



UNIVERSIDAD DE LA FRONTERA  
FACULTAD DE INGENIERÍA, CIENCIAS Y ADMINISTRACIÓN  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA



“MEJORA DE IMPLEMENTACIÓN PARA CÁLCULOS EN LA  
GENERACIÓN DE DOS FOTONES POR ENCARGO CON RUIDO  
TÉRMICO.”

---

TRABAJO PARA OPTAR AL TÍTULO  
DE INGENIERO MATEMÁTICO

---

Profesor Guía: Dr. Robert Guzmán Estrada

Alfredo Jaramillo Palma  
2012

“MEJORA DE IMPLEMENTACIÓN PARA CÁLCULOS EN LA GENERACIÓN DE DOS  
FOTONES POR ENCARGO CON RUIDO TÉRMICO.”

Alfredo Jaramillo Palma

COMISIÓN EXAMINADORA

Dr. Robert Guzmán Estrada  
Profesor Guía

Mg. Aldo Vergara Cubillos  
Profesor Examinador 1

Dr. Alejandro Omón Arancibia  
Profesor Examinador 2

Nota trabajo escrito :  
Nota examen :  
Nota final :

## RESUMEN

La emisión de fotones de manera determinística en un modo bien definido del campo electromagnético es un problema estudiado en dos corrientes de investigación de punta de la Física, a saber, Teoría Cuántica de la Comunicación y Teoría Cuántica de la Computación. A modo de ejemplo, en la primera de éstas teorías aparece el concepto de *teleportación*[15] de información entre dos personas que se comunican a gran distancia; *Criptografía Cuántica*[17], técnica que ya es utilizada para el resguardo de información. También en la segunda teoría mencionada, aparecen fenómenos como el *paralelismo cuántico*[16], que permitiría evaluar una función en varios valores de sus argumentos de manera simultánea.

En relación al problema de la emisión determinística de fotones, en el presente Trabajo de Título se mejoraron los tiempos de cálculo de una simulación de interacción entre iones atrapados y el campo electromagnético obtenidos en [5]. Para ello se resuelve la Ecuación Maestra que modela la interacción entre un ión de Calcio atrapado en una cavidad con dos modos del campo electromagnético soportados por tal cavidad, tales modos se consideran cuantizados; además el ión se considera acoplado a dos láseres de bombeo. La mejora se obtuvo en tanto se redujeron drásticamente los tiempos de cómputo y se obtuvieron programas capaces de resolver problemas más genéricos, en particular con ruido térmico en la cavidad.

Mejorar los tiempos de cálculo, era necesario para poder extender las dimensiones del problema resuelto, también se propuso realizar esto de manera dinámica, en el sentido que los algoritmos obtenidos fuesen reutilizables en la resolución de problemas de mayor dimensión o más generales en trabajos futuros.

Para mejorar los tiempos de cálculo, primero se tradujeron de manera *literal* los programas escritos en MATLAB a lenguaje FORTRAN. Posteriormente, se estudiaron los operadores involucrados en la Ecuación Maestra, observándose sus estructuras y aprovechándolas para obtener un cómputo eficiente en el sentido de una buena utilización de las capacidades computacionales disponibles.

La traducción a FORTRAN, redujo en un 70 % los tiempos de cálculo. Sin embargo, ésta mejora también está asociada a un cambio en la máquina en la cual se realizan los cálculos, siendo la utilizada anteriormente una computadora portátil común, y la segunda una de alto rendimiento. La segunda mejora mencionada y la de mayor importancia, redujo en 98 % los tiempos obtenidos debido a la traducción. Posterior a éstas mejoras, se añadieron términos de Lindblad, que dan cuenta de ruido térmico en la cavidad, al Hamiltoniano de la Ecuación Maestra. Para lo anterior fue necesario aumentar las dimensiones de los espacios de Hilbert involucrados, cuestión que no hubiese sido posible con los programas escritos en MATLAB.

A Ida y Victor.

## AGREDECIMIENTOS

Agradezco en primer lugar a mis padres, por su apoyo, confianza, respeto, en resumen, su amor; a mis amigos, en especial Miguel Navarro, por sus consejos en el presente trabajo y quien también es el autor de la estructura de este documento en  $\text{\LaTeX}$ ; a Robert Guzmán, mi profesor guía por su apoyo y paciencia; a Raúl Benavidez, Fernando Marchant, Francisco Peña, Carlos Abarzúa y Julio López, profesores que en los primeros años lograron acercarme efectivamente a la Ciencia; a Luis Sánchez, compañero de carrera con quien compartiera mis primeros años con fructíferas discusiones; finalmente agradezco al Centro de Excelencia en Modelación y Computación Científica de la Universidad de La Frontera por el acceso al servidor KUDI, plataforma donde se ejecutaron los programas obtenidos.

# Índice

<b>I Problema Físico-Matemático</b>	<b>1</b>
<b>Capítulo 1.Introducción</b>	<b>2</b>
1.1 Introducción . . . . .	2
1.2 Objetivos Generales del Trabajo de Título . . . . .	3
1.2.1 Objetivos Específicos . . . . .	3
<b>Capítulo 2.Fundamentos Físicos</b>	<b>4</b>
2.1 Ondas de Materia . . . . .	4
2.2 Teoría de Schrödinger de la Mecánica Cuántica . . . . .	5
2.3 Soluciones de la Ecuación de Schrödinger independientes del tiempo . . . . .	7
2.3.1 Estados Estacionarios . . . . .	8
2.3.2 El pozo cuadrado de paredes infinitas . . . . .	10
2.3.3 El oscilador armónico . . . . .	12
2.4 Notación de Dirac . . . . .	14
2.5 Postulados de la Mecánica Cuántica . . . . .	15
2.6 Campo electromagnético cuantizado . . . . .	17
2.7 Absorción y emisión de radiación. Emisión espontánea. . . . .	19
2.8 Ecuación Maestra para un átomo de dos niveles en equilibrio térmico . . . . .	20
<b>Capítulo 3.Modelo Estudiado</b>	<b>23</b>
3.1 El Ión $Ca^{+}$ . . . . .	23
3.2 Modelo Matemático . . . . .	25

3.2.1	$\mathcal{H}_{at}, \mathcal{H}_a, \mathcal{H}_b$ y el espacio compuesto $\mathcal{H}$ . . . . .	25
3.2.2	Variables y constantes involucradas . . . . .	27
3.2.3	Operadores involucrados . . . . .	28
3.2.4	Ecuación maestra del modelo . . . . .	29
3.2.5	Adición de Ruido térmico . . . . .	31
3.3	Problema a resolver . . . . .	32
3.3.1	Método de integración de Heun . . . . .	33
3.3.2	Truncamiento de dimensión para $\mathcal{H}_a$ y $\mathcal{H}_b$ . . . . .	34
<b>II Problema Matemático-Computacional</b>		<b>35</b>
<b>Capítulo 4. Estudio computacional</b>		<b>36</b>
4.1	Algoritmos generales . . . . .	36
4.2	Estrategias de cómputo . . . . .	39
4.3	Cómputo eficiente de operadores involucrados . . . . .	40
4.3.1	Operador $\hat{a}$ , de creación del modo $a$ . . . . .	41
4.3.2	Operador de creación generalizado . . . . .	42
4.3.3	Operador $\hat{a}_{ij}$ , de transiciones atómicas . . . . .	43
4.3.4	Operador de transiciones atómicas generalizado . . . . .	44
4.4	Cómputo eficiente de operadores compuestos . . . . .	44
4.4.1	Expresiones tipo $\hat{\rho} \rightarrow \hat{a}\hat{\rho}$ . . . . .	45
4.4.2	Expresiones tipo $\hat{\rho} \rightarrow \hat{a}_{ij}\hat{\rho}$ . . . . .	49
4.4.3	Expresiones tipo $\hat{\rho} \rightarrow \hat{a}\hat{\rho}\hat{a}^\dagger$ . . . . .	51

4.4.4	Expresiones tipo $\hat{\rho} \rightarrow \hat{a}_{ij}\hat{\rho}\hat{a}_{ij}^\dagger$ . . . . .	60
4.5	Algoritmos específicos . . . . .	63
4.5.1	Error Relativo . . . . .	65
4.5.2	Conmutador de Hamiltoniano y $\rho$ . . . . .	65
4.5.3	Lindbladiano . . . . .	67
4.6	Plataforma Ejecución . . . . .	68
<b>III</b>	<b>Resultados y conclusiones</b>	<b>69</b>
	<b>Capítulo 5.Resultados</b>	<b>70</b>
5.1	Resultados niveles atómicos y poblaciones de los modos . . . . .	70
5.2	Espectros obtenidos . . . . .	75
5.3	Tiempos de ejecución . . . . .	77
5.4	Proporciones de demora los Algoritmos . . . . .	79
5.5	Resultados paralelización . . . . .	80
	<b>Capítulo 6.Conclusiones</b>	<b>82</b>
6.1	Sobre los resultados con ruido térmico . . . . .	82
6.2	Sobre los tiempos de ejecución obtenidos . . . . .	82
	<b>Nomenclatura y constantes</b>	<b>84</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>86</b>
	<b>Anexo</b>	<b>88</b>
A.1	IFORT . . . . .	88
A.2	OpenMP . . . . .	88



A.3	Scilab . . . . .	89
A.4	Dia . . . . .	89
A.5	Kile . . . . .	89

## Índice de tablas

1	Memoria utilizada por la matriz $\rho$ en y el programa completo en KB. . . . .	77
2	Tiempos de ejecución para diferentes dimensiones de los espacios modales. . . . .	77
3	Tiempos de ejecución y porcentajes por rutina del trabajo anterior. . . . .	78
4	Tiempos de ejecución y porcentajes por rutina del trabajo actual sin ruido térmico. . .	78
5	Número de correcciones $n$ , en el método de integración, $N_a = N_b = 7$ . . . . .	78
6	Porcentajes de tiempos de ejecución para diferentes dimensiones de los espacios modales.	79
7	Proporciones (%) de demora sobre el total (del resp. ámbito) de Algoritmos 6, 21 y 20.	80
8	Rendimiento de las paralelizaciones realizadas. . . . .	81
9	Tiempos de demora de rutinas paralelizadas. . . . .	81

