omega_{12}t/2} c_2 \end{pmatrix}, \quad (79)$$

reemplazando (78) y (79) en (54) se obtiene

$$i\hbar \dot{c}_{n,\alpha} = -\hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega_{12}^* e^{-i\delta t} \\ \Omega_{21} e^{i\delta t} & 0 \end{pmatrix} c_{n,\alpha},$$

en consecuencia, las ecuaciones de la amplitud de probabilidad son

$$\dot{c}_1 = i\Omega_{12}^* e^{-i\delta t} c_2, \quad (80)$$

$$\dot{c}_2 = i\Omega_{21} e^{i\delta t} c_1. \quad (81)$$

A partir de otro enfoque, aplicando las ideas de imagen de interacción explicadas anteriormente, es idóneo describir al sistema de átomo de dos niveles desde otra representación que resulta más adecuada para la resolución del sistema. Esta descripción es válida cuando se está usando un solo campo cuasi-monocromático que impulsa las transiciones entre dos niveles (Berman y Malinovsky, 2010, p.32). Por tal motivo, usando las propiedades de las matrices de Pauli en particular  $\widehat{\sigma}_3$ , el operador de rotación (59) se expresa como

$$\widehat{R} = e^{-\frac{i\widehat{\sigma}_3\delta t}{\hbar}} = \begin{pmatrix} e^{-i\delta t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\delta t/2} \end{pmatrix}, \quad \widehat{R}^\dagger = e^{\frac{i\widehat{\sigma}_3\delta t}{\hbar}} = \begin{pmatrix} e^{i\delta t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta t/2} \end{pmatrix}, \quad (82)$$

entonces introduciendo (82) en (62) se encuentra el Hamiltoniano, que corresponderá a una nueva imagen conocida como *imagen de interacciones del campo*. De esta manera el Hamiltoniano se verá modificado mediante una transformación de similaridad al Hamiltoniano de interacciones, esto:

$$\begin{aligned}\widehat{H}_I &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \delta & 0 \\ 0 & -\delta \end{pmatrix} + \hbar \begin{pmatrix} e^{-i\delta t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\delta t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \Omega_{12}^* e^{-i\delta t} \\ \Omega_{21} e^{i\delta t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\delta t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta t/2} \end{pmatrix}, \\ \widehat{H}_I &= -\hbar \begin{pmatrix} \frac{\delta}{2} & \Omega_{12}^* \\ \Omega_{21} & -\frac{\delta}{2} \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (83)$$

Por último, para determinar las ecuaciones de movimiento correspondientes es preciso escribir el vector de estado  $|\tilde{\psi}_I\rangle$  en términos de sus coeficientes  $\tilde{c}_{n,\alpha}$

$$\begin{aligned}|\tilde{\psi}_I\rangle &= \begin{pmatrix} e^{-i\omega_L t/2} \tilde{c}_1 \\ e^{i\omega_L t/2} \tilde{c}_2 \end{pmatrix}, \\ i\hbar \dot{\tilde{c}}_{n,\alpha} &= -\hbar \begin{pmatrix} \frac{\delta}{2} & \Omega_{12}^* \\ \Omega_{21} & -\frac{\delta}{2} \end{pmatrix} \tilde{c}_{n,\alpha}\end{aligned}\quad (84)$$

de esta manera

$$\dot{\tilde{c}}_1 = \frac{\delta}{2} \tilde{c}_1 - \Omega_{12}^* \tilde{c}_2, \quad (85)$$

$$\dot{\tilde{c}}_2 = -\Omega_{21} \tilde{c}_1 + \frac{\delta}{2} \tilde{c}_2, \quad (86)$$

las cuales a diferencia de las ecuaciones (78) y (81), son ecuaciones con características algebraicas.

### 1.5.5. Matriz densidad

La matriz densidad corresponde a una de las formulaciones de la mecánica cuántica de un sistema de dos niveles (Haar, 1961, p. 305). Es un esquema que incluye mezcla de estados cuánticos, de manera general clasificados como estados puros y estados mixtos (mezcla de estados puros). Esta representación de los estados cuánticos es una forma general, que permite describir correctamente varias de las propiedades observables de un sistema que se encuentra en un ensamble mecánico-cuántico (Haar, 1961, p. 306).

En esta sección se generaliza el estudio del sistema de dos niveles para incluir ciertos procesos suscitados durante la interacción de radiación con la materia como: el decaimiento espontáneo y las colisiones atómicas. Además, se debe tomar en cuenta, que, hasta el momento, no es posible conocer el vector de estado del sistema, sino las probabilidades clásicas de tener varios posibles vectores de estado. Tales situaciones son descritas por el operador de matriz densidad,  $\hat{\rho}_S$ , que corresponde a la suma de las proyecciones  $|\psi_S(t)\rangle\langle\psi_S(t)|$  en los posibles vectores de estado (Meystre y Sargent, 2007, p.93).

### 1.5.5.1. Matriz densidad para un átomo

Para este análisis se parte de una noción postulada en la mecánica cuántica en la que es posible hallar el valor esperado de un operador Hermitiano arbitrario  $\hat{\Omega}_S$  (el cual puede ser un observable, esto es  $\hat{\Omega}_S = \hat{\Omega}_S^\dagger$ ), a partir de un vector de estado  $|\psi_S(t)\rangle$  general. Usando la imagen de Schrödinger, se puede calcular el valor esperado como la acción del operador  $\hat{\Omega}_S$  en el espacio de los bras y kets, el cual está dado por

$$\langle \psi_S(t) | \hat{\Omega}_S | \psi_S(t) \rangle = \sum_{n,m,\alpha,\beta} \langle \psi_S(t) | m, \beta \rangle \langle m, \beta | \hat{\Omega}_S | n, \alpha \rangle \langle n, \alpha | \psi_S(t) \rangle = \sum_{n,m,\alpha,\beta} a_{n,\alpha} a_{m,\beta}^* \Omega_{m,\beta,n,\alpha}^{(S)},$$

donde  $\Omega_{m,\beta,n,\alpha}^{(S)}$  es el elemento de matriz del operador  $\hat{\Omega}_S$  en la imagen de Schrödinger.

Además, para el caso del átomo de dos niveles las proyecciones  $|\psi_S(t)\rangle\langle\psi_S(t)|$  usadas en el formalismo del operador de matriz densidad involucran combinaciones bilineales de las amplitudes de probabilidad, como son  $a_{n,\alpha} a_{m,\beta}^*$  (Meystre y Sargent, 2007, p.93). Así, el operador de matriz densidad cumple el criterio de bi-linealidad mediante:

$$\hat{\rho}_S = |\psi_S(t)\rangle\langle\psi_S(t)|, \quad (87)$$

donde el elemento de matriz esta dado por

$$\langle n, \alpha | \hat{\rho}_S | m, \beta \rangle = \langle n, \alpha | \psi_S(t) \rangle \langle \psi_S(t) | m, \beta \rangle = a_{n,\alpha} a_{m,\beta}^* \equiv \rho_{n,\alpha;m,\beta}^{(S)}, \quad (88)$$

entonces

$$\langle \psi_S(t) | \hat{\Omega}_S | \psi_S(t) \rangle = \rho_{n,\alpha;m,\beta}^{(S)} \Omega_{m,\beta,n,\alpha}^{(S)} = Tr[\hat{\rho}_S \hat{\Omega}_S], \quad (89)$$

donde el símbolo  $Tr$  representa la traza (Grossman, 1994, p.51), la cual es la suma de los elementos de la diagonal del producto de operadores  $\hat{\rho}_S \hat{\Omega}_S$  y cumple las siguientes propiedades para operadores matriciales  $n \times n$  (Grossman, 1994, p.72):

- Es lineal para la suma

$$Tr[\hat{\Omega}_1 + \hat{\Omega}_2] = Tr[\hat{\Omega}_2] + Tr[\hat{\Omega}_1]$$

- El producto por un escalar

$$Tr[\lambda \hat{\Omega}_1] = \lambda Tr[\hat{\Omega}_1]$$

- Es cíclica

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\hat{\Omega}_1 \hat{\Omega}_2] &= \text{Tr}[\hat{\Omega}_2 \hat{\Omega}_1] \\ \text{Tr}[\hat{\Omega}_1 \hat{\Omega}_2 \hat{\Omega}_3] &= \text{Tr}[\hat{\Omega}_3 \hat{\Omega}_2 \hat{\Omega}_1] = \text{Tr}[\hat{\Omega}_2 \hat{\Omega}_3 \hat{\Omega}_1] \end{aligned}$$

- Invariante ante transformaciones de similitud o cambios de base

$$\text{Tr}[\hat{U}_0^\dagger \hat{\Omega}_1 \hat{U}_0] = \text{Tr}[\hat{\Omega}_1 \hat{U}_0 \hat{U}_0^\dagger] = \text{Tr}[\hat{\Omega}_1]$$

A partir de (88) se sabe que  $a_{n,\alpha}$  es un vector columna y  $a_{m,\beta}^*$  es un vector fila

$$a_{n,\alpha} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad a_{m,\beta}^* = (a_1^* \quad a_2^* \quad \dots),$$

entonces

$$\rho_{n,\alpha;m,\beta}^{(S)} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} (a_1^* \quad a_2^* \quad \dots) = \begin{pmatrix} |a_1|^2 & a_1 a_2^* & \dots \\ a_2 a_1^* & |a_2|^2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

El operador de matriz densidad es un operador idempotente siempre que

$$\hat{\rho}_S^2 = |\psi_S(t)\rangle\langle\psi_S(t)|\psi_S(t)\rangle\langle\psi_S(t)| = |\psi_S(t)\rangle\langle\psi_S(t)| = \hat{\rho}_S.$$

Para describir la evolución de la matriz densidad (88) se toma la derivada temporal

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{n,\alpha;m,\beta}^{(S)} &= i\hbar \frac{da_{n,\alpha}}{dt} a_{m,\beta}^* + i\hbar a_{n,\alpha} \frac{da_{m,\beta}^*}{dt} = H_{n,\alpha;p,\gamma}^{(S)} \rho_{p,\gamma;m,\beta}^{(S)} - \rho_{n,\alpha;p,\gamma}^{(S)} H_{p,\gamma;m,\beta}^{(S)}, \\ i\hbar \frac{d\hat{\rho}_S}{dt} &= [\hat{H}_S, \hat{\rho}_S]. \end{aligned} \tag{90}$$

esta es la *ecuación de Liouville* para la matriz densidad (Auzinsh, Budker y Rochester, 2010, p.93). Describe la evolución de sistema cuánticos, cuyas interacciones están descritas mediante los principios del Hamiltoniano.

Por consiguiente, para el estudio del átomo de dos niveles que interactúa con un campo óptico se toma el Hamiltoniano en la imagen de Schrödinger (76) y se introduce en la ecuación de Liouville (90)

$$\begin{aligned} i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\rho}_{11}^{(S)} & \dot{\rho}_{12}^{(S)} \\ \dot{\rho}_{21}^{(S)} & \dot{\rho}_{22}^{(S)} \end{pmatrix} &= -\hbar \begin{pmatrix} \frac{\omega_{12}}{2} & \Omega_{12}^* e^{i\omega_L t} \\ \Omega_{21} e^{-i\omega_L t} & -\frac{\omega_{12}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11}^{(S)} & \rho_{12}^{(S)} \\ \rho_{21}^{(S)} & \rho_{22}^{(S)} \end{pmatrix} \\ &+ \hbar \begin{pmatrix} \rho_{11}^{(S)} & \rho_{12}^{(S)} \\ \rho_{21}^{(S)} & \rho_{22}^{(S)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\omega_{12}}{2} & \Omega_{12}^* e^{i\omega_L t} \\ \Omega_{21} e^{-i\omega_L t} & -\frac{\omega_{12}}{2} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

en consecuencia, las ecuaciones dinámicas en términos de la matriz densidad son

$$\dot{\rho}_{11}^{(S)} = -i\rho_{12}^{(S)} \Omega_{21} e^{-i\omega_L t} + i\rho_{21}^{(S)} \Omega_{12}^* e^{i\omega_L t},$$

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_{22}^{(S)} &= -i\rho_{21}^{(S)}\Omega_{12}^*e^{i\omega_L t} + i\rho_{12}^{(S)}\Omega_{21}e^{-i\omega_L t}, \\
\dot{\rho}_{12}^{(S)} &= i\omega_{12}\rho_{12}^{(S)} - i\Omega_{12}^*e^{i\omega_L t} [\rho_{11}^{(S)} - \rho_{22}^{(S)}], \\
\dot{\rho}_{21}^{(S)} &= -i\omega_{12}\rho_{21}^{(S)} + i\Omega_{21}e^{-i\omega_L t} [\rho_{11}^{(S)} - \rho_{22}^{(S)}],
\end{aligned}$$

donde los elementos de la diagonal  $\rho_{11}^{(S)}$  y  $\rho_{22}^{(S)}$  representan la probabilidad del sistema de encontrarse en el estado base y el estado excitado, respectivamente. Los elementos fuera de la diagonal  $\rho_{12}^{(S)}$  y  $\rho_{21}^{(S)}$  representan la coherencia intrínseca de la superposición de estados (Levenson, 1982, p. 39). Desde otro punto de vista, para el caso de imagen de la interacción, se hace un análisis similar a la imagen de Schrödinger, entonces

$$\langle \psi_I(t) | \hat{\Omega}_I | \psi_I(t) \rangle = \sum_{n,m,\alpha,\beta} \langle n, \alpha | \psi_I(t) \rangle \langle \psi_I(t) | m, \beta \rangle \langle m, \beta | \hat{\Omega}_I | n, \alpha \rangle \sum_{n,m,\alpha,\beta} \langle n, \alpha | \hat{\rho}_I | m, \beta \rangle \Omega_{m,\beta,n,\alpha}^{(I)},$$

donde  $\Omega_{m,\beta,n,\alpha}^{(I)}$  es el elemento del operador  $\hat{\Omega}_I$  en la imagen de interacciones y  $\hat{\rho}_I = |\psi_I\rangle\langle\psi_I|$ . De esta manera,

$$\begin{aligned}
\langle n, \alpha | \hat{\rho}_I | m, \beta \rangle &= \langle n, \alpha | e^{\frac{iE_n t}{\hbar}} \hat{\rho}_S e^{-\frac{iE_m t}{\hbar}} | m, \beta \rangle = e^{-i\omega_{mn} t} \rho_{n,\alpha;m,\beta}^{(S)} = c_{n,\alpha} c_{m,\beta}^* \\
&\equiv \rho_{n,\alpha;m,\beta}^{(I)},
\end{aligned} \tag{91}$$

en el cual  $\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$  es la frecuencia de transición (56). Entonces, partiendo de la relación (91), la matriz de densidad en términos de la ecuación de Liouville para esta representación se expresa como

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{n,\alpha;m,\beta}^{(I)} &= i\hbar \frac{dc_{n,\alpha}}{dt} c_{m,\beta}^* + i\hbar c_{n,\alpha} \frac{dc_{m,\beta}^*}{dt} = W_{n,\alpha;p,\gamma}^{(I)} \rho^{(I)} - c_{n,\alpha} c_{p,\gamma}^* W_{p,\gamma;m,\beta}^{(I)}, \\
i\hbar \frac{d\hat{\rho}_I}{dt} &= [\widehat{W}_I, \hat{\rho}_I].
\end{aligned} \tag{92}$$

Por lo tanto, tomando el Hamiltoniano perturbado (78) e introduciendo en (92)

$$\begin{aligned}
i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\rho}_{11}^{(I)} & \dot{\rho}_{12}^{(I)} \\ \dot{\rho}_{21}^{(I)} & \dot{\rho}_{22}^{(I)} \end{pmatrix} &= -\hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega_{12}^* e^{-i\delta t} \\ \Omega_{21} e^{i\delta t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11}^{(I)} & \rho_{12}^{(I)} \\ \rho_{21}^{(I)} & \rho_{22}^{(I)} \end{pmatrix} \\
&\quad + \hbar \begin{pmatrix} \rho_{11}^{(I)} & \rho_{12}^{(I)} \\ \rho_{21}^{(I)} & \rho_{22}^{(I)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \Omega_{12}^* e^{-i\delta t} \\ \Omega_{21} e^{i\delta t} & 0 \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

que conlleva a obtener las ecuaciones dinámicas del sistema

$$\dot{\rho}_{11}^{(I)} = -i\rho_{12}^{(I)}\Omega_{21}e^{i\delta t} + i\rho_{21}^{(I)}\Omega_{12}^*e^{-i\delta t}, \tag{93}$$

$$\dot{\rho}_{22}^{(I)} = -i\rho_{21}^{(I)}\Omega_{12}^*e^{-i\delta t} + i\rho_{12}^{(I)}\Omega_{21}e^{i\delta t}, \tag{94}$$

$$\dot{\rho}_{12}^{(I)} = -i\Omega_{12}^*e^{-i\delta t} [\rho_{11}^{(I)} - \rho_{22}^{(I)}], \tag{95}$$

$$\dot{\rho}_{21}^{(I)} = i\Omega_{21}e^{i\delta t} [\rho_{11}^{(I)} - \rho_{22}^{(I)}]. \tag{96}$$