## Índice de Figuras

1	Esquematzación de los decaimientos de los niveles atómicos. . . . .	24
2	Esquematzación de las transiciones producto de los láseres. . . . .	24
3	Evolución de niveles atómicos 0, 1 y 2 en trabajo anterior. . . . .	70
4	Evolución de niveles atómicos 3 y 4 en trabajo anterior. . . . .	71
5	Evolución poblacional modos $a$ y $b$ en trabajo anterior. . . . .	71
6	Evolución del nivel atómico 0 para los diferentes niveles de ruido considerados. . . . .	72
7	Evolución del nivel atómico 1 para los diferentes niveles de ruido considerados. . . . .	72
8	Evolución del nivel atómico 2 para los diferentes niveles de ruido considerados. . . . .	73
9	Evolución del nivel atómico 4 para los diferentes niveles de ruido considerados. . . . .	73
10	Evolución población modo $a$ , $\bar{n} = 0.001$ . . . . .	74
11	Evolución población modo $b$ , $\bar{n} = 0.001$ . . . . .	74
12	Espectros modo $a$ , para niveles de ruido menores. . . . .	75
13	Espectros modo $a$ , para niveles de ruido más altos. . . . .	75
14	Espectros modo $b$ , para niveles de ruido menores. . . . .	76
15	Espectros modo $b$ , para niveles de ruido más altos. . . . .	76
16	Evolución de los niveles 0, 1 y 2 para un tiempo 20 veces mayor. . . . .	76

## Lista de Algoritmos

1	Método de Heun . . . . .	33
2	Main . . . . .	36
3	Main: Integración y registro . . . . .	37
4	Integración y registro: $Calculos(\rho)$ . . . . .	38
5	Integración y registro: $errRel$ . . . . .	38
6	Integración y registro: $f$ . . . . .	38
7	arMod . . . . .	47
8	raMod . . . . .	48
9	arAt . . . . .	50
10	raAt . . . . .	51
11	aratMod . . . . .	53
12	atraMod . . . . .	55
13	atarMod . . . . .	57
14	rataMod . . . . .	58
15	raatMod . . . . .	59
16	aratAt . . . . .	61
17	atarAt . . . . .	62
18	rataAt . . . . .	63
19	normFrob . . . . .	65
20	conmuH . . . . .	66

21    lindbladiano . . . . . 67

Parte I

## Problema Físico-Matemático

# **CAPÍTULO 1**

## **Introducción**

## Capítulo 1. Introducción

---

### 1.1. Introducción

Describimos a continuación lo que el lector ha de encontrar en el presente documento:

En el Capítulo 2 se presentan los fundamentos físicos relevantes para comprender la interacción entre los iones y el campo electromagnético. Se comienza desde la idea de de Broglie sobre las ondas de materia, se solucionan ciertos casos fundamentales de la Ecuación de Schrödinger desde el punto de vista conceptual; como lo es por ejemplo, el caso del oscilador armónico. Luego, se presenta la *primera cuantización del campo electromagnético*, que conduce al concepto de fotón. El fotón será ligado al modelo cuántico de un átomo a través de la emisión y absorción de radiación electromagnética. Ésto último es de vital importancia, puesto que es el fundamento mediante el cual podremos emitir fotones de manera determinística.

En el Capítulo 3 se presenta el modelo matemático utilizado para el estudio de la evolución del Calcio II. Se definen los espacios de Hilbert que compondrán el espacio total  $\mathcal{H}$ , luego se presentan los operadores definidos en aquel espacio involucrados en el modelo utilizado. También se presenta un modelo de la influencia del ruido térmico en la cavidad a través de la adición de ciertos términos de Lindblad específico a la Ecuación Maestra. Finalmente presentamos el método numérico que será utilizado para integrar la Ecuación Maestra, en nuestro caso particular será el Método de Heun.

En el Capítulo 4 se comienza definiendo variables importantes desde el punto de vista computacional e identificando puntos importantes de los algoritmos generales. Luego, se estudian las estructuras de los operadores introducidos el Capítulo 3, y se escriben los algoritmos de cómputo de cada operador. También se estudia la acción de las composiciones de estos operadores. Finalmente, se escriben los principales algoritmos que componen el programa general, utilizando como bloques de construcción los obtenidos anteriormente. Esto se hizo de manera tal de lograr la generalidad necesaria tal que éstos algoritmos puedan ser reutilizados en modelos más complejos, inclusive del mismo problema físico.

En el Capítulo 5 y 6 se presentan los resultados y conclusiones, cuantitativa y cualitativamente respecto de los algoritmos obtenidos en el Capítulo 4. También se presentan los resultados del programa anterior con el fin de realizar una comparación, una vez que se establece que las soluciones obtenidas son las mismas.

Como validación de los resultados obtenidos, se utilizaron, tanto los resultados del trabajo anterior, conocimiento de la Teoría y resultados de publicaciones estudiadas, como [10] y [11]. Los logros más



importantes de este trabajo, se obtuvieron gracias a la identificación de las distintas estructuras de los operadores involucrados, y por ende de la acción que éstos realizan sobre algún elemento del espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ , inclusive no siendo necesario el cómputo de éstos operadores sino, obteniendo directamente el resultado de su operación y el de sus composiciones.

## 1.2. Objetivos Generales del Trabajo de Título

A continuación se presentan los objetivos deseados de alcanzar en el presente Trabajo de Título.

Se desea implementar códigos dinámicos que resuelvan el problema a presentar en (3.3), por *dinámico* entenderemos que dichos códigos sean reutilizables en modelos más generales que el presentado en (3.1), pudiendo adaptarse a otros modelos en los que se agreguen otros subespacios componentes; obtener eficiencia en los algoritmos utilizados para computar los cálculos en los que se involucran operadores de baja densidad (gran cantidad de ceros); incluir en el Lindbladiano términos que den cuenta de ruido térmico en la cavidad y observar qué ocurre con el sistema ante dicho cambio; observar el comportamiento de los programas obtenidos ante un mayor número de fotones aceptados en los modos del campo electromagnético; finalmente, estudiar posibilidades de paralelización de los códigos obtenidos.

### 1.2.1 Objetivos Específicos

1. Escoger el lenguaje y el compilador a utilizar en la plataforma donde sean ejecutados los programas.
2. Realizar pruebas de tiempo de ejecución de manera de identificar cuellos de botella (esto es, subrutinas que tengan un mayor costo computacional frente a las demás) y justificar la elección de las estrategias de cómputo a seguir.
3. Justificar que el método de Heun siga siendo válido de utilizar. Esto es, observar que la Ecuación Maestra continúe siendo diferenciable y que cumpla la condición de Lipschitz.

# **CAPÍTULO 2**

## **Fundamentos Físicos**

## Capítulo 2. Fundamentos Físicos

---

### 2.1. Ondas de Materia

Luis de Broglie, en 1924, propuso la existencia de ondas de materia en su tesis doctoral que presentó en la Facultad de Ciencias de las Universidad de París. En principio, a pesar de lo original y concienzudo de su trabajo, sus ideas fueron consideradas carentes de realidad física por su aparente falta de evidencias experimentales. Fue Albert Einstein quien reconoció su importancia y validez y atrajo la atención de otros físicos hacia él.

La hipótesis de de Broglie consistía en que el comportamiento dual de la radiación, onda-partícula, debería ser igualmente aplicable a la materia. Por tanto, una partícula de materia, como el electrón, tendría asociada un función de onda que gobierne su estado, tal como el fotón tiene asociada una función de onda de luz. Él propuso que los efectos ondulatorios de la materia están relacionados con los aspectos corpusculares de la misma forma cuantitativa que en el caso de la radiación. De acuerdo con de Broglie, tanto para la materia como para la radiación, la energía total  $E$  de un ente se relaciona con la frecuencia  $\nu$  de la onda asociada a su movimiento por medio de la ecuación

$$E = h \nu, \quad (2.1)$$

y el impulso  $p$  del ente se relaciona con la longitud de onda  $\lambda$  de la onda asociada por la ecuación

$$p = \frac{h}{\lambda}. \quad (2.2)$$

De lo anterior, los conceptos corpusculares, energía  $E$  e impulso  $P$ , se relacionan con los conceptos ondulatorios, frecuencia  $\nu$  y longitud de onda  $\lambda$  a través de la constante de Planck  $h$ . A la ecuación (2.2) escrita en la forma siguiente, se le denomina “relación de de Broglie”.

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (2.3)$$

que predice la “longitud de onda de de Broglie” de un “onda de materia” asociada con el movimiento de una partícula de impulso  $p$ .

Elsasser, en 1926, propuso que la naturaleza ondulatoria de la materia podía ser probada del mismo modo como inicialmente se probó la naturaleza ondulatoria de los rayos X, a saber, haciendo incidir

un haz de electrones, con la energía apropiada, sobre un sólido cristalino. Los átomos del cristal son utilizados como un arreglo tridimensional de centros dispersores para la onda electrónica, y por lo tanto, deberán dispersar fuertemente a los electrones en direcciones características, de igual forma en que se produce la difracción de los rayos X. Davisson y Germer confirmaron esta idea en Estados Unidos y Thomson en Escocia.

Davisson y Germer, produjeron un aparato que producía un haz de electrones mediante un filamento caliente, luego éstos eran acelerados a través de una diferencia de potencial  $V$  y emergen de un “cañón” electrónico” con una energía cinética  $eV$ . Este haz de electrones incide sobre un monocristal de níquel y un detector era ubicado de manera adecuada para medir la dispersión en un ángulo determinado. El resultado de este experimento fue la existencia de “picos” en los gráficos de detección versus ángulo del detector, lo que confirmó cualitativamente la validez del postulado de de Broglie, puesto que éste fenómeno (análogo a las “reflexiones de Bragg” en rayos X) sólo puede ser explicado como una interferencia constructiva en las ondas dispersadas por el arreglo periódico de los átomos hacia los planos del cristal. Las partículas clásicas no pueden mostrar interferencia, mientras que las ondas sí lo hacen. La interferencia que aquí se implica, no ocurre entre las ondas asociadas con un electrón y las ondas asociadas con otro, sino que se refiere a la interferencia que ocurre entre diferentes partes de la onda asociada con un electrón y que han sido dispersadas por varias regiones del cristal. Esto se puede demostrar, si se utiliza un haz de electrones con una intensidad tan baja que los electrones pasan por un aparato uno por uno y mostrando que el patrón de electrones dispersados permanece invariante.

G.P. Thomson, en 1927, demostró la difracción de haces de electrones que pasan a través de películas delgadas, confirmando independientemente y en detalle, la relación de de Broglie (2.3). Así como el experimento de Davisson-Germer es análogo al de Laue en difracción de rayos X, el experimento de Thomson es análogo al método de Debye-Hull-Scherrer de difracción de rayos X por un polvo. Thomson utilizó electrones de mayor energía, que son mucho más penetrantes, de modo que son varios cientos de planos atómicos los que contribuyen a la onda difractada.

## 2.2. Teoría de Schrödinger de la Mecánica Cuántica

Los experimentos mencionados en la sección anterior, demostraron contundentemente, que el estado de las partículas en sistemas microscópicos evolucionan de acuerdo a las leyes del movimiento ondulatorio de algún tipo, y no de acuerdo con las leyes newtonianas que obedecen las partículas en los sistemas macroscópicos. Así, una partícula microscópica, actúa como si ciertos aspectos de su comportamiento estuviesen gobernados por el comportamiento de una onda asociada de de Broglie o una función de onda. Los experimentos considerados sólo tratan con casos simples (tales como partículas libres y

osciladores armónicos simples, etc.) que se pueden analizar con procedimientos sencillos (que involucran la aplicación directa del postulado de de Broglie, postulado de Planck, etc.). Pero ciertamente es deseable el estar preparado para tratar los casos más complicados que ocurren en la naturaleza. Para hacer esto se deberá tener un procedimiento más general que se pueda utilizar para tratar el comportamiento de las partículas de cualquier sistema microscópico. La “Teoría de Schrödinger de la Mecánica Cuántica” proporciona tal procedimiento.

Esta teoría especifica las leyes del movimiento ondulatorio que obedecen las partículas de cualquier sistema microscópico. Para ello se especifica, para cada sistema, la ecuación que describe el comportamiento de tal función de onda y la conexión entre este comportamiento y el estado de la partícula. Así, se tiene una extensión del postulado de de Broglie. Más aún, existe una estrecha relación entre ella y la teoría de Newton del movimiento de partículas en sistemas macroscópicos. La teoría de Schrödinger es una generalización que incluye a la teoría de Newton como un caso especial (en el límite de macroscópico-microscópico), tal como la teoría de Einstein de la relatividad es una generalización que incluye a la teoría de Newton como un caso especial (en el límite de velocidades bajas-altas).

Para presentar entonces esta teoría haremos la siguiente formulación, con respecto a una partícula:

1. En relación al concepto clásico de trayectoria, substituiremos el concepto de estado variante en el tiempo. El “estado cuántico” de una partícula, como el electrón, se caracteriza por una “función de onda”  $\Psi$  que depende de la posición y el tiempo  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , que contiene toda la información acerca de la partícula.
2.  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  es interpretada como la amplitud de probabilidad que en el instante  $t$ , la partícula se encuentre en la posición  $\mathbf{r}$  (Interpretación de Born),  $d\mathbb{P}(\mathbf{r}, t) = C|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r}$  donde  $C$  es una constante de normalización.
3. *El principio de descomposición espectral* aplica a la medición de cualquier cantidad física:
  - a) El resultado debe pertenecer a un conjunto de valores propios  $\{a\}$ .
  - b) Cada valor propio  $a$  tiene asociado un autoestado, es decir, una autofunción  $\Psi_a(\mathbf{r}, t)$ . Esta función es tal que, si  $\Psi(\mathbf{r}, t_0) = \Psi_a(\mathbf{r})$  (donde  $t_0$  es el tiempo en el cual la medición es realizada), la medición dará como resultado siempre  $a$ .
  - c) Para cada  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , la probabilidad  $\mathbb{P}_a$  que al medir, sea retornado el valor propio  $a$  en el tiempo  $t_0$  es encontrado mediante la descomposición de  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  en términos de las autofunciones  $\Psi_a(\mathbf{r})$ :

$$\Psi(\mathbf{r}, t_0) = \sum_a c_a \Psi_a(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

entonces:

$$\mathbb{P}_a = \frac{|c_a|^2}{\sum_a |c_a|^2}. \quad (2.5)$$

d) Si la medición resulta ser  $a$ , la función de onda de la partícula, inmediatamente después de la medición es:

$$\Psi'(\mathbf{r}, t_0) = \Psi_a(\mathbf{r}). \quad (2.6)$$

4. Queda por escribir la ecuación, que describe la evolución de la función de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ . Ésta puede ser introducida en forma natural utilizando las relaciones de de Broglie y de Planck. Sin embargo, tan sólo asumiremos su validez. Si la partícula de masa  $m$  está sujeta a la acción de un potencial  $V(\mathbf{r}, t)$ , la ecuación de Schrödinger toma la forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.7)$$

Se observa que esta ecuación es lineal y homogénea en  $\Psi$ . Como consecuencia, para partículas materiales, es válido el principio de superposición que, combinado con la interpretación de  $\Psi$  como amplitud de probabilidad, es la razón de los efectos tipo ondas. Más aún, la ecuación diferencial (2.7) es de primer orden con respecto al tiempo. Esta condición es necesaria si se desea que el estado inicial al tiempo  $t_0$ , caracterizado por  $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$  determine el estado posterior.

Existe entonces una analogía fundamental entre materia y radiación: en ambos casos, una descripción correcta de los fenómenos requiere la introducción de conceptos cuánticos, y en particular, de la idea de función de onda.

### 2.3. Soluciones de la Ecuación de Schrödinger independientes del tiempo

En esta sección mostraremos algunas soluciones a la Ecuación de Schrödinger suponiendo que el potencial  $V$  que actúa sobre la partícula es independiente del tiempo. Además supondremos que la partícula tiene sólo un grado espacial de libertad, en particular, en  $x$ . Podremos apreciar, que al ser confinada la partícula en una región finita, las energías permitidas serán discretas, a lo contrario del caso clásico en el cual los valores de energía posible forman un continuo, también introduciremos los operadores de subida y bajada, que son de gran utilidad también en los casos más generales. Estos operadores serán llamados posteriormente, en el caso de radiación, operadores de creación y aniquilación (de fotones).

### 2.3.1 Estados Estacionarios

La Ecuación de Schrödinger, en el caso unidimensional tiene la forma:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \Psi, \quad (2.8)$$

Además supondremos que el potencial  $V$  sólo depende de la posición, es decir tiene la forma  $V(x)$ . Así, podemos utilizar la técnica de separación de variables. Buscaremos entonces soluciones de la forma:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t), \quad (2.9)$$

Se tiene entonces:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \psi \frac{d\phi}{dt}, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \psi}{dx^2} \phi$$

luego, la Ecuación de Schrödinger en este caso se puede escribir:

$$i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V. \quad (2.10)$$

Introducimos entonces una constante de separación, que por conveniencia llamaremos  $E$ , de manera que (tras un breve arreglo algebraico):

$$\frac{d\phi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar} \phi, \quad (2.11)$$

y

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V\psi = E\psi. \quad (2.12)$$

Hemos obtenido entonces dos ecuaciones independientes para la parte espacial  $\psi$  (2.11) y la parte temporal  $\phi$  (2.12) de  $\Psi$ . La solución para (2.11) es inmediata integrando y se puede escribir (dejando la constante de integración en la parte temporal) como:

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar}. \quad (2.13)$$

La segunda ecuación es conocida como la “Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo”. En

las próximas secciones de este capítulo asumiremos formas especiales para  $V(x)$ . Antes de realizar esto, debemos destacar algunas características importantes de este tipo de soluciones:

1. Son soluciones estacionarias, a pesar que  $\Psi$  depende explícitamente de  $t$ ,

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar},$$

pero el significado físico está dado por el cuadrado de esta función,

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^* \Psi = \psi^* e^{iEt/\hbar} \psi e^{-iEt/\hbar} = |\psi(x)|^2, \quad (2.14)$$

que no depende del tiempo. Lo mismo ocurrirá con cualquier variable aleatoria cuya función de probabilidad asociada sea esta función de onda, o más exactamente, su cuadrado (2.14). En la sección (2.5) veremos que esto último significa que el valor de expectación de cualquier variable física posible de ser medida, es constante en el tiempo cuando el sistema se encuentra en una estado con función de onda de este tipo.

2. Son estados con *energía total definida*. En Mecánica Clásica, la energía total (cinética más potencial) está dada por el Hamiltoniano:

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (2.15)$$

El correspondiente Operador Hamiltoniano, obtenido mediante la sustitución canónica  $p \rightarrow (\hbar/i)(\partial/\partial x)$ , es entonces<sup>1</sup>:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (2.16)$$

Así, la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo puede escribirse como:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (2.17)$$

que es una ecuación de valores propios. Y el valor esperado de la energía es:

$$\langle H \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi dx = E \int |\psi|^2 dx = E \int |\Psi|^2 dx = E. \quad (2.18)$$

Además,

$$\hat{H}^2 \psi = \hat{H}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(E\psi) = E(\hat{H}\psi) = E^2 \psi$$

---

<sup>1</sup>Utilizamos ( $\hat{\phantom{x}}$ ) para distinguir la variable física de su operador correspondiente.



luego

$$\langle H^2 \rangle = \int \psi^* \hat{H}^2 \psi dx = E^2 \int |\psi|^2 dx = E^2.$$

Así, la varianza de  $H$  es:

$$\sigma_H = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0. \quad (2.19)$$

Por tanto, en cualquier momento, si se mide la energía total del sistema, el valor será siempre el mismo,  $E$ . En resumen, una solución separable tiene la propiedad que en toda medición de la energía total retornará un un cierto valor característico de esa solución. Que es la razón para elegir  $E$  como constante de separación.