Finalmente, para la imagen de interacción del campo en función de la matriz densidad se parte de la ecuación dinámica similar a (61)

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_I}{\partial t} = (\hat{R}^\dagger \hat{\rho}_I \hat{R}) = i\hbar \frac{\partial \hat{R}}{\partial t} \hat{\rho}_I \hat{R} + i\hbar \hat{R}^\dagger \frac{\partial \hat{\rho}_I}{\partial t} \hat{R} + i\hbar \hat{R}^\dagger \hat{\rho}_I \frac{\partial \hat{R}}{\partial t} = [\hat{W}_I, \hat{\rho}_I] - \frac{\hbar\delta}{2} [\hat{\sigma}_z, \hat{\rho}_I] \quad (97)$$

de esta manera, resolviendo (97) se tiene

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\tilde{\rho}}_{11}^{(I)} & \dot{\tilde{\rho}}_{12}^{(I)} \\ \dot{\tilde{\rho}}_{21}^{(I)} & \dot{\tilde{\rho}}_{22}^{(I)} \end{pmatrix} = -\hbar \left[ \begin{pmatrix} 0 & \Omega_{12}^* \\ \Omega_{21} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_{11}^{(I)} & \tilde{\rho}_{12}^{(I)} \\ \tilde{\rho}_{21}^{(I)} & \tilde{\rho}_{22}^{(I)} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_{11}^{(I)} & \tilde{\rho}_{12}^{(I)} \\ \tilde{\rho}_{21}^{(I)} & \tilde{\rho}_{22}^{(I)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \Omega_{12}^* \\ \Omega_{21} & 0 \end{pmatrix} \right] \\ - \frac{\hbar\delta}{2} \left[ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_{11}^{(I)} & \tilde{\rho}_{12}^{(I)} \\ \tilde{\rho}_{21}^{(I)} & \tilde{\rho}_{22}^{(I)} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_{11}^{(I)} & \tilde{\rho}_{12}^{(I)} \\ \tilde{\rho}_{21}^{(I)} & \tilde{\rho}_{22}^{(I)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right],$$

así

$$\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{(I)} = -i\tilde{\rho}_{12}^{(I)}\Omega_{21} + i\tilde{\rho}_{21}^{(I)}\Omega_{12}^*, \quad (98)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{22}^{(I)} = i\tilde{\rho}_{12}^{(I)}\Omega_{21} - i\tilde{\rho}_{21}^{(I)}\Omega_{12}^*, \quad (99)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{12}^{(I)} = i\delta\tilde{\rho}_{12}^{(I)} + i\Omega_{12}^* [\tilde{\rho}_{22}^{(I)} + \tilde{\rho}_{11}^{(I)}], \quad (100)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{21}^{(I)} = -i\delta\tilde{\rho}_{12}^{(I)} - i\Omega_{21} [\tilde{\rho}_{22}^{(I)} + \tilde{\rho}_{11}^{(I)}]. \quad (101)$$

Ahora, si se considera un átomo que interactúa con un segundo sistema, como un baño térmico, existen efectos específicos a ser considerados como: la emisión espontánea y las colisiones atómicas (Berman y Malinovsky, 2010, pp.60-61). Para el caso de la emisión espontánea se adiciona términos en las ecuaciones dinámicas de matriz densidad para un átomo, ya sea en la imagen de Schrödinger, interacción o interacción del campo. Pero, es conveniente introducir estos términos en las ecuaciones dinámicas para la imagen de interacción del campo, porque además de simplificar el cálculo, este está definido para el problema específico de átomo de dos niveles que interactúa con un campo cuasi-resonante. De tal manera que

$$\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{(I)} = \Gamma\tilde{\rho}_{22}^{(I)}, \quad \dot{\tilde{\rho}}_{12}^{(I)} = -\frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{12}^{(I)}, \\ \dot{\tilde{\rho}}_{22}^{(I)} = -\Gamma\tilde{\rho}_{22}^{(I)}, \quad \dot{\tilde{\rho}}_{21}^{(I)} = -\frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{21}^{(I)},$$

donde  $\Gamma$  representa la tasa de decaimiento del estado excitado.

Considerando el modelo simple de colisiones, en donde las colisiones causan cambios repentinos en la energía de los distintos niveles, pero no son energéticamente capaces de causar transiciones entre estados, la contribución de las colisiones está dado por

$$\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{(I)} = 0, \quad \dot{\tilde{\rho}}_{12}^{(I)} = -\Gamma_\eta\tilde{\rho}_{12}^{(I)}, \\ \dot{\tilde{\rho}}_{22}^{(I)} = 0, \quad \dot{\tilde{\rho}}_{21}^{(I)} = -\Gamma_\eta\tilde{\rho}_{21}^{(I)},$$

donde  $\Gamma_\eta$  representa la tasa de colisión.

Consecuentemente, adicionando el decaimiento espontáneo y las colisiones en las ecuaciones (98) hasta la (101) se tiene

$$\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{(I)} = -i\tilde{\rho}_{12}^{(I)}\Omega_{21} + i\tilde{\rho}_{21}^{(I)}\Omega_{12}^* + \Gamma\tilde{\rho}_{22}^{(I)}, \quad (102)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{22}^{(I)} = i\tilde{\rho}_{12}^{(I)}\Omega_{21} - i\tilde{\rho}_{21}^{(I)}\Omega_{12}^* - \Gamma\tilde{\rho}_{22}^{(I)}, \quad (103)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{12}^{(I)} = -(\gamma - i\delta)\tilde{\rho}_{12}^{(I)} + i\Omega_{12}^* [\tilde{\rho}_{22}^{(I)} + \tilde{\rho}_{11}^{(I)}], \quad (104)$$

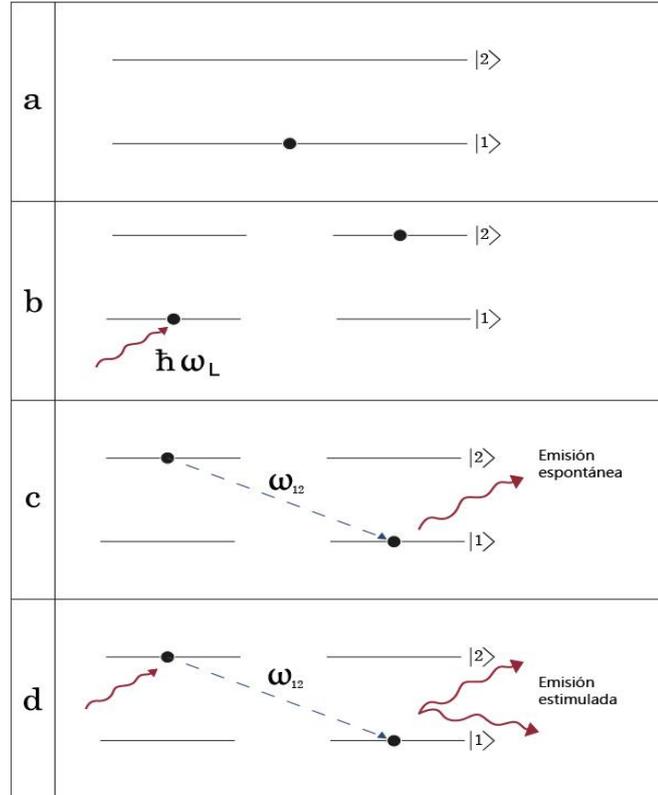
$$\dot{\tilde{\rho}}_{21}^{(I)} = -(\gamma + i\delta)\tilde{\rho}_{12}^{(I)} - i\Omega_{21} [\tilde{\rho}_{22}^{(I)} + \tilde{\rho}_{11}^{(I)}], \quad (105)$$

donde  $\gamma = \frac{\Gamma}{2} + \Gamma_\eta$  es conocida como la tasa de decaimiento por coherencia (Berman y Malinovsky, 2010, p.61).

Para recordarle al lector algunos procesos fundamentales que suscitan en este trabajo de titulación son: la absorción y emisión, tomando en cuenta que los mismos son incluidos en las ecuaciones (102)-(105), sin embargo como se detalló existen tres imágenes que permiten hacer la misma descripción, la diferencia está en que la forma de realizar los cálculos e interpretaciones se facilita más en un esquema que en otro.

En la absorción cuando un átomo interactúa con un fotón, existe la probabilidad de que el fotón se absorba produciendo una transición de un estado de menor energía a uno de mayor; para que esto ocurra la energía del fotón debe ser igual a la diferencia de energía entre los dos estados (Corney, 2006, p.272).

Para el caso de la emisión, existe dos tipos, la emisión espontánea y la emisión estimulada, ver Figura 3-1. En el primer caso el término espontáneo significa que la emisión no es provocada por ningún factor externo. Si un átomo está inicialmente en un estado excitado y no hay radiación, este decaerá naturalmente a un estado de menor energía y emitirá un fotón (Rowan, 2013, p.24). Mientras que en la emisión estimulada un fotón incidente provoca que un átomo decaiga de un estado excitado a un estado de menor energía, es decir, bajo la influencia de la radiación electromagnética, el átomo tiene la probabilidad de emitir un fotón (Rowan, 2013, p.25).



**Figure 3-1.** Procesos de interacción radiación-materia, proceso de emisión espontánea y emisión estimulada.

Realizado por: Quinllin, Sandy. 2020

#### 1.5.5.2. Matriz densidad para un ensamble

Hasta este punto se ha estudiado la matriz densidad para una sola partícula, pero si se considera un conjunto de átomos que interactúan independientemente con el campo externo y no interactúan directamente entre ellos, es posible generalizar estas ideas al estudio de matriz densidad para un conjunto de átomos ver Figura 4-1. Para ello se define

$$R(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t) = \frac{1}{N_t} \sum_j \int d^3\mathbf{R}_j d\mathbf{v}_j R^{(j)}(\mathbf{R}_j, \mathbf{v}_j, t) \delta^3(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j) \delta^3(\mathbf{v} - \mathbf{v}_j), \quad (106)$$

donde  $\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j)$  es la función delta de Dirac,  $R^{(j)}(\mathbf{R}_j, \mathbf{v}_j, t)$  corresponde a la densidad de matriz para un solo átomo  $j$  y  $N_t$  es el número total de átomos. Se ha reemplazado  $\rho$  por  $R$  para indicar que  $R^{(j)}(\mathbf{R}_j, \mathbf{v}_j, t)$  es una densidad tanto en el espacio de coordenadas como en las velocidades (Haroche y Hartmann, 1972, p. 1282). Además, Haroche y Hartmann (1972) consideran que  $R$  y  $v$  son variables clásicas, es decir, el movimiento del centro de masa atómico es tratado clásicamente. En este contexto, la matriz densidad para una sola partícula puede ser escrita como

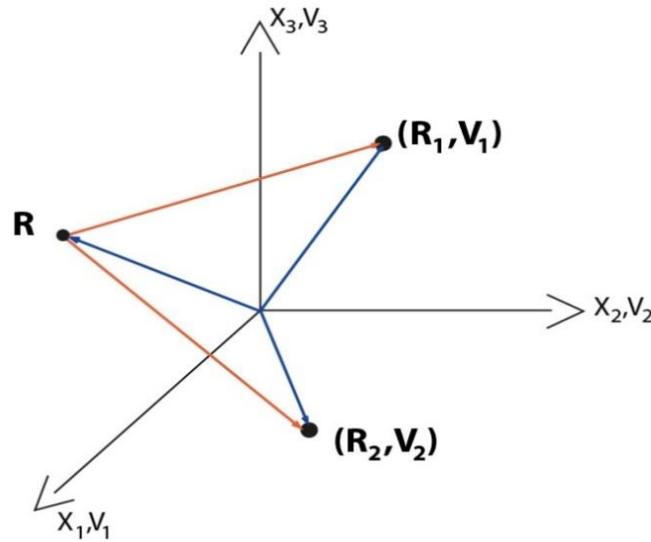
$$R^{(j)}(\mathbf{R}_j, \mathbf{v}_j, t) = \rho^{(j)}(\mathbf{R}_j, \mathbf{v}_j, t) \delta[\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_j(t)] \delta^3(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_j(t)),$$

donde  $R_j(t)$ ,  $v_j(t)$  y  $\rho^{(j)}(R_j, v_j, t)$  son la posición, velocidad y matriz densidad del átomo respectivamente (Berman y Malinovsky, 2010, p.84).

La matriz densidad (106) puede ser definida en función de la distribución de las velocidades,  $W_0(\mathbf{v})$ , que caracteriza al conjunto de átomos en ausencia de un campo aplicado

$$\rho(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t) = N(\mathbf{R})W_0(\mathbf{v})\rho(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t),$$

donde  $\rho(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t)$  es la densidad de matriz de un átomo en la posición  $\mathbf{R}$  con velocidad  $\mathbf{v}$  en un tiempo  $t$  y  $N(\mathbf{R})$  es la densidad.



**Figure 4-1.** Esquema matriz densidad para un conjunto de átomos.

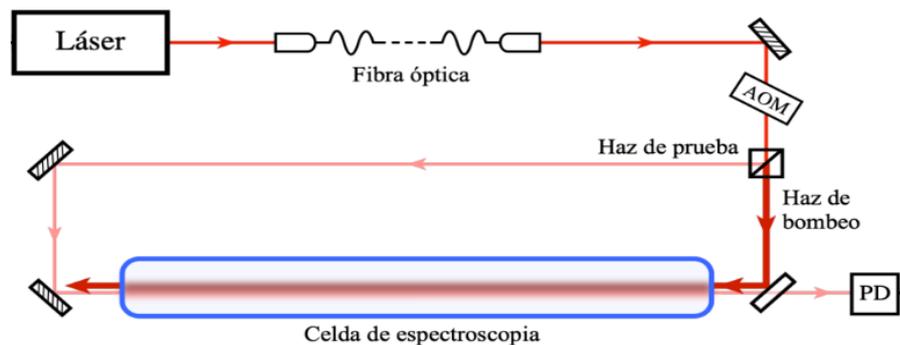
Realizado por: Quinllin Sandy, 2020

### 1.5.6. Motivación experimental de la SAS

Desde el enfoque experimental la SAS además de constituir un pilar fundamental y muy común para los experimentos con átomos fríos y ultrafríos que usan técnicas para alcanzar temperaturas del orden de micro y nano-Kelvin, respectivamente (Metcalf, J. y van der Straten, 1999, p. 99), también constituye un campo de investigación moderno y activo. Por ejemplo, (Torrance et al., 2016, p. 11396) en su estudio presentan modificaciones en el sistema óptico como en el sistema electrónico que hacen posible reducir aún más los anchos de las líneas espectrales. Por otro lado, (Hernández-Hernández et al., 2009, p. 887-891) proponen el uso de la polarización de la luz como parámetro fundamental para obtener espectros atómicos libres de efecto Doppler, mientras que (Sun et al., 2016, pp. 1-14) utilizan la fase de la luz para alcanzar el mismo fin. Adicionalmente, existen numerosos esfuerzos para implementar la espectroscopía por absorción saturada en otros sistemas atómicos y moleculares. Tal es el caso de (Vilshanskaya et al., 2018, p. 1-5) en donde se describe la

aplicación de la técnica en un vapor de Calcio, o bien, el trabajo de (Skoff et al., 2009, p. 1-11) que muestra el uso de la SAS en un gas de radicales moleculares.

Como primer paso en el entendimiento de este sistema experimental, el montaje del sistema óptico necesario para realizar la espectroscopia se muestra un esquema simplificado de la Figura 5-1. La luz proviene de un diodo láser de cavidad extendida. El haz láser inicialmente es acoplado en una fibra óptica preservadora de la polarización que llevará la luz a la región de la celda de espectroscopía. En seguida, la luz proveniente de la fibra óptica deberá pasar a través de un modulador acusto-óptico (AOM, por sus siglas en inglés *Acousto-Optic Modulator*), que permitirá controlar finamente la frecuencia de la luz láser que pasa a través de él. Posteriormente, hay un cubo divisor, que divide la luz en dos haces: un haz de prueba y haz de bombeo. Finalmente, ambos haces entran en direcciones opuestas a través de los dos extremos de la celda espectroscópica. Nótese en el esquema de la Figura 5-1 que uno de los espejos es en realidad un divisor del haz, por lo que el haz de prueba, después de haber pasado por los átomos, llega a un fotodiodo en donde es analizado. Debe notarse también que, en este punto, que los haces de prueba y bombeo son completamente contra-propagantes, por lo que la región de intersección es mucho más grande. Esto mejora significativamente la calidad de la señal de absorción.