3. Por tratarse de autofunciones de un operador hermitiano, de (2.17) resulta que toda solución puede ser escrita como combinación lineal de las autofunciones estacionarias, entonces, la solución general está dada por:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (2.20)$$

con

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

### 2.3.2 El pozo cuadrado de paredes infinitas

Supongamos un potencial de la forma:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } 0 \leq x \leq a, \\ \infty, & \text{otro caso} \end{cases}. \quad (2.21)$$

Una partícula bajo estas restricciones es libre en la región interior del pozo ( $0 \leq x \leq a$ , donde se encuentra inicialmente), excepto en los bordes de esta, donde una fuerza infinita no permite que ella escape. Así, fuera del pozo  $\psi(x) = 0$ , y dentro del pozo, la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se escribe:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad (2.22)$$

o

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \quad \text{con } k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (2.23)$$

Que es la ecuación del oscilador armónico, cuya solución general está dada por

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx, \quad (2.24)$$

con  $A, B$  constantes a ser determinadas dadas las condiciones de borde. Tras un breve análisis sobre las condiciones de borde debido a las “paredes” del pozo y sobre la continuidad de  $\psi$ , se demuestra rápidamente que para el caso del pozo infinito se tiene  $B = 0$  y que las soluciones posibles son de la forma

$$\psi(x) = A \sin kx. \quad (2.25)$$

Y nuevamente, dada las condiciones de borde, se deben cumplir las condiciones de periodicidad sobre los posibles valores de la constante  $k$ :

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.26)$$

Además los posibles valores de la energía  $E$  son:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (2.27)$$

Entonces, aquí es donde se presenta una gran diferencia con el caso clásico, puesto que para esta partícula confinada los valores de energía posibles están discretizados (puede demostrarse lo contrario para otros de no confinamiento), dicho de otra forma, existen valores de energía permitidos y otros prohibidos por la teoría. Las autofunciones correspondientes, tras normalizar son:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad (2.28)$$

Se tiene entonces un conjunto infinito numerable de posibles soluciones, cada una con un posible valor de energía para cada entero  $n$ . El caso  $n = 1$  es el de menor energía y es llamado *estado fundamental*, los demás son llamados *estados excitados*. Es de suma importancia notar que el menor valor posible de energía

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2},$$

no es nulo, este es otro de los resultados fundamentales de la Mecánica Cuántica, que por ejemplo, en el caso de radiación, implica que aún en el vacío existe un nivel de energía mínimo permitido no nulo; en el caso de niveles de energía del átomo, este mínimo es el que permite la estabilidad del átomo (véase pág. 287 de [2] y 176 de [4]).

Hemos revisado superficialmente los principales resultados del pozo de potencial de paredes infinitas, a continuación mostraremos su aplicación a otro importante caso.

### 2.3.3 El oscilador armónico

Recordemos el caso clásico unidimensional de una masa  $m$  unida a un resorte de constante restitutiva  $k$ . Se tiene entonces que la fuerza neta (sin otras “fuentes” de fuerza presentes) actuante sobre la masa obedece la Ley de Hooke:

$$F = -kx,$$

cuya solución es

$$x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t),$$

donde

$$\omega = \frac{k}{m}$$

es la frecuencia angular de oscilación. La energía potencial asociada se puede escribir como:

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2, \tag{2.29}$$

A pesar que no existen los osciladores perfectos (aparecen términos discipativos), sabemos, por el teorema de Taylor, que todo potencial puede ser aproximado, a segundo orden al rededor del punto de oscilación  $x_0$  (siendo este punto un mínimo local), por un potencial de la forma (2.29). Esto lo podemos escribir así:

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + O((x - x_0)^3)$$

haciendo un poco de álgebra, incluyendo la condición  $V'(x_0) = 0$  y eliminando los términos de orden mayor se tiene:

$$V(x) \cong \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2,$$

que es de la misma forma que (2.29) tomando  $k = V''(x_0)$ . Aquí radica la importancia del oscilador armónico, en primera instancia, todo movimiento oscilante puede ser aproximado por un oscilador armónico con potencial de la forma (2.29).

Un problema cuántico en que esta aproximación es de suma importancia, es el de estudiar el comportamiento de un electrón ante la presencia de un potencial central, esto lo podemos hacer estudiando primero el caso unidimensional. Para esto supondremos un potencial de la forma:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (2.30)$$

donde hemos incluido la masa en la constante  $k$ . Podemos entonces aplicar lo visto en la sección (2.3.1), puesto que no existe dependencia temporal en el potencial. Resolvemos entonces la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi. \quad (2.31)$$

Para resolver la ecuación, introduciremos el operador de momento (no discutiremos su origen)  $p \equiv (\hbar/i)d/dx$  y los operadores:

$$a_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (\mp ip + m\omega x). \quad (2.32)$$

Se puede demostrar sin mucha dificultad que dados estos operadores, se tiene:

$$H = \hbar\omega \left( a_+ a_- + \frac{1}{2} \right) \quad (2.33)$$

donde hemos utilizado además las importantes relaciones:

$$[x, p] = i\hbar \quad (2.34)$$

$$[a_-, a_+] = 1. \quad (2.35)$$

La primera de estas relaciones aparece, por ejemplo, como causa fundamental del principio de

incertidumbre de Heisenberg (véase pág. 110 de [1]). Con esto, la ecuación (2.31) toma la forma:

$$\hbar\omega \left( a_+ a_- + \frac{1}{2} \right) = E\psi. \quad (2.36)$$

Así, autofunciones de los operadores  $a_+$ ,  $a_-$  y  $a_+ a_-$  cobran vital importancia en la solución de (2.36). No es muy difícil probar (véase por ejemplo [1] sección 2.3.1 o [4] sección 2.4.1) que existirá una autofunción fundamental  $\psi_0$ , en el sentido de estar asociado al mínimo autovalor del operador  $a_+ a_-$  igual a 0 y por ende, el mínimo valor del Hamiltoniano. Además el número de autofunciones es numerable y a cada entero natural podemos asociar una autofunción  $\psi_n$  tal que se cumplen:

$$a_- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1} \quad , \quad a_+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1} \quad (2.37)$$

$$a_+ a_- \psi_n = n \psi_n \quad , \quad a_- \psi_0 = 0 \quad (2.38)$$

$$H(a_+ \psi_n) = (E + \hbar\omega)(a_- \psi) \quad , \quad H(a_- \psi_n) = (E - \hbar\omega)(a_- \psi). \quad (2.39)$$

Dadas las ecuaciones anteriores es que  $a_-$  y  $a_+$  reciben los nombres de operadores de bajada y subida respectivamente. Resolviendo la ecuación (2.31) para el nivel fundamental, encontramos que

$$\psi_0(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}, \quad (2.40)$$

y luego aplicando las ecuaciones (2.37) a (2.39) se tiene que se pueden caracterizar todas las soluciones en forma resumida y en función de la autofunción fundamental  $\psi_0$ :

$$\psi_n = A_n (a_+)^n \psi_0(x), \text{ con } E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad (2.41)$$

donde  $A_n$  es la constante de normalización. Así, aplicando el operador de subida, podemos recuperar todas las soluciones del oscilador armónico.

## 2.4. Notación de Dirac

La Mecánica Cuántica, cuyos postulados revisaremos en la siguiente sección, descansa en la hipótesis que las funciones de onda asociadas a los entes físicos estudiados pertenecen a un espacio vectorial de características especiales, un espacio de Hilbert. Sin querer profundizar demasiado, recordemos que estos espacios vectoriales poseen producto interno y además son completos. El formalismo de Dirac,

nos provee de una notación abstracta en lo que prima son las cualidades algebraicas y funcionales de los entes matemáticos (en este caso vectores) con los que se trabaja. Así, en esta notación, la suma, la multiplicación por escalar, el producto interno, la conjugación, las proyecciones sobre una base de vectores, etc. surgen de manera natural realizando operaciones sencillas sobre los grafemas utilizados.

Sea  $H$  un espacio vectorial con producto interno, un elemento de  $H$ , con cuerpo  $\mathbb{K}$  será llamado *ket*. Será representado con el símbolo  $|\cdot\rangle$ , reemplazando  $\cdot$  por cualquier símbolo que nos sirva para identificar ket en particular, por ejemplo:  $|\psi\rangle$ .

1. Producto por escalar. Si  $|\psi\rangle \in H$  y  $\lambda \in \mathbb{K}$  entonces el producto del escalar por el vector será presentado en cualquiera de las siguientes formas:

$$\lambda|\psi\rangle = |\lambda\psi\rangle = |\psi\rangle\lambda.$$

2. Conjugación. El conjugado del ket  $|\psi\rangle$  será denotado por:

$$\langle\psi|.$$

3. Producto interno. El producto interno de  $|\psi\rangle$  por  $|\phi\rangle$  será escrito como:

$$\langle\psi|\phi\rangle.$$

4. Proyección. Supongamos que deseamos proyectar  $|\psi\rangle$  sobre  $|\phi\rangle$ , entonces con esta notación esta proyección se puede escribir de forma natural (sea  $P_\phi(\psi)$  la proyección):

$$P_\phi(\psi) = (|\phi\rangle\langle\phi|)|\psi\rangle = |\phi\rangle\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle|\phi\rangle.$$

Para mayor profundidad en este formalismo, el lector puede revisar [3] a partir de la pág. 108.

## 2.5. Postulados de la Mecánica Cuántica

En esta sección,  $H$  nuevamente es un espacio de Hilbert, que en general, se trata de la composición de espacios, uno para la parte espacial, y otros, como por ejemplo, uno que describa los grados de libertad de spin de la partícula (véase [2] sección 8.3).

Los postulados son:

1. En un tiempo particular  $t_0$ , el estado del sistema físico está definido por un ket  $|\psi(t_0)\rangle$  perteneciente al espacio  $H$ .

Observamos entonces que el principio de superposición está implícito en este postulado dado que el estado del sistema pertenece a un espacio vectorial.

2. Toda cantidad física  $O$  posible de ser medida es descrita mediante un operador  $\hat{O}$  que actúa de  $H$  en  $H$ ; este operador es llamado un observable.

Entonces, cada vez que una medición es realizada, el estado del sistema se ve alterado, en contraposición con la visión clásica; el principio de incertidumbre está implícito en este postulado.

3. Los únicos posibles resultados de una medición de la cantidad  $O$ , corresponden a alguno de los autovalores del observable  $\hat{O}$ .

Es de gran importancia entonces, el conocer la descomposición espectral del observable asociado a la cantidad deseada de medir.

4. Si la cantidad física  $O$  es medida en un sistema en un estado normalizado  $|\psi\rangle$ , la probabilidad  $\mathbb{P}(a_n)$  de obtener el autovalor no degenerado  $o_n$  del correspondiente observable  $\hat{O}$  es:

$$\mathbb{P}(o_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2,$$

donde  $|u_n\rangle$  es un autovector normalizado de  $\hat{O}$  asociado con el autovalor  $o_n$ .

No profundizaremos en los demás casos, como espectros continuos, degenerados, finitos, etc. El lector interesado puede encontrar más detalles en [3] pág. 217 en adelante.

5. Si la medición de la cantidad física  $O$  en el sistema que se encuentra en el estado  $|\psi\rangle$  retorna como resultado  $o_n$ , el estado del sistema inmediatamente después de la medición es la proyección normalizada,

$$\frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}},$$

de  $|\psi\rangle$  sobre el subespacio propio asociado con  $o_n$ .

Este postulado causó inquietudes entre los progenitores de esta teoría, siendo Einstein uno de los principales detractores dado que da cabida a la llamada “acción a distancia”. El lector interesado puede leer acerca de la paradoja EPR en [1], pág. 421-423.

6. La evolución temporal del estado  $|\psi(t)\rangle$  está dada por la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle, \quad (2.42)$$

donde  $H(t)$  es el observable asociado al total de energía del sistema.

Como comentario final, mencionamos que la constante de Planck  $\hbar$  juega un importante rol en el límite entre la teoría Cuántica y la Clásica, siendo su valor “pequeño” el responsable que los efectos cuánticos sean despreciables a escala macroscópica, para una visión no formal de este hecho recomendamos la lectura de [20].

## 2.6. Campo electromagnético cuantizado

En esta sección presentaremos la descripción canónica del campo electromagnético. Para mayor profundidad en el desarrollo el lector puede revisar [4] sección 2.4.1.

Tras solucionar las ecuaciones de Maxwell para una cavidad conductora perfecta, se encuentra que el campo electromagnético puede ser descrito como combinación lineal de soluciones bases, llamadas *modos* del campo electromagnético. Estos modos pueden ser descritos por dos números  $n, s$ , que representan la polarización de la onda correspondiente. Así, el campo electromagnético al interior de la cavidad puede ser escrito como<sup>2</sup>:

$$\mathbf{E} = \sum_{n,s} \chi_{\mathbf{n},s} e_{n,s} \quad (2.43)$$

$$\mathbf{B} = \sum_{n,s} \frac{1}{k_n} \nabla \wedge \chi_{\mathbf{n},s} b_{n,s}, \quad (2.44)$$

donde la evolución de los coeficientes  $e_n, b_n$  está acoplada por la constante  $k_n$  que representa la frecuencia del modo, este está dada por las ecuaciones:

$$\dot{b}_{n,s} = -ck_n e_{n,s} \quad (2.45)$$

$$\dot{e}_{n,s} = -ck_n b_{n,s} \quad (2.46)$$

o bien:

$$\ddot{e}_{n,s} + c^2 k_n^2 e_{n,s} = 0 \quad (2.47)$$

$$\ddot{b}_{n,s} + c^2 k_n^2 b_{n,s} = 0, \quad (2.48)$$

donde  $c$  es la velocidad de la luz. Así, el campo electromagnético puede ser descrito por la evolución

---

<sup>2</sup>El texto entre negritas indica que la variable es un vector.



de una serie de osciladores armónicos acoplados. Ahora, la energía total almacenada en el campo electromagnético puede ser calculada mediante (véase [13] sección 8.1.2):

$$\varepsilon = \frac{1}{8\pi} \int d^3r (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2), \quad (2.49)$$

el primer paso de la cuantización, es definir las nuevas variables:

$$q_{n,s} = \frac{\gamma}{ck_n} b_{n,s} \quad (2.50)$$

$$p_{n,s} = -\gamma e_{n,s}, \quad (2.51)$$

donde  $\gamma$  es un constante a determinar. De esta forma las ecuaciones (2.45) a (2.46) adquieren la forma de las ecuaciones de Hamilton para un conjunto de osciladores no acoplados:

$$\dot{q}_{n,s} = p_{n,s} \quad (2.52)$$

$$\dot{p}_{n,s} = -c^2 k_n^2 q_{n,s}, \quad (2.53)$$

cuyo Hamiltoniano es:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n,s} \{p_{n,s}^2 + c^2 k_n^2 q_{n,s}^2\}. \quad (2.54)$$

así, (2.49) puede ser escrita como:

$$\varepsilon = \frac{1}{8\pi} \sum_{n,s} \left\{ \frac{p_{n,s}^2}{\gamma^2} + \frac{c^2 k_n^2}{\gamma^2} q_{n,s}^2 \right\}, \quad (2.55)$$

y escogemos  $\gamma = 1/\sqrt{4\pi}$  para que el Hamiltoniano (2.54) sea la energía total (2.55).

El siguiente paso en la cuantización, consiste en reemplazar los corchetes de Poisson de las variables  $q_{n,s}$  y  $p_{n,s}$  por los conmutadores cuánticos (véase [4] sección 2.1). En este caso, los conmutadores de los operadores correspondientes son:

$$[\hat{q}_{n,s}, \hat{p}_{n',s'}] = i\hbar \delta_{n,n'} \delta_{s,s'}$$

Ahora, recordando lo visto en la sección (2.3.3) sobre el oscilador armónico, definimos los operadores

de subida y bajada:

$$\hat{a}_{n,s} = (ck_n \hat{q}_{n,s} + i\hat{p}_{n,s}) \frac{1}{\sqrt{2\hbar ck_n}} \quad (2.56)$$

$$\hat{a}_{n,s}^\dagger = (ck_n \hat{q}_{n,s} - i\hat{p}_{n,s}) \frac{1}{\sqrt{2\hbar ck_n}}, \quad (2.57)$$

así, el campo electromagnético cuantizado puede ser escrito de la siguiente forma:

$$\hat{\mathbf{E}} = i \sum_{n,s} \sqrt{2\pi\hbar ck_n} (a_{n,s} - a_{n,s}^\dagger) \chi_{\mathbf{n},s} \quad (2.58)$$

$$\hat{\mathbf{B}} = \sum_{n,s} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{k_n}} (a_{n,s} + a_{n,s}^\dagger) \nabla \wedge \chi_{\mathbf{n},s} \quad (2.59)$$

y el Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \sum_{n,s} \hbar ck_n \left( a_{n,s}^\dagger a_{n,s} + \frac{1}{2} \right). \quad (2.60)$$

Las mismas propiedades estudiadas en la sección (2.3.3) son ahora válidas, sólo se agrega la complicación de un mayor número de osciladores armónicos involucrados, dependiendo de la frecuencia ( $k_n$ ) y de la polarización del modo  $n, s$ . Así, la energía del campo electromagnético ha sido cuantizada y a cada una de estas *unidades de energía* le llamaremos *fotón*.

## 2.7. Absorción y emisión de radiación. Emisión espontánea.

Tal como hemos discretizado el campo electromagnético, resultando este descrito mediante la combinación lineal de una serie de osciladores armónicos cuánticos, el comportamiento de un electrón en un átomo, puede ser también descrita por operadores de subida y bajada correspondientes, junto con un Hamiltoniano asociado, que entrega la energía total del sistema dependiendo del estado particular. Ahora, ambas descripciones tienen un punto de unión. Ambos sistemas, "átomo" y "campo electromagnético" pueden interactuar entre sí mediante el intercambio de energía. Digamos por ejemplo, que un átomo se encuentra en el nivel fundamental de energía  $\psi_a$ , si este átomo es puesto en interacción con un modo del campo electromagnético, cuya frecuencia es  $\omega$ , la probabilidad que el átomo pase a un nuevo nivel de energía, más alto  $\psi_b$ , tal que la diferencia de energía entre ambos niveles es  $E_b - E_a = \hbar\omega_0$ , es proporcional al cuadrado de la amplitud del modo del campo interactuante e inversamente proporcional al cuadrado de la diferencia de ambas frecuencias,  $(\omega_0 - \omega)^2$ . De ocurrir esta

”subida“ en el nivel energético del átomo, el modo del campo electromagnético pierde exactamente la energía ganada por el átomo: decimos entonces que el átomo a *absorbido* un fotón. El fenómeno contrario también es posible, el átomo, al estar en un nivel de energía  $\psi_b$  puede decaer a otro nivel  $\psi_a$  al ser perturbado por un modo del campo electromagnético; la energía perdida por el átomo en esta interacción, es ganada por un modo del campo electromagnético cuya *unidad de energía* (fotón) coincida con la energía perdida por el átomo, a este fenómeno se le conoce como *emisión estimulada*. Finalmente, como hemos visto, el campo electromagnético, al ser descrito por osciladores armónicos cuánticos, posee un mínimo de energía no nulo, esta consecuencia, puramente cuántica da cabida a las llamadas *fluctuaciones del vacío* que pueden interactuar con un nivel inestable del átomo y lograr hacerlo decaer, a este fenómeno se le conoce como *emisión espontánea*. Para mayor información sobre estos fenómenos el lector puede revisar [1] sección 9.9.2 o [4] capítulo 6.