**Figure 5-1.** Esquema simplificado de un montaje experimental para la SAS.

Realizado por: Quinlin, Sandy. 2020

## CAPÍTULO II

### 2. MARCO METODOLÓGICO

#### 2.1. Coeficientes de absorción

Cuando la luz incide sobre un vapor atómico, resulta que una población de átomos en el estado base se encuentra en el estado excitado, esto puede verse como calentamiento; el campo incidente pierde energía, y a su vez existe dispersión del fotón incidente. Es decir, el proceso de absorción consiste en la pérdida de energía del campo incidente y no un incremento en la energía del medio. (Berman y Malinovsky, 2010, p. 85). La frecuencia del campo incidente da lugar a la absorción máxima que está relacionada con la frecuencia de resonancia atómica,  $\omega_{12}$ .

Utilizando la imagen de interacción del campo es posible calcular los coeficientes de absorción,  $\alpha(\delta, \langle S \rangle)$ , de un campo óptico monocromático que incide sobre un conjunto de átomos de dos niveles. Para ello, es importante conocer como está definida la población en el estado excitado  $\tilde{\rho}_{22}^{(I)}$ . Tomando en cuenta la conservación de equilibrio de la población, es decir  $\dot{\tilde{\rho}}_{11}^{(I)} + \dot{\tilde{\rho}}_{22}^{(I)} = 0$ , de las ecuaciones de movimiento (102) y (105) se obtiene

$$\tilde{\rho}_{12}^{(I)} = \frac{i\Omega_{12}^* [\tilde{\rho}_{22}^{(I)} - \tilde{\rho}_{11}^{(I)}]}{(\gamma - i\delta)}, \quad \tilde{\rho}_{21}^{(I)} = -\frac{i\Omega_{21} [\tilde{\rho}_{22}^{(I)} - \tilde{\rho}_{11}^{(I)}]}{(\gamma + i\delta)},$$

y despejando  $\tilde{\rho}_{22}^{(I)}$  de (103) se tiene

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{22}^{(I)} &= \frac{i}{\Gamma} \left[ \frac{i\Omega_{12}^* \Omega_{21} [2\tilde{\rho}_{22}^{(I)} - 1]}{(\gamma + i\delta)} + \frac{i\Omega_{21} \Omega_{12}^* [2\tilde{\rho}_{22}^{(I)} - 1]}{(\gamma - i\delta)} \right], \\ &= -\frac{|\Omega_{21}|^2}{\Gamma} \left[ \frac{2\gamma}{(\gamma^2 + \delta^2)} \right] [2\tilde{\rho}_{22}^{(I)} - 1], \\ &= \frac{2\gamma |\Omega_{21}|^2}{\Gamma(\gamma^2 + \delta^2) + 4\gamma |\Omega_{21}|^2} = \frac{\frac{2\gamma}{\Gamma} |\Omega_{21}|^2}{\gamma^2 + \delta^2 + \frac{4\gamma}{\Gamma} |\Omega_{21}|^2}. \end{aligned} \tag{107}$$

Tomando la conservación de las partículas  $\tilde{\rho}_{22}^{(I)} + \tilde{\rho}_{11}^{(I)} = 1$ , entonces

$$\tilde{\rho}_{11}^{(I)} = \frac{\gamma^2 + \delta^2 + \frac{2\gamma}{\Gamma} |\Omega_{21}|^2}{\gamma^2 + \delta^2 + \frac{4\gamma}{\Gamma} |\Omega_{21}|^2},$$

por medio de la cual se identifica  $\tilde{\rho}_{22}^{(I)} \approx \tilde{\rho}_{11}^{(I)} \approx \frac{1}{2}$  que evidencia una saturación en las poblaciones en el estado  $|1\rangle$  y del estado  $|2\rangle$ , además considerando que  $\frac{4\gamma}{\Gamma} |\Omega_{21}|^2 \gg \gamma^2 + \delta^2$ , se puede reducir (106)

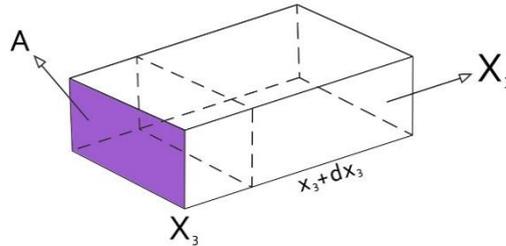
$$\tilde{\rho}_{22}^{(I)} = \frac{\frac{2\gamma}{\Gamma} |\Omega_{21}|^2}{\gamma^2 \left(1 + \frac{4}{\Gamma\gamma} |\Omega_{21}|^2 + \delta^2\right)} = \frac{\frac{2\gamma}{\Gamma} |\Omega_{21}|^2}{\gamma_B^2 + \delta^2}, \quad (108)$$

con

$$\gamma_B = \gamma \sqrt{1 + \frac{4}{\Gamma\gamma} |\Omega_{21}|^2},$$

que refiere a la tasa de decaimiento por ensanchamiento de potencia (Berman y Malinovsky, 2010, p.87).

Ahora, para establecer una relación entre  $\tilde{\rho}_{22}^{(I)}$  y la tasa de absorción, es necesario considerar una porción infinitesimal del medio localizado entre las posiciones  $x_3$  y  $dx_3$ , como se muestra en la Figura 6-2.



**Figure 1-2.** Porción infinitesimal del medio localizada entre las posiciones  $x_3$  y  $dx_3$ .

Realizado por: Quinllin, Sandy 2020.

en donde la tasa de pérdida de energía como resultado de la dispersión de los átomos en la porción infinitesimal está dado por (Berman y Malinovsky, 2010, p.88)

$$\frac{d\langle \varepsilon \rangle}{dt} = -N\hbar\omega_L \tilde{\rho}_{22}^{(I)} \Gamma A dx_3, \quad (109)$$

en donde  $N$  es la densidad atómica, y  $A$  es el área de la sección transversal de la lámina. Usando el vector de Poynting,  $S(x_3)$ , se puede expresar (52) como (Alonso y Finn, 1999, p.749)

$$[S(x_3 + dx_3) - S(x_3)]A = \frac{d\langle \varepsilon \rangle}{dt},$$

y utilizando (108) se obtiene

$$\frac{d\langle S \rangle}{dx_3} = -N\hbar\omega_L \tilde{\rho}_{22}^{(I)} \Gamma = -N\hbar\omega_L \frac{2\gamma|\Omega_{21}|^2}{\gamma_B^2 + \delta^2}, \quad (110)$$

ahora, expresando al vector de Poynting como  $\langle S(R, t) \rangle = \frac{1}{2}c\epsilon_0|E_0|^2$  y reescribiendo la frecuencia de Rabi en términos de este vector, se tiene

$$|\Omega_{12}|^2 = \left| \frac{\hat{\mu}_{12}E_0}{\hbar} \right|^2 = \frac{2}{c\epsilon_0} \left| \frac{\hat{\mu}_{12}}{\hbar} \right|^2 \frac{1}{2} c\epsilon_0|E_0|^2 = \frac{S(x_3)}{c} \frac{2}{\epsilon_0} \frac{|\hat{\mu}_{12}|^2}{\hbar^2},$$

entonces sustituyendo en (53)

$$\frac{d\langle S \rangle}{dx_3} = -N\hbar\omega_L \left( \frac{2\gamma}{\gamma_B^2 + \delta^2} \right) \frac{S(x_3)}{c} \frac{2|\hat{\mu}_{12}|^2}{\epsilon_0\hbar^2} = -\alpha(\delta, \gamma)\langle S \rangle,$$

donde

$$\alpha(\delta, \langle S \rangle) = \frac{2N\hbar\omega_L\gamma|\hat{\mu}_{12}|^2}{\hbar^2\epsilon_0c(\gamma_B^2 + \delta^2)} \equiv \alpha_0 \frac{\Gamma}{2\gamma} \frac{\omega_L}{\omega_{12}} \frac{\gamma^2}{(\gamma_B^2 + \delta^2)}, \quad (111)$$

identificando el coeficiente de absorción como

$$\alpha_0 = \frac{2N\omega_{12}|\hat{\mu}_{12}|^2}{\hbar\epsilon_0c\Gamma}, \quad (112)$$

siempre que  $\delta = 0$ , que refiere al límite en el que el campo se acerca a cero ( $\gamma_B = \gamma$ ) y no hay colisiones ( $\gamma = \Gamma/2$ ). Entonces el coeficiente de absorción máxima (111) en un campo débil es

$$\begin{aligned} \alpha_0(0,0) &= 4\pi \frac{2N\omega_{12}e^2|(x_3)_{1/2}|^2}{4\pi\hbar\epsilon_0c\Gamma}, \\ &= 8\pi\alpha_{FS} \frac{N\omega_{12}|(x_3)_{1/2}|^2}{\Gamma}, \end{aligned} \quad (113)$$

en donde se relaciona la estructura fina a través de  $\alpha_{FS}$  con el coeficiente de absorción. Esto muestra la relación entre los efectos de la mecánica cuántica y la estructura atómica, con efectos que se pueden medir macroscópica.

## 2.2. Inclusión del movimiento atómico

Sabiendo que los átomos dentro de un vapor están en movimiento, es fundamental analizar la influencia de dicho movimiento dentro del proceso de radiación-materia. En un ensamble donde los átomos de diferentes velocidades entran en resonancia con el campo aplicado, proceso conocido como ensanchamiento no homogéneo de la línea de absorción, en el cual, el ancho de las líneas espectrales refleja el ancho de la distribución de frecuencias resonantes en lugar de reflejar el ancho de resonancia de cada átomo individual (Levenson, 1982, p. 48), esto en contraste

con un ensanchamiento homogéneo, donde todos los átomos tienen la misma frecuencia de resonancia porque interactúan idénticamente con el campo aplicado.

En este aspecto, para la inclusión simple del movimiento atómico, dentro del marco de reposo se considera que los átomos moviéndose con velocidad  $\mathbf{v}$  exhiben una variación de resonancia cuando obedecen la siguiente relación:

$$\omega_{12} \rightarrow \omega_L - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}, \quad (114)$$

donde  $\mathbf{k} = k \cdot \mathbf{n}$  es el vector de propagación del campo. (114) corresponde a la unión entre la frecuencia atómica  $\omega_{12}$  y la frecuencia de cambio Doppler  $\omega_+ = \omega_L - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}$  (Haroche y Hartmann, 1972, p. 1284). En consecuencia, el movimiento atómico puede ser explicado reemplazando la *desintonía*  $\delta$  en función de esta nueva frecuencia, mediante la siguiente relación

$$\delta = \omega_{12} - \omega_L \rightarrow \delta(\mathbf{v}) = \delta + \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}. \quad (115)$$

Entonces, tomando en cuenta esta aproximación e introduciendo el coeficiente de absorción (111), se obtiene

$$\alpha_{SA} = \alpha_0 \left( \frac{\Gamma}{2\gamma} \right) \int \frac{W_0(\mathbf{v})\gamma^2}{\gamma_B^2 + (\delta + \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})^2} d\mathbf{v}, \quad (116)$$

en el que  $W_0(\mathbf{v})$  es la distribución de velocidades de los átomos. De esta manera, se determina que el coeficiente de absorción es un peso ponderado de los coeficientes de absorción asociados a cada velocidad de los átomos en el medio (Berman y Malinovsky, 2010, p.92). En términos de la distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann  $W_0(\mathbf{v})$  está definida por

$$W_0(\mathbf{v}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}u} e^{-(v/u)^2}, \quad (117)$$

donde  $u = \sqrt{2k_B T/m}$  es la velocidad más probable del movimiento térmico de los átomos en el gas ( $k_B$  es la constante de Boltzmann,  $T$  es la temperatura y  $m$  es la masa del átomo) (Noh, 2009, p. 1184). Por lo tanto,

$$\alpha_{SA} = \alpha_0 \left( \frac{\Gamma}{2\gamma} \right) \frac{\gamma^2}{\sqrt{\pi}u} \int \frac{e^{-(v/u)^2}}{\gamma_B^2 + (\delta + \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})^2} d\mathbf{v}.$$

Ahora, tomando la  $v_3$  a lo largo de  $k$  se obtiene

$$\alpha_{SA} = \alpha_0 \left( \frac{\Gamma}{2\gamma} \right) I \left( \frac{\gamma_B}{ku}, \frac{\delta}{ku} \right),$$

donde el perfil de absorción está dado por

$$\begin{aligned}
I\left(\frac{\gamma_B}{ku}, \frac{\delta}{ku}\right) &= \frac{\gamma_B^2}{\sqrt{\pi}u} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(v_3/u)^2}}{\gamma_B^2 + (\delta + k \cdot v_3)^2} dv_3, \\
&= \frac{\gamma^2}{\sqrt{\pi}k^2u^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\xi^2}}{\left(\frac{\gamma}{ku}\right)^2 + \left(\frac{\delta}{ku} + \frac{\xi}{ku}\right)^2} d\xi,
\end{aligned} \tag{118}$$

con  $\xi = v_3/u$ , además se ha considerado que  $\gamma_B = \gamma$ . Esta integral es una convolución de una Gaussiana con un Lorentziana y muestra que el coeficiente de absorción para un solo tipo de velocidades ( $v_3$ ) es una Lorentziana (Huang y Ling, 2003, p. 1631).

También, considerando que el ensanchamiento Doppler es mucho más largo que el ancho de línea ( $\gamma/(ku) \ll 1, |\delta|$ ), la Lorentziana en la ecuación (118) es más estrecha que la Gaussiana y es cero cuando  $\xi = -\delta/ku$  (ver Gráfico 1-), así, evaluando la Gaussiana en  $\xi = -\delta/ku$  (118) se reduce a

$$I\left(\frac{\gamma}{ku}, \frac{\delta}{ku}\right) = \frac{\gamma^2}{\sqrt{\pi}k^2u^2} e^{-\delta^2/k^2u^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\left(\frac{\gamma_B}{ku}\right)^2 + \left(\frac{\delta}{ku} + \frac{\xi}{ku}\right)^2} d\xi = \frac{\sqrt{\pi}\gamma}{ku} e^{-\delta^2/k^2u^2},$$

donde el factor  $\gamma/ku$  refleja que solo una fracción de la distribución de velocidades está excitada para un  $\delta$ , aquellos átomos tienen  $|ku + \delta| \lesssim \gamma$  que son los cambios Doppler en resonancia con el campo. Por otro lado, el perfil de línea  $\delta/ku$  es una Gaussiana tendiendo un FWHM alrededor de  $1.67 \gg \gamma/ku$  (Berman y Malinovsky, 2010, p.93). Así, como se mencionó, los átomos de diferentes velocidades entran en resonancia con el campo aplicado cuando  $\delta$  está variando, que implica un ensanchamiento no homogéneo de la absorción.

Como conclusión del presente análisis, el ensanchamiento Doppler domina el ancho espectral en la espectroscopía de un vapor térmico, permitiendo que aquellos átomos que se alejan de una fuente de luz absorban una frecuencia inferior a la absorbida por los átomos que se mueven hacia la fuente. Sin embargo, las frecuencias son las mismas dentro del marco de reposo de cada átomo. Este efecto puede ser eliminado usando un haz atómico con  $k \perp v$  mediante técnicas de espectroscopía no lineal como por ejemplo con la SAS, además éste efecto de ensanchamiento se reduce cuando hay enfriamiento del gas de átomos (Berman y Malinovsky, 2010, p.93).

### 2.3. Forma Hidrodinámica de la matriz densidad

Para esta sección se parte de las ecuaciones dinámicas definidas para la imagen de interacción, ecuaciones (93) a (96), incluyendo los términos de la tasa de decaimiento del estado excitado y la tasa de decaimiento por coherencia se tiene

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_{11}^{(I)} &= \Gamma \rho_{22}^{(I)} - i \rho_{12}^{(I)} \Omega_{21} e^{i\delta t} + i \rho_{21}^{(I)} \Omega_{12}^* e^{-i\delta t}, \\
\dot{\rho}_{22}^{(I)} &= -\Gamma \rho_{22}^{(I)} - i \rho_{21}^{(I)} \Omega_{12}^* e^{-i\delta t} + i \rho_{12}^{(I)} \Omega_{21} e^{i\delta t}, \\
\dot{\rho}_{12}^{(I)} &= -\gamma \rho_{12}^{(I)} - i \Omega_{12}^* e^{-i\delta t} [\rho_{11}^{(I)} - \rho_{22}^{(I)}], \\
\dot{\rho}_{21}^{(I)} &= -\gamma \rho_{12}^{(I)} + i \Omega_{21} e^{i\delta t} [\rho_{11}^{(I)} - \rho_{22}^{(I)}].
\end{aligned} \tag{119}$$

### 2.3.1. Generalización de la matriz densidad

Tomando en cuenta las nociones sobre matriz densidad para un ensamble descrito en la sección 1.5.5.2 el operador de matriz densidad puede ser representado como:  $\hat{\rho} \equiv \hat{\rho}(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t)$ . Por otra parte, su derivada temporal es una derivada total, y por tanto la podemos separar en términos de sus derivadas parciales dadas por

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \hat{\rho}, \tag{120}$$

suponiendo que  $\hat{\rho}$  se encuentra en la imagen de interacción y utilizando las expresiones de (119) se tiene

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho_{11}^{(I)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{11}^{(I)} &= \Gamma \rho_{22}^{(I)} - i \rho_{12}^{(I)} \Omega_{21} e^{i\delta t} + i \rho_{21}^{(I)} \Omega_{12}^* e^{-i\delta t}, \\
\frac{\partial \rho_{22}^{(I)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{22}^{(I)} &= -\Gamma \rho_{22}^{(I)} - i \rho_{21}^{(I)} \Omega_{12}^* e^{-i\delta t} + i \rho_{12}^{(I)} \Omega_{21} e^{i\delta t}, \\
\frac{\partial \rho_{12}^{(I)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{12}^{(I)} &= -\gamma \rho_{12}^{(I)} - i \Omega_{12}^* e^{-i\delta t} [\rho_{11}^{(I)} - \rho_{22}^{(I)}], \\
\frac{\partial \rho_{21}^{(I)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{21}^{(I)} &= -\gamma \rho_{12}^{(I)} + i \Omega_{21} e^{i\delta t} [\rho_{11}^{(I)} - \rho_{22}^{(I)}].
\end{aligned} \tag{121}$$

en donde se ha ganado un término dependiente de la velocidad en la ecuación de Liouville, la cual es una completa analogía con las ecuaciones hidrodinámicas clásicas (Haroche y Hartmann, 1972, p. 1283).

Por otro lado, recordando la aproximación de dipolo eléctrico (68) en donde el campo eléctrico (69) es representado de manera clásica, el cual depende de la posición  $\mathbf{R}$ , en este caso del centro de masa del sistema. En este sentido se puede reescribir

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}, t) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon}_L (E_{0L} e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{R}} e^{-i\omega_L t} + E_{0L}^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{R}} e^{i\omega_L t}), \tag{122}$$

en donde  $E_{0L}$  y  $E_{0L}^*$  son amplitudes, mientras que  $\boldsymbol{\epsilon}_L$  es el vector de polarización del campo en el cual se lo etiqueta con  $L$ . Esto permite hacer una generación para un número de campos arbitrarios, lo que a su vez admite introducir fases, frecuencias, *desintonías*, intensidades, entre otras características que facilitan incluir propiedades no-lineales de la interacción entre la luz y la

materia. De esta manera, la generalización de varios campos es posible reescribiendo el campo eléctrico como una superposición, esto es:

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}, t) = \frac{1}{2} \sum_{k=1} \epsilon_{L_k} (E_{0L_k} e^{i\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R}} e^{-i\omega_{L_k} t} + E_{0L_k}^* e^{-i\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R}} e^{i\omega_{L_k} t}). \quad (123)$$

Incluir más campos en esta descripción implica también extender las frecuencias de Rabi (71) en términos del centro de masa. Esto significa, que es posible considerar una transformación simple de la forma:

$$\Omega_{mn}(\mathbf{R}) \rightarrow \frac{\Omega_{mn}^{(L_k)}}{2} e^{i\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R}}, \quad \Omega_{mn}^{*(L_k)}(\mathbf{R}) \rightarrow \frac{\Omega_{mn}^{(L_k)*}}{2} e^{-i\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R}}, \quad (124)$$

en donde

$$\Omega_{mn}^{(L_k)} = \frac{\mu_{mn} \cdot \epsilon_{L_k}}{\hbar} E_{0L_k}, \quad \Omega_{mn}^{*(L_k)} = \frac{\mu_{mn} \cdot \epsilon_{L_k}}{\hbar} E_{0L_k}^*. \quad (125)$$

Ahora las frecuencias de Rabi dependen explícitamente de la polarización de la luz.

Por lo tanto, las ecuaciones hidrodinámicas pueden ser escritas de manera general como

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{11}^{(I)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{11}^{(I)} &= \Gamma \rho_{22}^{(I)} - \frac{i}{2} \sum_{k=1} \rho_{12}^{(I)} \Omega_{21}^{(L_k)} e^{i\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R}} e^{i\delta_{L_k} t} + \frac{i}{2} \sum_{k=1} \rho_{21}^{(I)} \Omega_{12}^{(L_k)*} e^{-i\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R}} e^{-i\delta_{L_k} t}, \\ \frac{\partial \rho_{22}^{(I)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{22}^{(I)} &= -\Gamma \rho_{22}^{(I)} - \frac{i}{2} \sum_{k=1} \rho_{21}^{(I)} \Omega_{12}^{(L_k)*} e^{-i\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R}} e^{-i\delta_{L_k} t} + \frac{i}{2} \sum_{k=1} \rho_{12}^{(I)} \Omega_{21}^{(L_k)} e^{i\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R}} e^{i\delta_{L_k} t}, \\ \frac{\partial \rho_{12}^{(I)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{12}^{(I)} &= -\gamma \rho_{12}^{(I)} - \frac{i}{2} \sum_{k=1} \Omega_{12}^{(L_k)*} e^{-i\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R}} e^{-i\delta_{L_k} t} \{ \rho_{11}^{(I)} - \rho_{22}^{(I)} \}, \\ \frac{\partial \rho_{21}^{(I)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{21}^{(I)} &= -\gamma \rho_{21}^{(I)} + \frac{i}{2} \sum_{k=1} \Omega_{21}^{(L_k)} e^{i\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R}} e^{i\delta_{L_k} t} \{ \rho_{11}^{(I)} - \rho_{22}^{(I)} \}, \end{aligned}$$

donde la *desintonía* que depende del campo de luz aplicado, está expresada como

$$\delta_{L_k} = \omega_{12} - \omega_{L_k}. \quad (126)$$

Estas ecuaciones pueden ser escritas de manera más compacta, considerando que

$$\rho_{12}^{(I)} = \rho_{21}^{(I)*}, \quad \rho_{11}^{(I)} + \rho_{22}^{(I)} = 1. \quad (127)$$

de esta manera

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho_{22}^{(I)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{22}^{(I)} &= -\Gamma \rho_{22}^{(I)} - \frac{i}{2} \sum_{k=1} \rho_{21}^{(I)} \Omega_{12}^{(Lk)*} e^{-i(\mathbf{k}_{Lk} \cdot \mathbf{R} + \delta_{Lk} t)} + \frac{i}{2} \sum_{k=1} \rho_{12}^{(I)} \Omega_{21}^{(Lk)} e^{i(\mathbf{k}_{Lk} \cdot \mathbf{R} + \delta_{Lk} t)}, \quad (128) \\
\frac{\partial \rho_{12}^{(I)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{12}^{(I)} &= -\gamma \rho_{12}^{(I)} + \frac{i}{2} \sum_{k=1} \Omega_{12}^{(Lk)*} e^{-i(\mathbf{k}_{Lk} \cdot \mathbf{R} + \delta_{Lk} t)} \{2\rho_{22}^{(I)} - 1\}.
\end{aligned}$$

Esto quiere decir que basta con conocer los elementos  $\rho_{22}^{(I)}$  y  $\rho_{12}^{(I)}$  para determinar las cuatro ecuaciones dinámicas. Como se puede ver, estas ecuaciones son claramente no lineales y por tanto tienen que ser resueltas mediante métodos aproximados.

### 2.3.2. Teoría de perturbaciones para la matriz densidad

En general, el operador de matriz densidad (120) puede ser expandido de manera aproximada a

$$\hat{\rho}(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t) = \hat{\rho}^{(0)}(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t) + \hat{\rho}^{(1)}(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t) + \hat{\rho}^{(2)}(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t) + \dots \quad (129)$$

ahora si indicamos que  $(p)$  es el  $p$ -ésimo orden de perturbación, los cuales para el elemento de matriz en la imagen de interacción (91) serán representados por los símbolos  $\rho_{mn}^{(I,p)}$ . Desde otra perspectiva, se pretende resolver las ecuaciones hidrodinámicas de manera aproximada en términos de una serie de perturbaciones en potencias de las amplitudes de los campos externos. Así, para calcular altos órdenes en la perturbación se debe entender cómo hacer una expansión en términos de las propiedades de dichos campos. Tomando en cuenta, que todos los órdenes de perturbación se encuentran relacionados, y, que los órdenes pares involucran los elementos diagonales de la matriz densidad, mientras que los órdenes impares involucran las coherencias del sistema. Finalmente, se puede encontrar una forma recurrente para las ecuaciones en (128)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho_{22}^{(I,p)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{22}^{(I,p)} &= -\Gamma \rho_{22}^{(I,p)} - \frac{i}{2} \sum_{k=1} \rho_{21}^{(I,p-1)} \Omega_{12}^{(Lk)*} e^{-i(\mathbf{k}_{Lk} \cdot \mathbf{R} + \delta_{Lk} t)} + \frac{i}{2} \sum_{k=1} \rho_{12}^{(I,p-1)} \Omega_{21}^{(Lk)} e^{i(\mathbf{k}_{Lk} \cdot \mathbf{R} + \delta_{Lk} t)}, \quad (130) \\
\frac{\partial \rho_{12}^{(I,p)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{12}^{(I,p)} &= -\gamma \rho_{12}^{(I,p)} + \frac{i}{2} \sum_{k=1} \Omega_{12}^{(Lk)*} e^{-i(\mathbf{k}_{Lk} \cdot \mathbf{R} + \delta_{Lk} t)} \{2\rho_{22}^{(I,p-1)} - 1\},
\end{aligned}$$

las cuales relacionan todos los órdenes de perturbación en forma «iterativa».

Si es necesario poner más de un campo, por ejemplo  $N$ -campos electromagnéticos, con diferentes valores de frecuencia y vectores de onda los cuales son etiquetados como  $L_j$ . Esta generalización permite escribir las ecuaciones de (130) en una forma más general, esto es:

$$\frac{\partial \rho_{22}^{(I,p)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{22}^{(I,p)} \quad (131)$$

$$\begin{aligned}
&= -\Gamma \rho_{22}^{(I,p)} \frac{i}{2} \sum_{j_1, j_2, \dots, j_j=1} \rho_{21}^{(I,p-1)} \Omega_{12}^{(L_j)*} f(\mathbf{k}_{L_{j_1 L_{j_2} \dots L_{j_j}}, \delta_{L_{j_1 L_{j_2} \dots L_{j_j}}}) \\
&\quad + \frac{i}{2} \sum_{j_1, j_2, \dots, j_j=1} \rho_{12}^{(I,p-1)} \Omega_{21}^{(L_j)} f(\mathbf{k}_{L_{j_1 L_{j_2} \dots L_{j_j}}, \delta_{L_{j_1 L_{j_2} \dots L_{j_j}}}), \\
\frac{\partial \rho_{12}^{(I,p)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{12}^{(I,p)} \\
&= -\gamma \rho_{12}^{(I,p)} + \frac{i}{2} \sum_{j_1, j_2, \dots, j_j=1} \Omega_{12}^{(L_j)*} f(\mathbf{k}_{L_{j_1 L_{j_2} \dots L_{j_j}}, \delta_{L_{j_1 L_{j_2} \dots L_{j_j}}}) \{2\rho_{22}^{(I,p-1)} - 1\},
\end{aligned}$$

donde  $f(\mathbf{k}_{L_{j_1 L_{j_2} \dots L_{j_j}}, \delta_{L_{j_1 L_{j_2} \dots L_{j_j}}})$  es un fase que contiene un conjunto de todas las posibles diferencias entre los vectores de onda,  $\mathbf{k}_{L_{j_1 L_{j_2} \dots L_{j_j}}$ , y además, todas las diferencias de frecuencia con respecto a la frecuencia de resonancia  $\omega_{12}$ , es decir es el conjunto de *desintonías*  $\delta_{L_{j_1 L_{j_2} \dots L_{j_j}}$ , debido a la presencia de varios campos.

- Perturbación a orden cero

Considerando que el sistema se encuentra en equilibrio, los elementos de matriz cumplen

$$\rho_{11}^{(I,0)} = 1, \quad \rho_{22}^{(I,0)} = 0, \quad \rho_{12}^{(I,0)} = 0, \quad \rho_{21}^{(I,0)} = 0,$$

Se puede decir que todos los átomos se encuentran en el estado base |1).

- Perturbación a primer orden

Para el primer orden de perturbación se va a tomar en una de las coherencias:

$$\rho_{12}^{(I,1)}(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t) = \sum_{k=1} \rho_{12}^{(I,1)}(\mathbf{v}, k) e^{-i(\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k} t)}, \quad (132)$$

de esta manera, sustituyendo (131) en la segunda ecuación dinámica de (131), se obtiene

$$\frac{\partial \rho_{12}^{(I,1)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{12}^{(I,1)} = -\gamma \rho_{12}^{(I,1)} + \frac{i}{2} \sum_{k=1} \Omega_{12}^{(L_k)*} e^{-i(\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k} t)} \{2\rho_{22}^{(I,0)} - 1\}.$$

esto permite plantear una forma de  $\rho_{12}^{(I,1)}(\mathbf{v}, k)$ , dado que en el equilibrio  $\rho_{22}^{(I,0)} = 0$ . Por esta razón:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho_{12}^{(I,1)}(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} &= \sum_{k=1} (-i\delta_{L_k}) i \rho_{12}^{(I,1)}(\mathbf{v}, k) e^{-i(\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k} t)}, \\
\mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{12}^{(I,1)}(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t) &= \sum_{k=1} (-i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{L_k}) \rho_{12}^{(I,1)}(\mathbf{v}, k) e^{-i(\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k} t)},
\end{aligned}$$

Aplicando la relación anterior en la ecuación dinámica:

$$\sum_{k=1} \left[ -i\delta_{L_k} i\rho_{12}^{(I,1)} - i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{L_k} \rho_{12}^{(I,1)} + \gamma\rho_{12}^{(I,1)} - \frac{i}{2}\Omega_{12}^{(L_k)*} \right] e^{-i(\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k} t)} = 0,$$

entonces, lo que está dentro del paréntesis tiene que ser igual a cero. Por lo tanto

$$\{\gamma - i(\delta_{L_k} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{L_k})\} \rho_{12}^{(I,1)} = \frac{i}{2}\Omega_{12}^{(L_k)*},$$

y, en consecuencia

$$\rho_{12}^{(I,1)}(\mathbf{v}, k) = \frac{i}{2} \frac{\Omega_{12}^{(L_k)*}}{\gamma - i(\delta_{L_k} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{L_k})}. \quad (133)$$

- Perturbación de segundo orden

Para este orden de perturbación es necesario un conjunto de nuevas cantidades

$$\mathbf{k}_{L_k L_j} = \mathbf{k}_{L_k} - \mathbf{k}_{L_j}, \quad \delta_{L_k L_j} = \delta_{L_k} - \delta_{L_j} = \omega_{L_k} - \omega_{L_j}. \quad (134)$$

La solución en la diagonal es

$$\rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t) = \sum_{k,j=1} \rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{v}, k, j) e^{-i(\mathbf{k}_{L_k L_j} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k L_j} t)} \quad (135)$$

así, sustituyendo (135) en la primera ecuación de (131), se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{22}^{(I,2)}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{22}^{(I,2)} + \Gamma \rho_{22}^{(I,2)} \\ = -\frac{i}{2} \sum_{k,j=1} \rho_{21}^{(I,1)} \Omega_{12}^{(L_k)*} e^{-i(\mathbf{k}_{L_k L_j} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k L_j} t)} + \frac{i}{2} \sum_{k,j=1} \rho_{12}^{(I,1)} \Omega_{21}^{(L_k)} e^{i(\mathbf{k}_{L_k L_j} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k L_j} t)}. \end{aligned}$$

Por tanto, a esta ecuación se va a resolver en dos partes, la parte antes del igual y después del igual