## 2.8. Ecuación Maestra para un átomo de dos niveles en equilibrio térmico

Consideremos un átomo atrapado en una cavidad que interactúa con el campo electromagnético que se encuentra en equilibrio térmico. Los modos del campo electromagnético afectan al átomo desde todas las direcciones en el espacio de tres dimensiones. El Hamiltoniano  $H$  de este sistema está dado por:

$$H = H_S + H_R + H_{SR},$$

donde  $H_S$  es el Hamiltoniano del átomo,  $H_R$  el del campo electromagnético en la cavidad y  $H_{SR}$  el de interacción entre estos dos subsistemas. Se tiene que:

$$H_S = \frac{1}{2}\hbar\omega_A\sigma_z \quad (2.61)$$

$$H_R = \sum_{\mathbf{k},\lambda} \hbar\omega_k r_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger r_{\mathbf{k},\lambda} \quad (2.62)$$

$$H_{SR} = \sum_{\mathbf{k},\lambda} \hbar (\kappa_{\mathbf{k},\lambda} r_{\mathbf{k},\lambda} \sigma_- + \text{h.c.}), \quad (2.63)$$

con el acoplamiento entre el modo y el átomo

$$\kappa_{\mathbf{k},\lambda} = -ie^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_A} \sqrt{\frac{\omega_k}{2\hbar\epsilon_0 V}} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \mathbf{d}_{21}.$$

Las sumas se extienden sobre los osciladores armónicos que describen los modos del campo electromagnético, siendo  $\mathbf{k}$  el vector de onda y  $\lambda$  la polarización, con sus respectivas frecuencias  $\omega_k$ , vectores unitarios de polarización  $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k},\lambda}$  y  $r_{\mathbf{k},\lambda}$  el operador de creación; el átomo se encuentra en la posición  $\mathbf{r}_A$ ,  $V$  es el volumen de cuantización y  $\mathbf{d}_{12}$  es el vector momento dipolar eléctrico entre ambos niveles atómicos. Además

$$\sigma_- = |1\rangle\langle 2|, \quad \sigma_z = |2\rangle\langle 2| - |1\rangle\langle 1|,$$

siendo  $|1\rangle$  y  $|2\rangle$  los dos niveles posibles del átomo. Ahora, se desea encontrar la ecuación de evolución para el átomo. Para esto, trazamos el operador de densidad del sistema completo  $\xi(t)$ , sobre el espacio del reservorio  $R$ , es decir, se define el operador de densidad  $\rho(t) = \text{tr}_R(\xi(t))$ . Además, utilizamos el cuadro de Heisenberg, es decir consideramos la rotación

$$\tilde{\rho} = e^{(i/\hbar)H_S t} \rho e^{-(i/\hbar)H_S t}, \quad (2.64)$$

de [7] sección 1.3 se tiene entonces que la ecuación para de evolución para  $\tilde{\rho}$  está dada por

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}} = & \left[ \frac{\gamma}{2}(\bar{n} + 1) + i(\Delta' + \Delta) \right] (\sigma_- \tilde{\rho} \sigma_+ - \sigma_+ \sigma_- \tilde{\rho}) + \text{h.c} \\ & + \left( \frac{\gamma}{2}\bar{n} + i\Delta' \right) (\sigma_+ \tilde{\rho} \sigma_- - \tilde{\rho} \sigma_- \sigma_+) + \text{h.c} \end{aligned}$$

con  $\bar{n} = \bar{n}(\omega_A, T)$  dado por

$$\bar{n}(\omega_A, T) = \left( e^{\hbar\omega_A/k_B T} - 1 \right)^{-1}$$

igual al número promedio de fotones en un modo de frecuencia  $\omega_A$  en equilibrio térmico. Además

$$\begin{aligned} \gamma &= 2\pi \sum_{\lambda} \int g(\mathbf{k}) |\kappa(\mathbf{k}, \lambda)|^2 \delta(kc - \omega_A) d^3k \\ \Delta &= \sum_{\lambda} P \int \frac{g(\mathbf{k}) |\kappa(\mathbf{k}, \lambda)|^2}{\omega_A - kc} d^3\mathbf{k} \\ \Delta' &= \sum_{\lambda} P \int \frac{g(\mathbf{k}) |\kappa(\mathbf{k}, \lambda)|^2}{\omega_A - kc} \bar{n}(kc, T) d^3\mathbf{k}, \end{aligned}$$

donde  $g(\mathbf{k})$  es la densidad de modos con número de onda  $\mathbf{k}$ . Ahora, utilizando

$$\begin{aligned} \sigma_+ \sigma_- &= |2\rangle\langle 1|1\rangle\langle 2| = |2\rangle\langle 2| = \frac{1}{2}(1 + \sigma_z) \\ \sigma_- \sigma_+ &= |1\rangle\langle 2|2\rangle\langle 1| = |1\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}(1 - \sigma_z), \end{aligned}$$

obtenemos

$$\begin{aligned}
 \dot{\tilde{\rho}} &= \frac{\gamma}{2}(\bar{n}+1)(2\sigma_- \tilde{\rho} \sigma_+ - \sigma_+ \sigma_- \tilde{\rho} - \tilde{\rho} \sigma_+ \sigma_-) - i(\Delta' + \Delta)[\sigma_+ \sigma_-, \tilde{\rho}] \\
 &\quad + \frac{\gamma}{2}\bar{n}(2\sigma_+ \tilde{\rho} \sigma_- - \sigma_- \sigma_+ \tilde{\rho} - \tilde{\rho} \sigma_- \sigma_+) + i\Delta'[\sigma_- \sigma_+, \tilde{\rho}] \\
 &= -i\frac{1}{2}(2\Delta' + \Delta)[\sigma_z, \tilde{\rho}] + \frac{\gamma}{2}(\bar{n}+1)(2\sigma_- \tilde{\rho} \sigma_+ - \sigma_+ \sigma_- \tilde{\rho} - \tilde{\rho} \sigma_+ \sigma_-) \\
 &\quad + \frac{\gamma}{2}\bar{n}(2\sigma_+ \tilde{\rho} \sigma_- - \sigma_- \sigma_+ \tilde{\rho} - \tilde{\rho} \sigma_- \sigma_+).
 \end{aligned}$$

Finalmente, regresando al cuadro de Schrödinger, es decir, invirtiendo la rotación (2.64) obtenemos la Ecuación Maestra para un átomo de dos niveles en equilibrio térmico

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho} &= -i\frac{1}{2}\omega'_A[\sigma_z, \rho] + \frac{\gamma}{2}(\bar{n}+1)(2\sigma_- \rho \sigma_+ - \sigma_+ \sigma_- \rho - \rho \sigma_+ \sigma_-) \\
 &\quad + \frac{\gamma}{2}\bar{n}(2\sigma_+ \rho \sigma_- - \sigma_- \sigma_+ \rho - \rho \sigma_- \sigma_+),
 \end{aligned}$$

con

$$\omega'_A = \omega_A + 2\Delta' + \Delta.$$

Esta es la forma básica de interacción entre el átomo y el campo electromagnético. En el problema estudiado en este trabajo, supondremos que el átomo interactúa únicamente con dos modos del campo electromagnético, y el ruido térmico actúa sobre dichos modos, lo que supondrá una ecuación análoga pero donde en vez de  $\sigma_+$  y  $\sigma_-$ , aparecerán operadores de transición entre los niveles atómicos acoplados.

# **CAPÍTULO 3**

## **Modelo Estudiado**

## Capítulo 3. Modelo Estudiado

---

### 3.1. El Ión $Ca^+$

A grandes rasgos, uno de los principales resultados de la Mecánica Cuántica, aplicada a la modelación de átomos, es que los electrones se distribuyen al rededor del núcleo formando nubes electrónicas organizadas por capas o casquetes, cada una más alejada al núcleo que la otra. En el caso del Calcio, tal como aparece en la tabla periódica, estas tres primeras capas se encuentran completas y dos electrones más, se encuentran en la cuarta capa. Sin embargo, estos últimos electrones están ligados débilmente, lo que significa que la energía necesaria para ionizar este átomo es baja. Por esto último, en la naturaleza, el calcio se encuentra ionizado, esto se denota  $Ca^+$  significando que uno de los electrones de la última capa ha sido perdido, habiendo emitido un fotón. Por poseer sólo un electrón libre en la última capa, se dice que el  $Ca^+$  tiene forma hidrogenoide, esto es, su comportamiento es “similar” al del Hidrógeno, que también posee sólo un electrón libre.

En este trabajo, los niveles de energía relevantes del  $Ca^+$  serán cinco, denotando por  $|0\rangle$  el nivel fundamental, o de mínima energía,  $|1\rangle$  el siguiente nivel, hasta el nivel  $|4\rangle$ , el de mayor energía. Las correspondencias formales con los niveles atómicos estándares es la siguiente:

$$\begin{aligned} |0\rangle &\rightarrow 4^2S_{1/2} \\ |1\rangle &\rightarrow 3^2D_{3/2} \\ |2\rangle &\rightarrow 3^2D_{5/2} \\ |3\rangle &\rightarrow 4^2P_{1/2} \\ |4\rangle &\rightarrow 4^2P_{1/2} \end{aligned}$$

Para mayor información acerca de la nomenclatura utilizada para describir los niveles atómicos el lector puede consultar [2] sección 9.7.

La idea de absorción de radiación, presentada en (2.7) puede ser utilizada para llevar un átomo a un nivel de mayor energía si así se desea, la fuente de luz utilizada para este fin es un láser; se dice que el láser es utilizado para *bombear* el átomo del nivel energético menor al mayor. El láser 1 lleva al átomo del nivel  $|1\rangle$  al  $|3\rangle$  y el láser 2 del  $|0\rangle$  al  $|4\rangle$ .

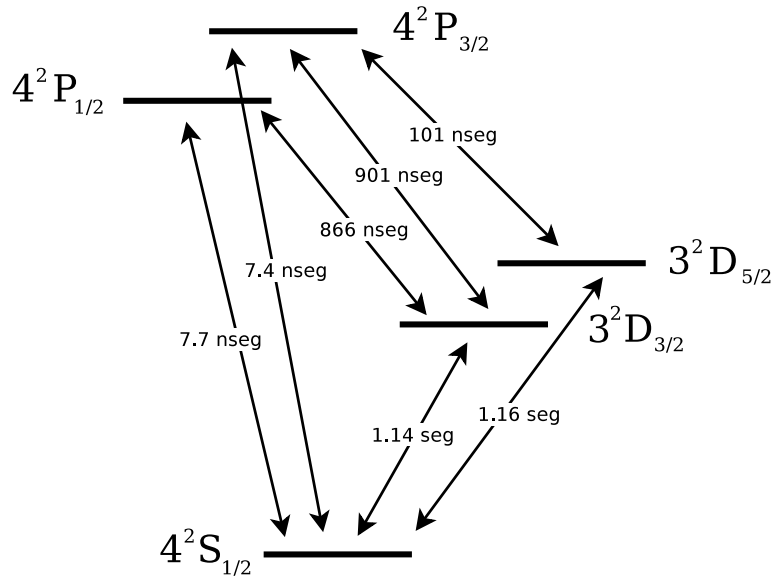


Figura 1: Esquemmatización de los decaimientos de los niveles atómicos.

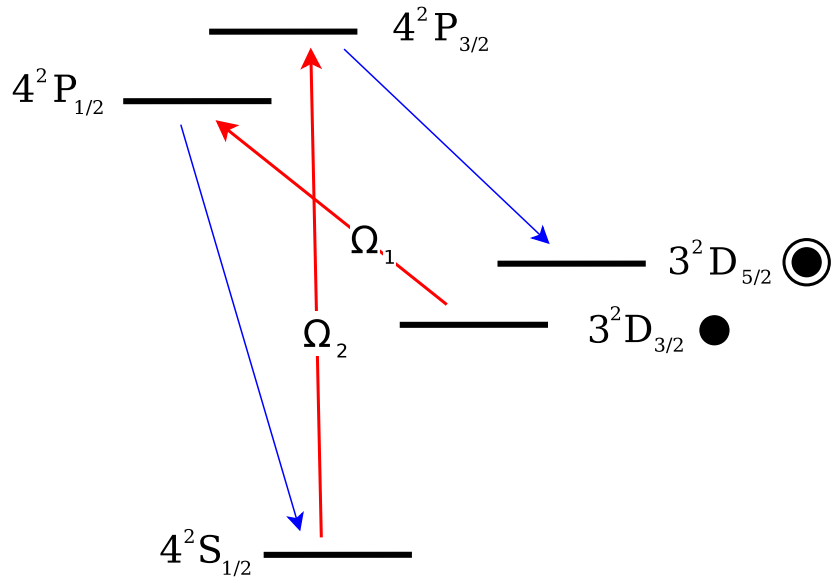


Figura 2: Esquemmatización de las transiciones producto de los láseres.



Además, en nuestro modelo, el átomo se encuentra acoplado a dos modos del campo electromagnético al interior de la cavidad, uno de estos modos, el modo  $a$ , se acopla a las transiciones energéticas del átomo entre  $|3\rangle$  y  $|0\rangle$ , el otro, el modo  $b$ , se acopla a las transiciones entre  $|4\rangle$  y  $|2\rangle$ . Las interacciones producto de los decaimientos espontáneos, esquematizadas en la Figura 1, y las producto de los láseres en la Figura 2, las resumimos a continuación:

- $|0\rangle$ : Desde este nivel, el átomo es llevado al nivel  $|4\rangle$  por el láser 2. Por tratarse del nivel fundamental, no existen posibles decaimientos. Existe también la probabilidad de reabsorber un fotón presente en el modo  $a$  y que el átomo regrese al nivel  $|1\rangle$ , pero esta probabilidad es despreciable frente a la mencionada anteriormente.
- $|1\rangle$ : Como ya dijimos, desde este nivel el átomo es llevado al nivel  $|3\rangle$  por el láser 1. No es posible que el átomo decaiga al nivel fundamental, producto de las reglas de selección (véase [1] sección 9.3.3).
- $|2\rangle$ : Este estado es absorbente, en el sentido que por reglas de selección, el átomo no puede caer a niveles inferiores.
- $|3\rangle$ : Desde este estado, el átomo decaerá al nivel fundamental, emitiendo un fotón en el modo  $a$ , siendo casi nula la probabilidad que decaiga de regreso al nivel  $|1\rangle$ .
- $|4\rangle$ : Desde este estado, el átomo decaerá al nivel  $|2\rangle$ , emitiendo un fotón en el modo  $b$ , no pudiendo decaer a otros estados por las reglas de selección, salvo al fundamental con probabilidad despreciable, pero de todas maneras retorna al nivel  $|4\rangle$  (esto lleva a definir más adelante la *tasa de transición*).

## 3.2. Modelo Matemático

### 3.2.1 $\mathcal{H}_{at}$ , $\mathcal{H}_a$ , $\mathcal{H}_b$ y el espacio compuesto $\mathcal{H}$

El espacio de Hilbert al cual pertenecen los posibles estados del átomo, es de dimensión infinita, sin embargo, sólo cinco de estos estados se encuentran involucrados en la evolución del sistema a estudiar, luego podemos truncar la dimensión del Hilbert asociado al átomo, que denotaremos por  $\mathcal{H}_{at}$ . A saber, sólo poseerá cinco elementos en su base, es decir  $\mathcal{H}_{at} = (\mathbb{C}^5, +, \cdot)$ , tomando como base del espacio, la base canónica  $\{e_i\} : i = 1 \dots 5$ , con, por ejemplo:

$$e_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^t,$$

y haciendo la correspondencia para los niveles atómicos de la sección anterior<sup>3</sup>:

$$|i\rangle_{at} \equiv e_i, \quad i = 1 \dots 5.$$

Al igual que para el caso atómico, los espacios de Hilbert asociados a los modos  $a$  y  $b$  del campo electromagnético acoplados al átomo, que denotaremos por  $\mathcal{H}_a$  y  $\mathcal{H}_b$  resp. serán truncados en su dimensión. En el caso en el cuál no existe ruido térmico, este truncamiento se puede tomar como el mínimo de fotones posibles de ser emitidos por el átomo, es decir, dos. Cuando incluyamos el ruido térmico en la sección (3.2.5), este nivel de truncamiento será aumentado dado que el número de fotones posibles en cada modo aumentará.

Para el caso sin ruido térmico seleccionamos entonces  $\mathcal{H}_a = \mathcal{H}_b = (\mathbb{C}^3, +, \cdot)$ , dado que se requiere que en la base del espacio estén los tres niveles posibles, desde 0 a 2 fotones. La base elegida en cada Hilbert será nuevamente la canónica (esta vez en  $\mathbb{C}^3$ ) y la correspondencia para  $\mathcal{H}_a$  con los kets del modo  $a$  será:

$$|n\rangle_a \equiv e_n, \quad n = 1 \dots 3.$$

la correspondencia para  $\mathcal{H}_b$  es análoga.

Finalmente, el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  que representa el sistema total, es el resultado de la composición, mediante el producto tensorial, de estos espacios menores:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{at} \otimes \mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b.$$

---

<sup>3</sup>El subíndice “at” indica que el elemento pertenece al espacio asociado al átomo.

### 3.2.2 Variables y constantes involucradas

Constante	Descripción
$\kappa_a, \kappa_b$	Factor de pérdida de energía en la cavidad asociado al modo $a, b$ respectivamente.  Véase [4].
$g_a, g_b$	Constantes de acoplamiento entre los modos $a$ y $b$ resp. y los niveles atómicos asociados.
$\delta_1, \delta_2$	Parámetros de perturbación a segundo orden. Véase [6].
$\Omega_1(t), \Omega_2(t)$	Intensidad gauseana de los láseres que bombean electrones en los niveles atómicos descritos en la sección (3.1) de amplitud $\Omega_{10}, \Omega_{20}$ y varianza $\sigma_1, \sigma_2$ resp.
$\Delta_1, \Delta_2$	Desfase o <i>detuning</i> entre las frecuencias de los niveles atómicos y las frecuencias efectivamente alcanzadas por el electrón efecto del láser producto del <i>efecto Stark</i> . Véase [10].
$v_a, v_b$	Frecuencias efectiva de interacción entre los niveles atómicos y los modos $a$ y $b$ resp.
$v_1, v_2$	Frecuencias de los láseres 1 y 2.
$\Gamma_{ij}$	Tasa de transición del nivel $j$ al nivel $i$ .
$N_{mod}$	Número de modos del campo electromagnético acoplados al átomo. $N_{mod} = 2$ en este trabajo.
$N_{at}$	Número de niveles atómicos relevantes en el modelo. $N_{at} = 5$ en este trabajo.
$N_a, N_b$	Dimensión del espacio $\mathcal{H}_a$ y $\mathcal{H}_b$ asociados al los modos del campo electromagnético $a, b$ respectivamente. Esto corresponde al número de fotones permitidos más uno.
$dimt$	Dimensión del espacio mayor $\mathcal{H}$ .