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{22}^{(I,2)}}{\partial t} &= \sum_{k,j=1} (-i\delta_{L_k L_j}) \rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{v}, k, j) e^{-i(\mathbf{k}_{L_k L_j} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k L_j} t)}, \\ \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{22}^{(I,2)} &= \sum_{k,j=1} (-i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{L_k L_j}) \rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{v}, k, j) e^{-i(\mathbf{k}_{L_k L_j} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k L_j} t)}, \end{aligned}$$

entonces de la parte izquierda de la ecuación se tiene

$$\sum_{k,j=1} \left\{ \Gamma - i(\delta_{L_k L_j} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{L_k L_j}) \right\} \rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{v}, k, j) e^{-i(\mathbf{k}_{L_k L_j} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k L_j} t)} = 0.$$

en la parte derecha se considera la ecuación (136), en donde  $\rho_{12}^{(I,1)}(\mathbf{v}, k) = \rho_{21}^{(I,1)*}(\mathbf{v}, k)$  y, por consiguiente, se identifica que

$$\rho_{12}^{(I,1)}(\mathbf{v}, k) = \frac{i}{2} \frac{\Omega_{12}^{(Lk)*}}{\gamma - i(\delta_{Lk} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{Lk})}, \quad \rho_{21}^{(I,1)}(\mathbf{v}, k) = -\frac{i}{2} \frac{\Omega_{12}^{(Lk)}}{\gamma + i(\delta_{Lk} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{Lk})},$$

debido a lo cual

$$\begin{aligned} & -\frac{i}{2} \sum_{k,j=1} \rho_{21}^{(I,1)} \Omega_{12}^{(Lk)*} e^{-i(\mathbf{k}_{LkLj} \cdot \mathbf{R} + \delta_{LkLj} t)} + \frac{i}{2} \sum_{k,j=1} \rho_{12}^{(I,1)} \Omega_{21}^{(Lk)} e^{i(\mathbf{k}_{LkLj} \cdot \mathbf{R} + \delta_{LkLj} t)} \\ &= \frac{1}{4} \sum_{k,j=1} \frac{\Omega_{21}^{(Lj)} \Omega_{12}^{(Lk)*} e^{i(\mathbf{k}_{Lk} \cdot \mathbf{R} + \delta_{Lk} t)}}{\gamma + i(\delta_{Lj} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{Lj})} - \frac{1}{4} \sum_{k,j=1} \frac{\Omega_{12}^{(Lj)*} \Omega_{21}^{(Lk)} e^{i(\mathbf{k}_{Lk} \cdot \mathbf{R} + \delta_{Lk} t)}}{\gamma - i(\delta_{Lj} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{Lj})}, \end{aligned}$$

conviene cambiar la sumatoria del segundo término intercambiando  $j$  por  $k$

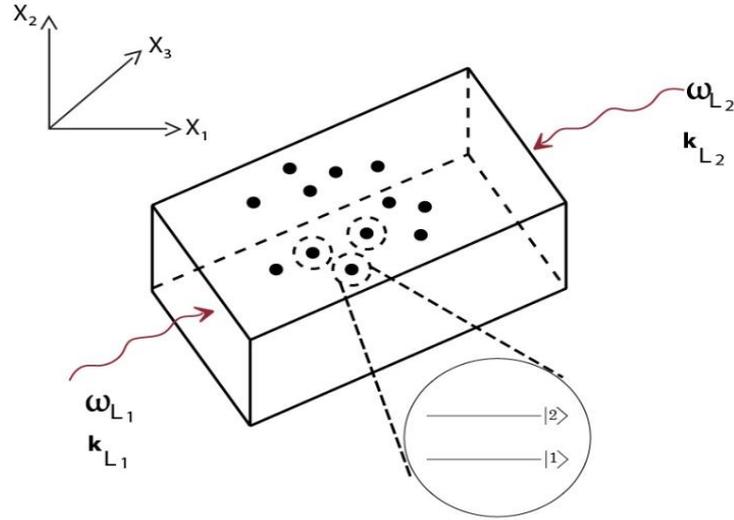
$$\begin{aligned} & -\frac{i}{2} \sum_{k,j=1} \rho_{21}^{(I,1)} \Omega_{12}^{(Lk)*} e^{-i(\mathbf{k}_{LkLj} \cdot \mathbf{R} + \delta_{LkLj} t)} + \frac{i}{2} \sum_{k,j=1} \rho_{12}^{(I,1)} \Omega_{21}^{(Lk)} e^{i(\mathbf{k}_{LkLj} \cdot \mathbf{R} + \delta_{LkLj} t)} \\ &= \frac{1}{4} \sum_{k,j=1} \frac{\Omega_{21}^{(Lj)} \Omega_{12}^{(Lk)*} e^{i(\mathbf{k}_{Lk} \cdot \mathbf{R} + \delta_{Lk} t)}}{\gamma + i(\delta_{Lj} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{Lj})} - \frac{1}{4} \sum_{k,j=1} \frac{\Omega_{12}^{(Lk)*} \Omega_{21}^{(Lj)} e^{i(\mathbf{k}_{Lj} \cdot \mathbf{R} + \delta_{Lj} t)}}{\gamma - i(\delta_{Lk} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{Lk})}, \end{aligned}$$

Finalmente, comparando las ecuaciones se obtiene

$$\begin{aligned} & \rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{v}, k, j) \\ &= \frac{1}{4} \frac{\Omega_{21}^{(Lj)} \Omega_{12}^{(Lk)*}}{\Gamma - i(\delta_{LkLj} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{LkLj})} \left\{ \frac{1}{\gamma + i(\delta_{Lj} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{Lj})} + \frac{1}{\gamma - i(\delta_{Lk} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{Lk})} \right\}. \quad (136) \end{aligned}$$

## 2.4. Absorción saturada

En el caso de la espectroscopia de absorción saturada o SAS, se consideran por simplicidad dos haces contra-propagantes, es decir dos campos electromagnéticos monocromáticos (láseres) colineales pero con direcciones contrarias. Así, y como punto de partida, el primer láser es llamado *haz de bombeo* y es etiquetado con el símbolo  $L_1$ . Además, el segundo láser llamado de *haz de prueba* puede ser etiquetado como  $L_2$ . Este esquema, no solamente corresponde a una descripción abstracta del sistema del átomo y el campo, sino que también es la forma típica de la realización experimental y de hecho es montado de manera práctica y eficiente de esta forma, la cual fue descrita en la sección 1.5.6 sobre la espectroscopía.



**Figure 2-2.** Esquema abstracto de la absorción saturada para un conjunto de átomos con dos haces contra-propagantes.

Realizado por: Quinllin, Sandy. 2020

El esquema presentado en la Figura 7-2 y que estamos interpretando mediante las ecuaciones dinámicas en (131) en la configuración de dos campos, nos permitirá hacer una descripción simplificada y detallada del sistema en consideración. Para ello, vamos a considerar y manteniendo en mente el esquema experimental, en donde se tiene un solo láser con la misma frecuencia, lo que significa que  $\omega_{L_1} = \omega_{L_2} = \omega_L$ . De manera, las *desintonías* tendrán la siguiente forma:

$$\delta = \omega_{12} - \omega_{L_1} = \delta_{L_1} = \omega_{12} - \omega_{L_2} = \delta_{L_2}, \quad (137)$$

lo que significa a su vez, que las *desintonías* son las mismas tanto para el haz de bombeo como para el haz de prueba. Por otro lado, el vector de onda puede ser considerado como:

$$\mathbf{k}_{L_1} = -\mathbf{k}_{L_2}, \quad (138)$$

esto se entiende porque las direcciones de propagación de las ondas electromagnéticas de interés son contrarias. Para simplificar el análisis,  $\mathbf{k}_L$  representará el vector de onda y como se encuentran en direcciones contra-propagantes, las ecuaciones tan solo dependerán de los módulos del vector de onda y del signo que acompaña la dirección de la propia onda electromagnética.

Por otra parte, la composición de fases de la ecuación (131) y para el caso en particular de la diferencia de dos frecuencias idénticas, se puede expresar como:

$$\delta_{L_1 L_2} = \omega_{L_1} - \omega_{L_2} = 0. \quad (139)$$

De manera análoga, para la diferencia de vectores de onda en la ecuación (128), tenemos que:

$$\mathbf{k}_{L_1 L_2} = -\mathbf{k}_{L_2 L_1} = \mathbf{k}_{L_1} + \mathbf{k}_{L_2} = 2\mathbf{k}_L. \quad (140)$$

la cual corresponde a la suma positiva (o negativa) cuando se encuentran colineales y proporcionales a  $k_L$ . Recordemos de la sección de los coeficientes de absorción en (2.1) donde la información sobre las transiciones se encuentra ya sea dentro del elemento de matriz  $\rho_{22}$  o dentro de  $\rho_{11}$ , apenas conectados por la ecuación (127). Entonces, luego de este breve análisis de los vectores de onda y las frecuencias, se sustituye la ecuación (135) en la ecuación (136), esto es

$$\begin{aligned} \rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{R}, \mathbf{v}, t) \\ = \frac{1}{4} \sum_{k,j=1} \frac{\Omega_{21}^{(L_j)} \Omega_{12}^{(L_k)*} e^{-i(\mathbf{k}_{L_k L_j} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k L_j} t)}}{\Gamma - i(\delta_{L_k L_j} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{L_k L_j})} \left\{ \frac{1}{\gamma + i(\delta_{L_j} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{L_j})} + \frac{1}{\gamma - i(\delta_{L_k} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{L_k})} \right\}, \end{aligned}$$

y recordando las consideraciones anteriores (137-140), tenemos:

$$\rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{R}, \mathbf{v}) = \frac{1}{4} \sum_{k,j=1} \frac{\Omega_{21}^{(L_j)} \Omega_{12}^{(L_k)*} e^{-i(\mathbf{k}_{L_k L_j} \cdot \mathbf{R})}}{\Gamma - i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{L_k L_j}} \left\{ \frac{1}{\gamma + i(\delta + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{L_j})} + \frac{1}{\gamma - i(\delta + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_{L_k})} \right\}.$$

Desarrollando la sumatoria se obtienen 4 términos:

$$\begin{aligned} \rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{R}, \mathbf{v}) &= \frac{1}{4} \frac{\Omega_{21}^{(L_1)} \Omega_{12}^{(L_1)*}}{\Gamma} \left\{ \frac{1}{\gamma + i(\delta + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)} + \frac{1}{\gamma - i(\delta + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)} \right\} \\ &+ \frac{1}{4} \frac{\Omega_{21}^{(L_2)} \Omega_{12}^{(L_2)*}}{\Gamma} \left\{ \frac{1}{\gamma + i(\delta - \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)} + \frac{1}{\gamma - i(\delta - \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)} \right\} \\ &+ \frac{1}{4} \frac{\Omega_{21}^{(L_1)} \Omega_{12}^{(L_2)*} e^{-2i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{R}}}{\Gamma - 2i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L} \left\{ \frac{1}{\gamma + i(\delta - \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)} + \frac{1}{\gamma - i(\delta + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)} \right\} \\ &+ \frac{1}{4} \frac{\Omega_{21}^{(L_2)} \Omega_{12}^{(L_1)*} e^{2i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{R}}}{\Gamma + 2i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L} \left\{ \frac{1}{\gamma + i(\delta + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)} + \frac{1}{\gamma - i(\delta - \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)} \right\}, \end{aligned}$$

donde tenemos los dos primeros términos diagonales proporcionales a los productos  $\Omega_{21}^{(L_k)} \Omega_{12}^{(L_k)*}$  y los dos últimos términos proporcionales a las coherencias  $\Omega_{21}^{(L_j)} \Omega_{12}^{(L_k)*}$  con  $k \neq j$ . Reescribiendo en una forma más simplificada:

$$\begin{aligned} \rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{R}, \mathbf{v}) &= \frac{\gamma}{2\Gamma} \frac{|\Omega_{12}^{(L_1)}|^2}{\gamma^2 + (\delta + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)^2} + \frac{\gamma}{2\Gamma} \frac{|\Omega_{12}^{(L_2)}|^2}{\gamma^2 + (\delta - \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)^2} \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\Omega_{21}^{(L_1)} \Omega_{12}^{(L_2)*} e^{-2i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{R}}}{\{\gamma + i(\delta - \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)\} \{\gamma - i(\delta + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)\} (\Gamma + 2i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)} \left\{ \frac{\gamma + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L}{\Gamma + 2i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L} \right\} \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\Omega_{21}^{(L_2)} \Omega_{12}^{(L_1)*} e^{2i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{R}}}{\{\gamma + i(\delta + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)\} \{\gamma - i(\delta - \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)\} (\Gamma - 2i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)} \left\{ \frac{\gamma - i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L}{\Gamma - 2i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L} \right\} \end{aligned}$$

Tomando la media especial sobre los elementos de matriz, se tiene

$$\left\langle \rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{v}) \right\rangle = \frac{\gamma}{2\Gamma} \frac{|\Omega_{12}^{(L_1)}|^2}{\gamma^2 + (\delta + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)^2} + \frac{\gamma}{2\Gamma} \frac{|\Omega_{12}^{(L_2)}|^2}{\gamma^2 + (\delta - \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)^2}, \quad (141)$$

esta expresión dentro del marco experimental es válida cuando  $|\Omega_{12}^{(L_1)}|^2 \gg |\Omega_{12}^{(L_2)}|^2$ , por tanto

$$\left\langle \rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{v}) \right\rangle \approx \frac{\gamma}{2\Gamma} \frac{|\Omega_{12}^{(L_1)}|^2}{\gamma^2 + (\delta + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)^2}, \quad (142)$$

ya que el haz de bombeo es siempre mucho más intenso que el haz de prueba. De hecho, la intensidad de la luz es proporcional a  $|E_{0L}|^2$  de la ecuación (123), es decir proporcional a la amplitud de la luz, que en este caso se encuentra escrito de manera implícita dentro de la frecuencia de Rabi.

Como sabemos la SAS tiene un origen netamente experimental, y desde luego el análisis de las poblaciones debe corresponder con los espectros. Como ya fue mencionado en la sección de la inclusión del movimiento atómico, la media espacial  $\left\langle \rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{v}) \right\rangle$  está relacionada con el llamado coeficiente de absorción que es proporcional a la intensidad y a la distribución de velocidades del gas. Como es natural, dicho coeficiente corresponderá a la convolución de la Lorentziana de la ecuación (138) y la distribución de Maxwell-Boltzmann en (116), integrando sobre las posiciones tenemos:

$$R_{22}(\mathbf{v}) = \int d^3R \rho_{22}(\mathbf{R}, \mathbf{v}) = W_0(\mathbf{v}) \left\langle \rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{v}) \right\rangle, \quad (143)$$

en donde la información sobre la población del nivel excitado es el producto de la propia distribución y el valor promedio.

En contraste, podemos hacer una conexión de la población en el estado base con la ecuación (127). De hecho, en el esquema experimental es la población del estado base el que se mide en el espectro, y la porción de átomos que se encuentran en el estado excitado se medirá usando la siguiente expresión:

$$R_{11}(\mathbf{v}) = W_0 \left[ 1 - \left\langle \rho_{22}^{(I,2)}(\mathbf{v}) \right\rangle \right], \quad (144)$$

Todo el desarrollo anteriormente descrito, es lo que se denomina en espectroscopía como *esquema de agujeros*. En donde, hay una ausencia de átomos que estarán poblando el estado excitado.

Por otra parte, si escogemos las condiciones

$$|\delta| \ll ku, \quad \gamma \ll ku, \quad (145)$$

nos encontraremos en el llamado límite Doppler.  $u$  es la velocidad más probable y es una función de la temperatura. Este límite es aquel en el que una muestra puede ser enfriada mediante técnicas de enfriamiento láser desde el punto de vista experimental. Pero que no es un fenómeno que se encuentra relacionado con las muestras de Litio en celdas calientes, ya que este límite es válido apenas para bajas presiones y temperaturas ambientes.

## 2.5. Dos niveles con estructura interna

### 2.5.1. Importancia de la estructura fina e hiperfina

Como ya fue mencionado anteriormente la estructura fina está completamente determinada, por los efectos de los acoplamientos entre el espín del electrón y el momento angular orbital (sección 1.5.1.5). Para todos los átomos hidrogenoides, en especial los alcalinos como Litio, el Sodio, el Potasio, el Rubidio y el Cesio, las reglas de suma de momento angular son como las que se mostraron en la sección 1.5.1.1 y pueden ser aplicadas directamente. Por un lado, se tiene los números cuántico de momento angular orbital son siempre números enteros positivos es  $l = 0, 1, 2, \dots$  y por otro, se toma en cuenta que el espín del electrón de valencia o el electrón más externo que se encuentra en la última capa tiene un número cuántico semi-entero, esto es  $s = \frac{1}{2}$ . La suma de momento, angular es entonces  $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ , donde  $\hat{L}$  y  $\hat{S}$  son los respectivos operadores de momento angular orbital y de espín. El resultado bajo las sumas de momento angular es que la combinación  $j$ , varía como  $|l - s| \leq j \leq l + s$ . En este sentido, es posible tomar  $l = 0$  y  $l = 1$ , como el estado base y como el primer estado excitado, respectivamente. En el estado fundamental, el cual se lo asigna  $l = 0$ , el número cuántico total es  $j = \frac{1}{2}$ , y en este caso a este estado se le llama  $^2S_{1/2}$ . Por otro lado, al primer estado excitado, es decir el que tomamos con  $l = 1$ , el número cuántico total  $j$  se rompe en dos, esto es  $j = \frac{1}{2}$  y  $j = \frac{3}{2}$ , a los cuales llamamos como  $^2P_{1/2}$  y  $^2P_{3/2}$ , respectivamente. Las transiciones del estado fundamental al primer estado excitado, esto es  $l = 0 \rightarrow l = 1$ , se conocen como líneas-D y se pueden clasificar como:

$$D_1: ^2S_{1/2} \rightarrow ^2P_{1/2}, \quad D_2: ^2S_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}.$$

Dichas transiciones usualmente las restringimos dentro de la aproximación de dipolo. El super-índice 2 en todos los estados está relacionado con la multiplicidad del espín,  $2s + 1$ .

La naturaleza completa de los isótopos hidrogenoides son determinados por el espín nuclear  $\hat{I}$ , y el acoplamiento con  $\hat{J}$  es lo que genera la estructura hiperfina, como ya fue mencionado en la sección 1.5.1.6. De esta forma, llegamos a la suma de tres momentos angulares (ver 1.5.1.2)

$$\hat{F} = \hat{I} + \hat{J} = \hat{I} + \hat{L} + \hat{S}.$$

También, como ya fue mencionado en la 1.5.2, el átomo de interés es el átomo de Litio, el cual puede ser un fermión o un bosón, como se muestra en la Tabla 1-2. El estado fundamental y el primer estado excitado con todos sus números cuánticos explícitamente son presentados en dicha tabla. En este sentido, el momento angular hiperfino estará condicionado por las reglas de suma de momento angular,  $|j - I| \leq F \leq j + I$ , con  $-F \leq m_F \leq F$ . Por tanto, siguiendo la estructura hiperfina de la sección 1.5.1.6. una buena base para este estado de momento angular total es:

$$|\xi j I F M_F\rangle,$$

en donde  $j$  está asociado a la estructura fina,  $I$  etiqueta el isótopo, y  $F M_F$  representan la estructura hiperfina. Las correcciones de la energía debido a la presencia de estos términos de corrección fueron presentadas en la ecuación (46). Esta descripción en principio es una forma general de representar un sistema de muchos niveles, en especial las transiciones del estado fundamental al primer estado excitado. En nuestro caso en particular tenemos la estructura para los isótopos de Litio (ver Figura 1-1).

**Tabla 1-2.** Estado fundamental y primer estado excitado para los isótopos de  ${}^6\text{Li}$  (fermión) y  ${}^7\text{Li}$

	$l$	$j$	$I$	$F$	$M_F$		$l$	$j$	$I$	$F$	$M_F$		
	Estado base						Estado base						
${}^6\text{Li}$	0	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$	${}^7\text{Li}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	1	$0, \pm 1$		
				$\frac{3}{2}$	$\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}$						2	$0, \pm 1, \pm 2$	
	Estado excitado						Estado excitado						
	1	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$		1	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	1	1	$0, \pm 1$	
				$\frac{3}{2}$	$\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}$						2	$0, \pm 1, \pm 2$	
	1	$\frac{3}{2}$	1	$\frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$		1	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	0	0	0	
				$\frac{3}{2}$	$\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}$						1	$0, \pm 1$	
				$\frac{5}{2}$	$\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}$						2	$0, \pm 1, \pm 2$	
											3	$0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$	

Realizado por: Quinlin, Sandy, 2020.

Como es natural, un sistema multi-electrónico y con estructura para varios niveles suele ser un problema complejo. Sin embargo, podemos estudiar las transiciones entre niveles simplificando de manera abrupta al problema a cuasi-dos niveles (lo tratamos como un sistema de dos niveles como en la sección 1.5.4), pero esta vez teniendo en cuenta las posibles degeneraciones provenientes de la presencia de los diferentes momentos angulares de espín. Hablamos de un sistema de cuasi-dos niveles porque lo tratamos para algún  $F_1$  como estado base y otro  $F_2$  como

estado excitado, sin embargo y como se ve en la Tabla 1-2 continúa siendo un sistema de muchos niveles. Esto quiere decir que, en el esquema para el átomo de cuasi-dos niveles el estado puede ser generalizado como:

$$|n, \alpha\rangle \rightarrow |\xi j I F M_F\rangle,$$

$\xi$  está relacionado con otros números cuánticos. Ahora  $\alpha$  que es la degeneración del sistema, se manifiesta de manera explícita mediante la multiplicidad del momento angular hiperfino. Entonces se puede construir la dinámica del sistema de cuasi-dos niveles, si consideremos la matriz densidad y sus elementos de manera general en la imagen de interacciones de la ecuación (91),  $\rho_{n,\alpha;m,\beta}^{(I)} = c_{n,\alpha} c_{m,\beta}^*$  en donde,  $\alpha$  y  $\beta$  indicaban las degeneraciones del sistema. Por tanto, ahora la base contiene los elementos de la estructura hiperfina, y a su vez la matriz densidad será representada de manera general como (Blum, 2012, p.72):

$$\begin{aligned} \langle \xi j_2 I F_2 M_{F_2} | \hat{\rho}_I | \xi j_1 I F_1 M_{F_1} \rangle &= \langle \xi j_2 I F_2 M_{F_2} | \psi_I(t) \rangle \langle \psi_I(t) | \xi j_1 I F_1 M_{F_1} \rangle \\ &\equiv \rho_{\xi I; j_1 j_2}^{(I)}(F_1 M_{F_1}, F_2 M_{F_2}), \end{aligned}$$

notamos que  $\xi$  y  $I$  se encuentran con valores fijos dentro de la estructura hiperfina (ver Tabla 1-2). Adicionalmente, tenemos los números cuánticos asociados al estado base etiquetados como  $F_1$  y  $M_{F_1}$  y el estado excitado con números cuánticos  $F_2$  y  $M_{F_2}$ . A modo de simplificar la notación podemos escribir los elementos de la matriz densidad como:

$$\rho_{\xi n I; j_m j_n}^{(I)}(F_m M_{F_m}, F_n M_{F_n}) \equiv \rho_{F_m M_{F_m} F_n M_{F_n}}^{(I)},$$

sin perder generalidad.

### 2.5.2. Teorema de Wigner-Eckart

El teorema de Wigner-Eckart es una de las herramientas más importantes dentro de la física atómica y ha sido ampliamente demostrado en la literatura estándar de mecánica cuántica (Zetilli, 2001, pp. 412-415). Este teorema, enuncia que cada elemento de matriz de un operador tensorial irreducible es un producto de dos factores: un coeficiente de Clebsch-Gordan y un factor que es independiente de las proyecciones conocido como: el elemento de matriz reducido. Es decir

$$\langle \xi F_2 M_{F_2} | T_{kq} | \xi F_1 M_{F_1} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2F_2 + 1}} \begin{pmatrix} F_2 & k & F_1 \\ M_{F_2} & q & M_{F_1} \end{pmatrix} \langle \xi F_2 || T_{kq} || \xi F_1 \rangle, \quad (146)$$

en donde la cantidad dentro del paréntesis representa el coeficiente de Clebsch-Gordan

$$\langle F_1 k M_{F_1} q | F_2 M_{F_2} \rangle \equiv \begin{pmatrix} F_2 & k & F_1 \\ M_{F_2} & q & M_{F_1} \end{pmatrix}. \quad (147)$$

y  $\langle \|T_{kq}\| \rangle$  es el elemento de matriz reducido del tensor  $T_{kq}$ . Los llamados tensores esféricos o tensores de Racah, son representaciones generales de operadores con características de momento angular, así como su estructura algebraica, de hecho, se puede decir que el tensor esférico de rango  $k$  contiene un conjunto de proyecciones,  $q = -k, -k + 1, \dots, k - 1, k$  o  $-k \leq q \leq k$ . Este teorema permite compactar la notación y reducir los cálculos cuando se introducen los grados de libertad internos (Schwinger, 1952, p.59).

El campo eléctrico en la descripción de la ecuación (119) y como se ha mencionado múltiples veces es de origen semi-clásico, y en general es un campo que tiene una amplitud y polarización que pertenece al cuerpo de los complejos. Como consecuencia, el vector de polarización puede escribirse en la base de un tensor esférico

$$\epsilon = \sum_{q=-1}^1 (-1)^q \epsilon_{-q\epsilon_q}. \quad (148)$$

En donde el vector de polarización es un tensor de Racah de orden  $k = 1$ , con proyecciones  $q = 0, \pm 1$  (Edmonds, 1957, p.72). Este hecho es también bastante conocido ya que la polarización de una muestra que está sometida a un campo eléctrico se puede expresar en una forma tensorial. Dicho vector es un número complejo y en general satisface la siguiente relación

$$(\epsilon_q)^* = (-1)^q \epsilon_{-q}^*, \quad (149)$$

en donde

$$\epsilon_0 \equiv n_3, \quad \epsilon_{\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \mp (n_1 \pm in_2), \quad (150)$$

$$\epsilon_0 \equiv \epsilon_3, \quad \epsilon_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\epsilon_1 \pm i\epsilon_2). \quad (151)$$

en el cual  $n_k$  y  $\epsilon_k$  son los vectores unitarios y las direcciones de polarización, respectivamente. Este hecho, introduce importantes modificaciones en la forma de las frecuencias de Rabi, en especial los elementos de matriz asociados al momento dipolar eléctrico ahora reescrito en la base de la estructura hiperfina

$$\begin{aligned} \langle \xi j_2 I F_2 M_{F_2} | \boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | \xi j_1 I F_1 M_{F_1} \rangle &= \sum_q (-1)^q \epsilon_{-q} \langle \xi j_2 I F_2 M_{F_2} | \mu_q | \xi j_1 I F_1 M_{F_1} \rangle \\ &= \langle \xi F_2 \| \boldsymbol{\mu} \| \xi F_1 \rangle \sum_q (-1)^q \epsilon_{-q} \frac{1}{\sqrt{2F_2 + 1}} \begin{pmatrix} F_2 & k & F_1 \\ M_{F_2} & q & M_{F_1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (152)$$

Entonces, usando las relaciones de la ecuación (123) las frecuencias en este esquema más general se convierten en

$$\Omega_{F_m F_n} = \frac{\langle \xi F_m \| \mu \| \xi F_n \rangle}{\sqrt{2F_2 + 1} \hbar} E_{0L}, \quad \Omega_{F_m F_n}^* = \frac{\langle \xi F_m \| \mu \| \xi F_n \rangle}{\sqrt{2F_2 + 1} \hbar} E_{0L}^*, \quad (153)$$

ahora los subíndices etiquetarán el nivel hiperfino que se está tratando y dependerán proporcionalmente al elemento de matriz reducido  $\langle \xi F_m \| \mu \| \xi F_n \rangle$  y es inversamente proporcional a la multiplicidad del estado excitado.

### 2.5.3. Forma hidrodinámica para la estructura hiperfina

Aunque las extensiones de la matriz densidad fueron introducidas para estudiar los efectos de los campos magnéticos sobre los átomos, especialmente en el contexto de la astrofísica (Belluzzi, Landi Degl'Innocenti y Trujillo, 2015, p. 3), han sido bastante útiles dentro del contexto de la física atómica, ya que nos permite tener acceso a los grados de libertad internos de los átomos. Para entender esto, es necesario tomar las formas hidrodinámicas a partir de las ecuaciones (128), y haciendo uso del teorema de Wigner-Eckart (146) y de la forma para las frecuencias de Rabi generalizadas (152), podemos plantear una ecuación para los elementos de la diagonal principal:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{F_1 M_{F_1} F_1 M'_{F_1}}^{(I)}}{\partial t} &= -\mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{F_1 M_{F_1} F_1 M'_{F_1}}^{(I)} + \sum_{M_{F_1} M'_{F_1}} \Gamma_{M_{F_1} M'_{F_1}}^{M_{F_2} M'_{F_2}} \rho_{F_1 M_{F_1} F_1 M'_{F_1}}^{(I)} \\ &\quad - \frac{i}{2} \sum_{q, M_{F_2}} \sum_{k=1} \rho_{F_2 M_{F_2} F_1 M_{F_1}}^{(I)} \Omega_{F_2 F_1}^{(L_k)*}(\epsilon_q)^* \begin{pmatrix} F_1 & 1 & F_2 \\ M_{F_1} & q & M_{F_2} \end{pmatrix} e^{-i(\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k} t)} \\ &\quad + \frac{i}{2} \sum_{q, M_{F_2}} \sum_{k=1} (-1)^q \rho_{F_1 M'_{F_1} F_2 M_{F_2}}^{(I)} \Omega_{F_1 F_2}^{(L_k)} \epsilon_{-q} \begin{pmatrix} F_1 & 1 & F_2 \\ M'_{F_1} & q & M_{F_2} \end{pmatrix} e^{i(\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k} t)}. \end{aligned} \quad (154)$$

Mientras que para el otro vamos a tener:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{F_2 M_{F_2} F_2 M'_{F_2}}^{(I)}}{\partial t} &= -\mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{F_2 M_{F_2} F_2 M'_{F_2}}^{(I)} - \sum_{M_{F_2} M'_{F_2}} \bar{\Gamma}_{M_{F_2} M'_{F_2}}^{M_{F_1} M'_{F_1}} \rho_{F_2 M_{F_2} F_2 M'_{F_2}}^{(I)} \\ &\quad + \frac{i}{2} \sum_{q, M_{F_1}} \sum_{k=1} \rho_{F_2 M_{F_2} F_1 M_{F_1}}^{(I)} \Omega_{F_2 F_1}^{(L_k)*}(\epsilon_q)^* \begin{pmatrix} F_1 & 1 & F_2 \\ M_{F_1} & q & M_{F_2} \end{pmatrix} e^{-i(\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k} t)} \\ &\quad - \frac{i}{2} \sum_{q, M_{F_1}} \sum_{k=1} (-1)^q \rho_{F_1 M_{F_1} F_2 M'_{F_2}}^{(I)} \Omega_{F_1 F_2}^{(L_k)} \epsilon_{-q} \begin{pmatrix} F_1 & 1 & F_2 \\ M_{F_1} & q & M'_{F_2} \end{pmatrix} e^{i(\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k} t)}. \end{aligned} \quad (155)$$

$\Gamma_{M_{F_1} M'_{F_1}}^{M_{F_2} M'_{F_2}}$  y  $\bar{\Gamma}_{M_{F_1} M'_{F_1}}^{M_{F_2} M'_{F_2}}$  son los anchos de decaimiento en completa analogía con la ecuación (103)

y dependerá del sistema de cuasi-dos niveles que se esté tratando, con sus correspondientes anchos naturales de decaimiento. En consecuencia, nos quedan los términos fuera de diagonal principal o coherencias, que al igual que la ecuación (126) pueden ser escritas como

$$\frac{\partial \rho_{F_1 M_{F_1} F_2 M_{F_2}}^{(I)}}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{F_1 M_{F_1} F_2 M_{F_2}}^{(I)} - \gamma \rho_{F_1 M_{F_1} F_2 M_{F_2}}^{(I)} \quad (156)$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{i}{2} \sum_{q, M'_{F_1}} \sum_{k=1} \Omega_{F_2 F_1}^{(L_k)*} (\epsilon_q)^* \rho_{F'_1 M_{F_1} F_1 M'_{F_1}}^{(I)} \begin{pmatrix} F_1 & 1 & F_2 \\ M'_{F_1} & q & M_{F_2} \end{pmatrix} e^{-i(\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k} t)} \\
& + \frac{i}{2} \sum_{q, M'_{F_2}} \sum_{k=1} \Omega_{F_2 F_1}^{(L_k)*} (\epsilon_q)^* \rho_{F_2 M'_{F_2} F_2 M_{F_2}}^{(I)} \begin{pmatrix} F_1 & 1 & F_2 \\ M_{F_1} & q & M'_{F_2} \end{pmatrix} e^{-i(\mathbf{k}_{L_k} \cdot \mathbf{R} + \delta_{L_k} t)}, \\
& \rho_{F_1 M_{F_1} F_2 M_{F_2}}^{(I)} = \left\{ \rho_{F_2 M_{F_2} F_1 M_{F_1}}^{(I)} \right\}^*.
\end{aligned} \tag{157}$$

$\gamma$  contiene también las colisiones posibles y los anchos de decaimiento, como en (102). Adicionalmente tenemos:

$$\delta_{L_k} = \omega_{F_1 F_2} - \omega_{L_k}, \tag{158}$$

que corresponde la *desintonía* del estado base y el estado excitado.

Vale la pena remarcar que la matriz densidad viene con las características típicas de un sistema de momento angular, ya que viene diagonal, pero en bloques (Blum, 2012, p.79). Es decir que el Hamiltoniano no perturbado en analogía con la ecuación (67) deberá contener todas las multiplicidades de las proyecciones, por un lado, tenemos que en la diagonal el primer bloque tendrá  $(2F_1 + 1) \times (2F_1 + 1)$  entradas, mientras que para el segundo bloque se tendrá  $(2F_2 + 1) \times (2F_2 + 1)$  entradas.

Finalmente, lo que obtenemos de manera general para la estructura hiperfina es el promedio espacial del sistema como una extensión de la ecuación (142)

$$\begin{aligned}
\left\langle \rho_{F_2 F_2}^{(I,2)}(\mathbf{v}) \right\rangle & \approx \frac{\gamma}{2} \sum_{q, M'_{F_2}, M'_{F_1}} \frac{1}{\Gamma_{M'_{F_2}, M'_{F_1}}} \begin{pmatrix} F_1 & 1 & F_2 \\ M_{F_1} & q & M_{F_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_1 & 1 & F_2 \\ M_{F_1} & q & M'_{F_2} \end{pmatrix} \frac{|\Omega_{F_1 F_2}^{(L_1)}|^2}{\gamma^2 - (\boldsymbol{\delta} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)^2} \\
& = \frac{\gamma}{2} \sum_{q, M'_{F_2}, M'_{F_1}} \frac{1}{(2F_2 + 1)^2 \hbar^2} \frac{|E_{0L}|^2}{\Gamma_{M'_{F_2}, M'_{F_1}}} \begin{pmatrix} F_1 & 1 & F_2 \\ M_{F_1} & q & M_{F_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_1 & 1 & F_2 \\ M_{F_1} & q & M'_{F_2} \end{pmatrix} \frac{|\langle \xi_{F_2} \| \mu \| \xi_{F_1} \rangle|^2}{\gamma^2 - (\boldsymbol{\delta} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L)^2},
\end{aligned} \tag{159}$$

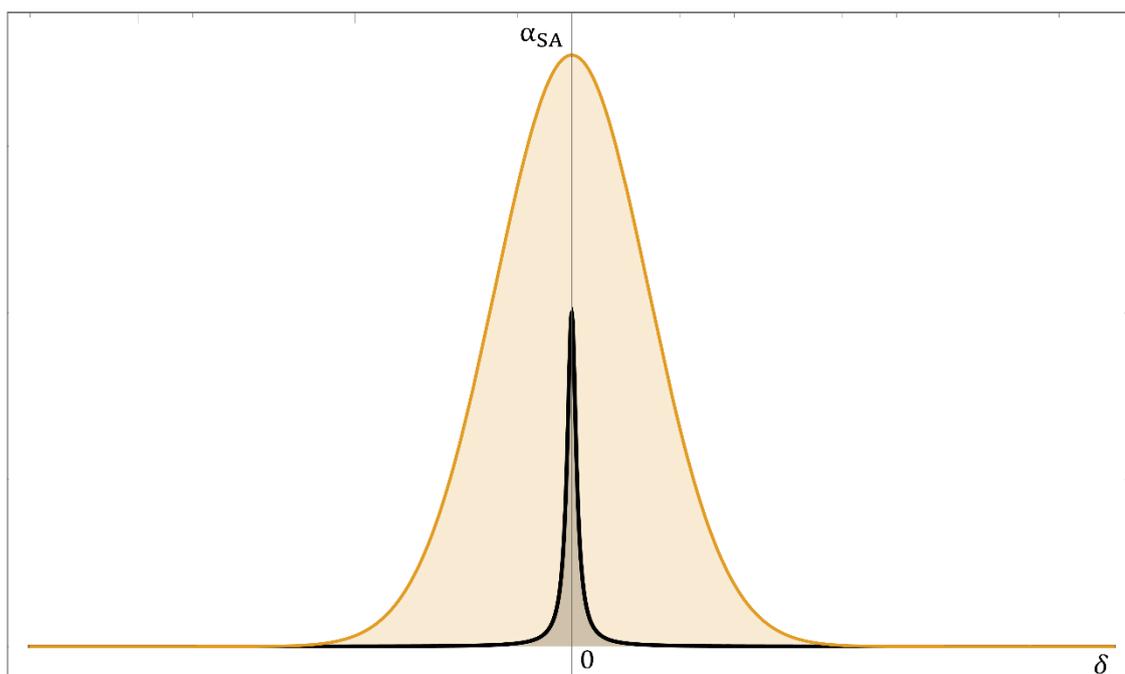
y nuevamente por analogía deberíamos tener un esquema similar al *esquema de agujeros*. Solo que ahora tienen que llevarse en cuenta todas las posibles transiciones.

## CAPÍTULO III

### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

#### 3.1. Análisis de la Espectroscopía de la Absorción Saturada

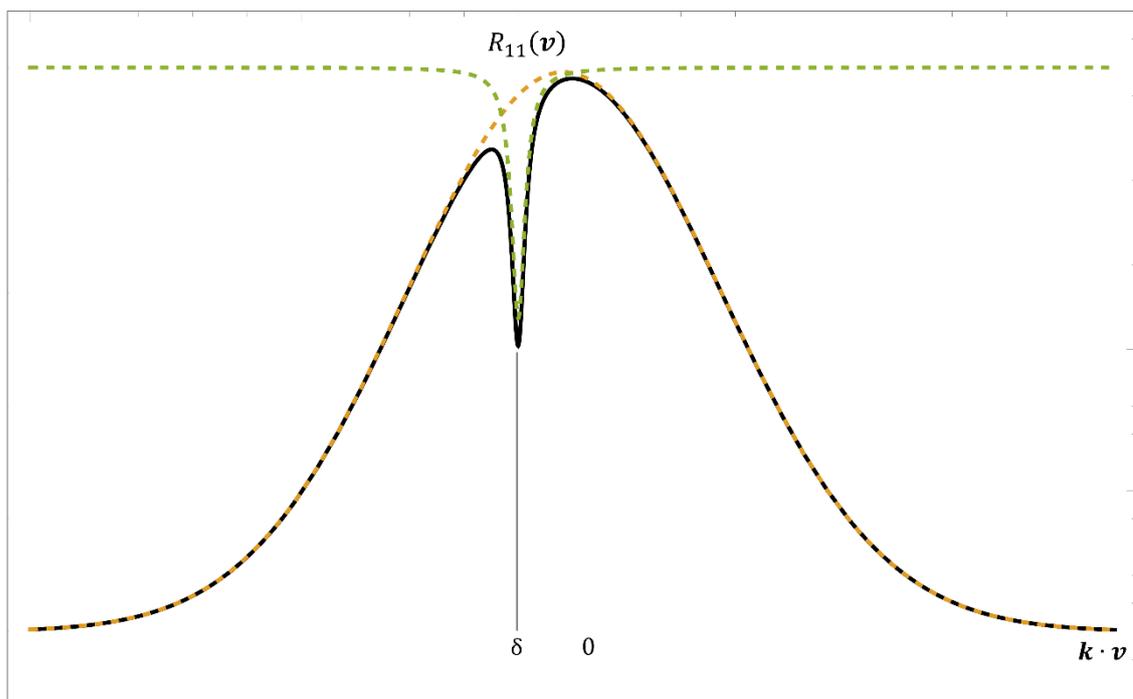
Como sabemos la necesidad de implementar la SAS nace del hecho que los átomos tienen una temperatura finita ( $T \neq 0$ ), esto quiere decir que para bajas temperaturas el comportamiento del ensamble atómico es diferente que para altas temperaturas. Como mostramos en la ecuación (111) la población del estado base en principio debería tener una distribución Lorentziana (línea negra) como se muestra en el Gráfico 1-3, cuyo ancho en principio debería ser próximo al ancho de decaimiento  $\Gamma$ . No obstante, debido a la temperatura a la que se encuentra el gas o ensamble, nos lleva a que existe una convolución de una Gaussiana con un Lorentziana como se muestra en la ecuación (117). En donde el coeficiente de absorción para un solo tipo de velocidades ( $v_3$ ) es una Lorentziana con un ancho completo a la mitad del máximo (FWHM: Full width half maximum) igual a  $2\gamma$  que está centrada en la frecuencia de cambio Doppler cuando  $\delta = -kv_3 = -ku$ . Sin embargo, el perfil de absorción es una composición de Lorentzianas individuales ponderadas con una distribución Doppler de velocidades atómicas, es decir una distribución de Maxwell-Boltzmann (116). Como consecuencia para altas temperaturas la parte dominante de la convolución será la Gaussiana (línea naranja) como se muestra en el Gráfico 1-3, enmascarando totalmente la distribución Lorentziana.



**Gráfico 1-3.** Perfil de absorción del vapor (en unidades arbitrarias) como función de la *desintonía*. Los perfiles de una Lorentziana (negro) y de una Gaussiana (naranja).

**Realizado por:** Quinllin Sandy, 2020

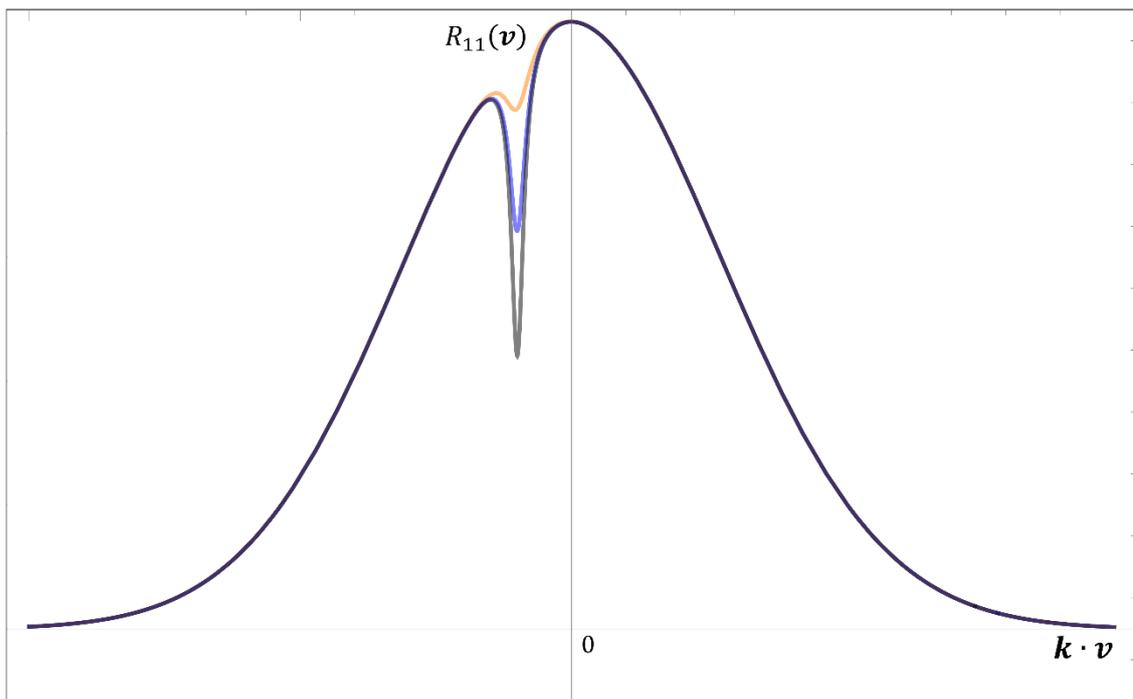
Una vez que fueron planteadas las ecuaciones hidrodinámicas para dos campos en la ecuación (131) las resolvimos usando teoría de perturbaciones a partir de la forma de (129). En el caso en particular de la SAS sólo fue necesario ir hasta segundo orden, para ver las correcciones de la población a través del elemento de matriz  $\rho_{22}$ . Como sabemos un único haz produce una distribución Gaussiana como la que se mostró en el Gráfico 1-3, nuestra referencia poblacional es siempre la población en el estado base. El Gráfico 2-3 muestra la población del estado base interactuando con un sólo haz de luz, lo que deriva en una distribución Gaussiana representada con la línea discontinua y color naranja. Sin embargo, cuando el segundo haz de luz comienza a interactuar con los mismos átomos de la muestra, una pequeña porción de estos átomos comenzará a ocupar el estado excitado y como consecuencia tendrán una distribución de Lorentziana invertida proveniente de la ecuación (142), la cual es representada en el mismo gráfico con la línea discontinua y color verde. Por lo tanto, el espectro de absorción final tendrá un déficit en la población del estado base debido a la fracción de átomos que se encuentran en el estado excitado. Este resultado corresponde a la ecuación (144) y a la línea continua negra el Gráfico 2-3. Este resultado no sólo reproduce un sistema experimental de manera cualitativa, sino que también introduce los efectos no lineales de la interacción de la luz con la materia. El centro del agujero se ubicará alrededor de la *desintonía* como se muestra en el Gráfico 2-3.



**Gráfico 2-3.** Densidad de población del estado estable como función de la velocidad en el llamado esquema de agujeros (unidades arbitrarias).

**Realizado por:** Quinlin Sandy, 2020

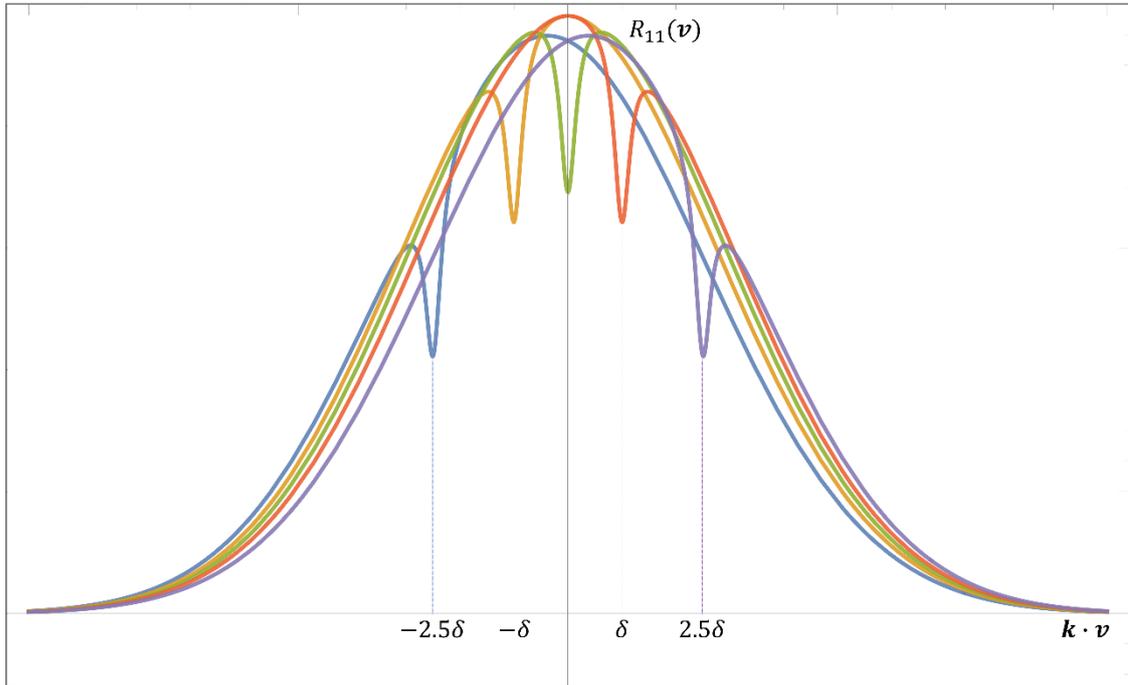
Como ya fue mencionado, las propiedades de la luz alteran notablemente el comportamiento del espectro de absorción. El Gráfico 3-3 muestra el cambio en la intensidad de la luz de bombeo, lo que indica que si aumentamos la intensidad del campo más átomos comenzarán a poblar el estado excitado. En este gráfico representamos la SAS para diferentes valores de intensidad relativa, donde la línea naranja corresponde a nuestra referencia en intensidad, la línea azul es aproximadamente 2.78 veces más intensa, y la línea gris es 4.59 aún más intensa. Los perfiles de absorción se encuentran fijos para una *desintonía* en particular. El agujero no puede aumentar indefinidamente porque tanto el ancho de decaimiento, la tasa de colisión y la frecuencia de Rabi limitan el proceso, y por tanto también tienen un máximo en Lorentziana y mínimo en la absorción.



**Gráfico 3-3.** Densidad de población del estado base en el esquema de agujeros para diferentes intensidades de la luz (unidades arbitrarias).

**Realizado por:** Quinllin Sandy, 2020

El Gráfico 4-3 se muestra el comportamiento del perfil de absorción para diferentes *desintonías*,  $-2.5\delta$ ,  $-\delta$ ,  $0$ ,  $\delta$ ,  $2.5\delta$ ; y de acuerdo con la ecuación (77) se tendrá un desplazamiento en frecuencia hacia el rojo cuando estas *desintonías* son negativas y hacia el azul cuando son positivas. Se dice que la *desintonía* se encuentra hacia rojo si la frecuencia de la luz es menor que la frecuencia de resonancia atómica, caso contrario sucede cuando se encuentra hacia el azul. En este gráfico también se evidencia como la convolución se ve modificada debido a la posición relativa de la *desintonía* dentro de la Lorentziana de la ecuación (142).



**Gráfico 4-3.** Densidad de población del estado base en el esquema de agujeros para diferentes *desintonías* (unidades arbitrarias).

**Realizado por:** Quinllin Sandy, 2020

### 3.2. Análisis de la estructura hiperfina y el átomo de Litio

Como se mencionó desde una perspectiva conceptual y práctica el problema de la espectroscopía no-lineal, requiere de un profundo análisis en los elementos de la física atómica, en especial aquella que está relacionada con la interacción de radiación-materia en átomos alcalinos. Nuestros resultados, en la sección 2.5, muestran cómo debe hacerse la extensión del sistema simplificado de dos niveles a un átomo que posee una estructura hiperfina como la del átomo de Litio. También, se visualizó el efecto de la radiación electromagnética al inducir transiciones ópticas entre los estados hiperfinos, y el papel que juega el efecto de dos campos electromagnéticos contra-propagantes en dichas transiciones.

Adicionalmente, en la sección 2.5 se mostró como debe hacerse la extensión de la matriz densidad con estructura interna (sección 2.5.1), en donde se introdujo la base correcta para dicha descripción, así como el cambio de base usando el teorema de Wigner-Eckart (sección 2.5.2). Resaltando principalmente las propiedades de la ecuación Liouville en la forma hidrodinámica en la imagen de interacciones, que permite comparar las formas funcionales de las ecuaciones (154-**(157)**) con (128), ya que estas usualmente se representan en la literatura en la imagen de Schrödinger (ver sección 1.5.3). Notemos, que la introducción de la estructura hiperfina se hace necesaria para poder describir los espectros de origen experimental.

Por otra parte, se pudo comprobar que el sistema del átomo de Litio es un sistema altamente complejo, especialmente a lo que se refiere a las transiciones de las líneas D1 y D2 para los isótopos de Litio (ver Sección 2.5.1). Sin embargo, el comportamiento cualitativo desde las ecuaciones hidrodinámicas presentadas en (154)-(157) nos inducen a pensar, de acuerdo al contexto de la SAS, que la distribución de los sub-niveles hiperfinos del estado base  $M_{F1}$  en el límite de altas temperaturas también tendrán una porción de la población en el estado excitado con sus correspondientes subniveles  $M_{F2}$ , los cuales precisamente obedecen el comportamiento Lorentziano de acuerdo a la ecuación (159). De esta manera, podemos inferir que el espectro de absorción será una convolución de múltiples Lorentzianas con una Gaussiana para una determinada velocidad promedio.

Aunque el desarrollo está inconcluso porque es un problema altamente complejo y complicado de resolver debido al gran número de ecuaciones dinámicas que tiene el sistema. Vale la pena resaltar que nuestro principal resultado son las ecuaciones (154)-(157) y establece los principios básicos para hacer una extensión hacia un cálculo numérico, con el cual podemos obtener valores cuantitativos para comparar directamente los efectos de la estructura hiperfina manifestados en el espectro de absorción del átomo de Litio.

## CONCLUSIONES

Se hizo un estudio exhaustivo de momento angular, teoría de perturbaciones, estructura fina e hiperfina haciendo un análisis detallado para átomos hidrogenoides. A partir de primeros principios, se formuló el Hamiltoniano no perturbado propuesto en la ecuación (9), en donde se estableció la escala energética inicial proporcional a la constante de estructura fina  $\alpha_{FS}^2 \simeq (1/137)^2$ . Luego se planteó una familia de perturbaciones a primer orden para diferentes escalas energéticas, la primera proporcional a  $\alpha_{FS}^4$  para la estructura fina en (23) y (25), y la segunda proporcional a  $\alpha_{FS}^6$  para la estructura hiperfina en (29) y (31). Esto demostró que para resolver la estructura hiperfina tiene que existir una precisión de 1 en  $10^{-6}$  en la espectroscopía a ser usada.

Se estudió el sistema de dos niveles usando el formalismo de matriz densidad en diferentes representaciones, entre estas, las imágenes de Schrödinger (sección 1.5.3.1), de interacciones (sección 1.5.3.2), e interacciones del campo (sección 1.5.3.3). Se escribió de manera explícita la ecuación de Liouville para cada una de las representaciones. En cada uno de los casos se estudió el Hamiltoniano de perturbaciones usando la aproximación de dipolo, además de introducir los efectos de la emisión espontánea y los efectos de las colisiones.

Se extendió el formalismo de matriz densidad para un ensamble atómico. Y mediante este, se incorporaron los efectos de la temperatura a un gas atómico que interactúa con un campo electromagnético monocromático. Además, se estudiaron las soluciones en equilibrio y los efectos de la interacción radiación-materia para determinar el coeficiente de absorción (116).

Se reescribió la ecuación de Liouville en la forma hidrodinámica (sección 2.3), y luego aplicando de teoría de perturbaciones iterativa sobre matriz densidad (sección 2.3.2), se encontraron las formas en equilibrio para la interacción del átomo con más de un campo electromagnético. Y, a partir de estos resultados se introdujeron los efectos dos campos contra-propagantes para el estudio detallado de la distribución de poblaciones en la descripción de la espectroscopía de absorción saturada. Mostrando que es posible obtener el espectro de absorción en el *esquema de agujeros* (144).

Por último, se extendió el formalismo de la matriz densidad incluyendo los efectos de la estructura hiperfina en el marco de la formulación hidrodinámica (sección 2.5.), y se hicieron los correspondientes análisis sobre la espectroscopía de absorción saturada de un gas de los isótopos de Litio. Encontrando una forma análoga pero inconclusa para la estructura hiperfina.

## RECOMENDACIONES

Hacer un análisis más detallado y cuantitativo requiere de un análisis más profundo del sistema de dos niveles, requiriendo hacer una extensión como mínimo a un sistema de tres niveles. para explicar no sólo el *esquema de agujeros*, sino que también el esquema picos, ampliamente estudiado en la fenomenología espectroscópica de los gases alcalinos (Das y Natarajan, 2007, p. 1-9). En otras palabras, se requiere hacer un estudio más detallado para sistemas más complejos.

## BIBLIOGRAFÍA

**ALONSO, M. y FINN, E.**, 1999. *Física Volumen 2: Campos y Ondas*. S.l.: Addison Wesley Longman. ISBN 9684442246.

**ASHTEKAR, A. y SCHILLING, T.A.**, 1999. Geometrical Formulation of Quantum Mechanics. *On Einstein's Path* [en línea]. New York, NY: Springer New York, pp. 23-65. Disponible en: [http://link.springer.com/10.1007/978-1-4612-1422-9\\_3](http://link.springer.com/10.1007/978-1-4612-1422-9_3).

**AUZINSH, M., BUDKER, D. y ROCHESTER, S.**, 2010. *Optically Polarized Atoms*. S.l.: Oxford University Press, USA. ISBN 9780199565122.

**BELLUZZI, L., LANDI DEGL'INNOCENTI, E. y TRUJILLO, J.**, 2015. Isotropic inelastic collisions in a multiterm atom with Hyperfine structure. *Astrophysical Journal* [en línea], vol. 812, no. 1, pp. 1-12. ISSN 15384357. DOI 10.1088/0004-637X/812/1/73. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1088/0004-637X/812/1/73>.

**BERMAN, P. y MALINOVSKY, V.**, 2010. *Principles of Laser Spectroscopy and Quantum Optics*. S.l.: Princeton University Press. ISBN 9780691140568.

**BLUM, K.**, 2012. *Density Matrix Theory and Applications*. S.l.: Springer-Verlag Berlin Heidelberg. ISBN 9783642205606.

**BORDÉ, C.; et.al.**, 1976. Saturated absorption lineshape: Calculation of the transit-time broadening by a perturbatio approach. *Physical Review A*, vol. 14, no. 1, pp. 236-263.

**BRANSDEN, B. y JOACHAIN, C.**, 1973. *Physics of Atoms and Molecules*. S.l.: Longman Publishing Group.

**CORNEY, A.**, 2006. *Atomic and Laser Spectroscopy*. S.l.: Oxford University Press. ISBN 9780199211456.

**DARRIGOL, O.; et.al.**, 2016. *Niels Bohr, 1913-2013: Poincaré Seminar 2013*. S.l.: Birkhäuser Basel. ISBN 9783319143156.

**DAS, D. y NATARAJAN, V.**, 2007. Absolute frequency measurement of the lithium D lines: Precise determination of isotope shifts and fine-structure intervals. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, vol. 75, no. 5, pp. 1-9. ISSN 10502947. DOI 10.1103/PhysRevA.75.052508.

**EDMONDS, A.**, 1957. *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. S.l.: Princeton, N.J., Princeton University Press.

**FOOT, C.J.**, 2005. *Atomic Physics*. S.l.: Oxford University Press, USA. ISBN 0198506961.

**GERRY, C. y KNIGHT, P.**, 2005. *Introductory Quantum Optics*. S.l.: Cambridge University Press. ISBN 9780521820356.

**GROSSMAN, R.**, 1994. *Instructor's Solutions Manual to accompany Elementary Linear Algebra*. S.l.: Harcourt College Publishers. ISBN 9780030973550.

**HAAR, D.**, 1961. Theory and applications of the density matrix. *Reports on Progress in Physics*, vol. 24, no. 1, pp. 304-362. ISSN 00344885. DOI 10.1088/0034-4885/24/1/307.

**HAROCHE, S. y HARTMANN, F.**, 1972. Theory of Saturated-Absorption Line Shapes. *Physical Review A*, vol. 6, no. 4, pp. 1280-1300. ISSN 10502947. DOI 10.1103/PhysRevA.6.1280.

**HERNÁNDEZ, A.; et.al.**, 2009. Polarized velocity selective spectroscopy of atomic rubidium using counterpropagating beams. *Optics Communications* [en línea], vol. 282, no. 5, pp. 887-891. ISSN 00304018. DOI 10.1016/j.optcom.2008.11.040. Disponible en: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0030401808011073>.

**HERNÁNDEZ, D.**, 2018. *Enfriamiento Doppler y sub-Doppler de un gas atómico de litio-6* [en línea]. S.l.: Universidad Nacional Autónoma de México. Disponible en: <http://132.248.9.195/ptd2018/diciembre/0783531/Index.html>.

**HUANG, X. y LING, Y.**, 2003. A Common Misunderstanding about the Voigt Line Profile. *Journal of The Atmospheric Sciences*, vol. 61, pp. 1630-1632.

**JOSHI, A. y XIAO, M.**, 2012. *Controlling Steady-State and Dynamical Properties of Atomic Optical Bistability*. S.l.: World Scientific Publishing Company. ISBN 9789814307550.

**KIM, J.; et.al.**, 2009. Strong effective saturation by optical pumping in three-level systems. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, vol. 80, no. 6, pp. 1-7. ISSN 10502947. DOI 10.1103/PhysRevA.80.063801.

**LEVENSON, M.**, 1982. *Introduction to nonlinear laser spectroscopy*. S.l.: s.n. ISBN 0124447201.

**MAGUIRE, L; et.al.**, 2006. Theoretical calculation of saturated absorption spectra for multi-level atoms. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 39, no. 12, pp. 2709-2720. ISSN 09534075. DOI 10.1088/0953-4075/39/12/007.

**MANEEKHUM, P.**, 2009. *A Study of Hyperfine Splitting in Ground State of H - atom* [en línea]. S.l.: Naresuan Universityh. Disponible en: [http://www.if.nu.ac.th/sites/default/files/bin/BS\\_thesisphatchaya.pdf](http://www.if.nu.ac.th/sites/default/files/bin/BS_thesisphatchaya.pdf).

**METCALF, J., H. y VAN DER STRATEN, P.**, 1999. *Laser Cooling and Trapping*. S.l.:

Springer. ISBN 0387988920.

**MEYSTRE, P. y SARGENT, M.**, 2007. *Elements of Quantum Optics*. S.l.: Springer. ISBN 9783540742098.

**MOON, G. y NOH, H.**, 2018. Linewidth in saturated absorption spectroscopy for two-level atoms: an empirical formula. *Applied Optics*, vol. 57, no. 14, pp. 3881-3883. ISSN 1559-128X. DOI 10.1364/ao.57.003881.

**NOH, H.**, 2009. Effect of optical pumping in saturated absorption spectroscopy : an analytic study for two-level atoms. *European Journal of Physics*, pp. 1181-1187. DOI 10.1088/0143-0807/30/5/025.

**PAULING, L. y WILSON, E.**, 1935. *Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry*. S.l.: Dover Publications. ISBN 0486648710, 9780486648712.

**ROWAN, M.**, 2013. *Doppler-Free Saturated Fluorescence Spectroscopy of Lithium Using a Stabilized Frequency Comb* by [en línea]. S.l.: Oberlin College. Disponible en: [https://etd.ohiolink.edu/!etd.send\\_file?accession=oberlin1368804208&disposition=inline](https://etd.ohiolink.edu/!etd.send_file?accession=oberlin1368804208&disposition=inline).

**SCHWINGER, J.**, 1952. *On Angular Momentum*. . S.l.: Harvard University,

**SKOFF, S.; et.al.**, 2009. Doppler-free laser spectroscopy of buffer-gas-cooled molecular radicals. *New Journal of Physics*, vol. 11, pp. 1-11. ISSN 13672630. DOI 10.1088/1367-2630/11/12/123026.

**SUN, D.; et.al.**, 2016. Modulation transfer spectroscopy in a lithium atomic vapor cell. *Optics Express*, vol. 24, no. 10, pp. 1-14. ISSN 1094-4087. DOI 10.1364/oe.24.010649.

**TORRANCE, J.; et.al.**, 2016. Sub-kilohertz laser linewidth narrowing using polarization spectroscopy. *Optics Express* [en línea], vol. 24, no. 11, pp. 11396. ISSN 1094-4087. DOI <https://doi.org/10.1364/OE.24.011396>. Disponible en: <https://www.osapublishing.org/abstract.cfm?URI=oe-24-11-11396>.

**VILSHANSKAYA, E.; et.al.**, 2018. Saturation spectroscopy of calcium atomic vapor in hot quartz cells with cold windows. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 946, no. 1, pp. 1-5. ISSN 17426596. DOI 10.1088/1742-6596/946/1/012130.

**WOLF, E.**, 2006. *Progress in Optics*. S.l.: Elsevier Science. ISBN 9780444527325.

**YUTSIS, A., LEVINSON, I. y VANAGAS, V.**, 1962. *Mathematical Apparatus o the Theory of Angular Momentum*. S.l.: Israel Program for Scientific Translations.

**ZETTILLI, N.**, 2001. *Quantum Mechanics Concepts and Applications*. S.l.: John Wiley & Sons.

ISBN 9780471489436.



**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**

**DIRECCIÓN DE BIBLIOTECAS Y RECURSOS PARA EL  
APRENDIZAJE Y LA INVESTIGACIÓN**



**UNIDAD DE PROCESOS TÉCNICOS**

**REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y  
BIBLIOGRAFÍA**

**Fecha de entrega:** 29 / 09 /2020

<b>INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)</b>
<b>Nombres – Apellidos:</b> Sandy Anael Quinllin Condo
<b>INFORMACIÓN INSTITUCIONAL</b>
<b>Facultad:</b> Ciencias
<b>Carrera:</b> Biofísica
<b>Título a optar:</b> Biofísica
<b>f. Analista de Biblioteca responsable:</b> Lic. Luis Caminos Vargas Mgs.

**LUIS  
ALBERTO  
CAMINOS  
VARGAS**

Firmado digitalmente por  
LUIS ALBERTO CAMINOS  
VARGAS  
Nombre de reconocimiento  
(DN): c=EC, l=RIOBAMBA,  
serialNumber=0602766974,  
cn=LUIS ALBERTO CAMINOS  
VARGAS  
Fecha: 2020.09.29 13:35:07  
-05'00'



0331-DBRAI-UPT-2020