### 3.2.3 Operadores involucrados

A continuación describimos los operadores a utilizar (De aquí en adelante, utilizaremos  $|i\rangle$  para denotar exclusivamente el ket que representa el nivel  $i$  del átomo, en otro caso se utilizará e subíndice correspondiente):

Operador	Descripción
$I_{at}$	Operador identidad en el espacio $\mathcal{H}_{at}$ .
$I_a$	Operador identidad en el espacio $\mathcal{H}_a$ . Análogo para $I_b$ .

Actúa según  $\mathcal{H}_a \rightarrow \mathcal{H}_a$ . Operador de creación del modo  $a$ , llamado así puesto que opera *generando* un fotón en el modo  $a$ . Este es equivalente al operador de subida descrito en la sección (2.3.3). Sin embargo, en secciones siguientes utilizaremos esta misma notación (sin ambigüedad pues el significado será leído del contexto) para denotar el operador que actúa según  $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  y definido por:

$$\hat{a} \equiv I_{at} \otimes \hat{a} \otimes I_b, \quad (3.1)$$

El lector no debe confundirse, al lado izquierdo hemos definido el nuevo operador en función del operador descrito en el párrafo anterior. Análogo para  $\hat{b}$ .

Actúa según  $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ . Operador de transiciones atómicas definido por:

$$\hat{a}_{ij} \equiv |i\rangle\langle j| \otimes I_a \otimes I_b. \quad (3.2)$$

En la siguiente sección describiremos otros operadores a utilizar pero de mayor importancia conceptual.

### 3.2.4 Ecuación maestra del modelo

Por *Ecuación maestra* (o *Ecuación de evolución*) entenderemos la ecuación diferencial que describe el comportamiento en el tiempo del estado del sistema o algún equivalente. Siendo  $\psi(t) \in \mathcal{H}$  el estado del sistema en un instante  $t$ , definimos el operador de densidad  $\rho$  mediante<sup>4</sup>:

$$\rho \equiv |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (3.3)$$

de esta forma la ecuación (2.42) puede ser escrita como (véase [3] complemento  $E_{III}$ ):

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)]. \quad (3.4)$$

Además se tiene que, si  $\hat{O}$  es un observable, asociado a la cantidad física  $o$ , entonces el valor esperado  $\bar{o}$  de  $o$  en un tiempo  $t$  está dado por:

$$\bar{o} = \text{tr} \left( \hat{O}\rho(t) \right). \quad (3.5)$$

Ahora bien, en nuestro modelo, consideraremos la visión más realista en la cual existen pérdidas de energía en el sistema, que corresponden a pérdidas de energía producto de imperfecciones en los espejos de la cavidad y en emisiones espontáneas (véase (2.7)). Estas pérdidas, se describen mediante el operador *Lindbladiano* que debe ser agregado a la ecuación (3.4), así, la forma de la ecuación de evolución en nuestro trabajo será:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)] + \mathcal{L}(\rho). \quad (3.6)$$

En un problema en particular, debemos entonces determinar primero, cuál es el espacio  $\mathcal{H}$  con el cual modelaremos el problema físico. Para luego determinar los operadores  $H$  y  $\mathcal{L}$ , Hamiltoniano y Lindbladiano respectivamente. En la sección (3.2.1), ya hemos resuelto la primera pregunta, aunque un breve ajuste deberá ser hecho cuando agreguemos ruido térmico en la siguiente sección.

En cuanto al Hamiltoniano del sistema, este puede ser descrito como la suma de los Hamiltonianos de los sistemas componentes por separado (véase (3.2.1)), suma que denotaremos por  $H_0$  y el Hamil-

---

<sup>4</sup>Por simplicidad, escribiremos simplemente  $\rho$ , omitiendo el símbolo  $\hat{\phantom{x}}$

toniano que describe la interacción entre los sistemas, en particular, la interacción entre cada modo y el átomo, además de la interacción entre los láseres y los niveles atómicos relacionados. Este último Hamiltoniano será denotado por  $H_I$ :

$$H = H_0 + H_I. \quad (3.7)$$

Ahora, la energía presente (o *almacenada*) en el modo  $a$  del campo electromagnético corresponde al *número promedio de fotones presente en el modo  $a$* ,  $n_a$ , ponderado por la frecuencia particular del modo  $a$ ,  $\omega_a$ . El operador asociado a la cantidad  $n_a$ , denotado por  $\hat{n}_a$  corresponde a la composición de su operador creación con su operador de aniquilación asociados, es decir  $\hat{n}_a = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ . Así, la energía presente en el modo  $a$  es calculada utilizando el operador<sup>5</sup>:

$$\omega_a \hat{a}^\dagger \hat{a}.$$

Análogamente, el operador:

$$\omega_b \hat{b}^\dagger \hat{b},$$

es utilizado en el cálculo de la energía presente en el modo  $b$ . Finalmente, la energía presente en el átomo (considerando sólo la energía presente en los niveles considerados por el modelo) corresponde a la suma de los proyectores de cada nivel  $i$ , ponderado por su frecuencia natural  $\omega_i$  de oscilación:

$$H_0 = \omega_a \hat{a}^\dagger \hat{a} + \omega_b \hat{b}^\dagger \hat{b} + \sum_{i=0}^4 \omega_i |i\rangle\langle i|. \quad (3.8)$$

Ahora, la el Hamiltoniano de interacción  $H_I$  es escrito como<sup>6</sup>:

$$H_I = \Omega_1(t) |3\rangle\langle 1| e^{-iv_a t} + \Omega_2(t) |4\rangle\langle 0| e^{-iv_b t} + g_a |3\rangle\langle 0| \hat{a} + g_b |4\rangle\langle 2| \hat{b} + \text{h.c.}, \quad (3.9)$$

donde las amplitudes de los láseres son Gauseanas:

$$\Omega_1(t) = \Omega_{10} e^{-\frac{(t-t_m)^2}{\sigma_1^2}}, \quad \Omega_2(t) = \Omega_{20} e^{-\frac{(t-t_m)^2}{\sigma_2^2}}.$$

---

<sup>5</sup>En este expresión, y en otras durante el presente trabajo, omitimos  $\hbar$  (en este caso en la expresión  $\hbar \omega_a \hat{a}^\dagger \hat{a}$ ) ya que consideraremos esta constante igual a la unidad.

<sup>6</sup>La notación “h.c” indica que deben sumarse los conjugados de los sumandos escritos previamente.

Los primeros dos términos indican la interacción entre los láseres y los niveles atómicos asociados, los dos últimos indican el acoplamiento entre los modos del campo y los niveles asociados. Finalmente, el Lindbladiano para el modelo sin ruido térmico corresponde a:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}(\rho) = & \frac{\Gamma_{04}}{2}(2 a_{04}\rho a_{04}^\dagger - a_{04}^\dagger a_{04}\rho - \rho a_{04}^\dagger a_{04}) + \\
 & + \frac{\Gamma_{03}}{2}(2 a_{04}\rho a_{03}^\dagger - a_{03}^\dagger a_{03}\rho - \rho a_{03}^\dagger a_{03}) + \\
 & + \frac{\Gamma_{13}}{2}(2 a_{13}\rho a_{13}^\dagger - a_{13}^\dagger a_{13}\rho - \rho a_{13}^\dagger a_{13}) + \\
 & + \frac{\Gamma_{24}}{2}(2 a_{24}\rho a_{24}^\dagger - a_{24}^\dagger a_{24}\rho - \rho a_{24}^\dagger a_{24}) + \\
 & + \frac{\Gamma_{14}}{2}(2 a_{14}\rho a_{14}^\dagger - a_{14}^\dagger a_{14}\rho - \rho a_{14}^\dagger a_{14}) + \\
 & + \kappa_a(2 \hat{a}\rho\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\rho - \rho\hat{a}^\dagger\hat{a}) + \\
 & + \kappa_b(2 \hat{b}\rho\hat{b}^\dagger - \hat{b}^\dagger\hat{b}\rho - \rho\hat{b}^\dagger\hat{b}).
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

Donde  $\kappa_a$  y  $\kappa_b$  son las tasas de pérdida de la cavidad para cada modo, que supondremos iguales en este trabajo. Además los  $\Gamma_{ij}$  son las tasas de transición entre  $|i\rangle$  y  $|j\rangle$ , hemos despreciado las transiciones entre el nivel  $|1\rangle$  y el  $|0\rangle$  y entre  $|2\rangle$  y  $|0\rangle$  puesto que las tasas asociadas son de ocho órdenes de magnitud diferentes a las demás tasas y su efecto queda fuera de la escala de tiempo considerada en este trabajo (véase [11]). Finalmente, el estado inicial del sistema se encuentra dado por las siguientes condiciones:

- En cada modo, inicialmente no hay fotones presentes. Por tanto el modo  $a$  empieza en el estado  $|0\rangle_a$ , al igual que el modo  $b$  empieza en el estado  $|0\rangle_b$ .
- El átomo empieza en el nivel de energía descrito por  $|1\rangle$ .

Por tanto, el operador de densidad inicial  $\rho(0) = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|$  se puede considerando:

$$|\psi(0)\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle_a \otimes |0\rangle_b. \tag{3.11}$$

Así, el conjunto dado por (3.6), (3.8), (3.9), (3.10) y (3.11) describe el problema matemático a resolver para analizar la evolución del sistema físico descrito en (3.1).

### 3.2.5 Adición de Ruido térmico

Un caso físico más realista que el presentado en las secciones anteriores, es el que se obtiene al considerar que la cavidad se encuentra en un *baño térmico*, esto es, no existe un vacío perfecto en la

cavidad. El efecto de esta hipótesis, es estudiado en [7] sección 1.3 para el caso de equilibrio térmico y su efecto en nuestro modelo será añadir el término:

$$2\kappa\bar{n}(\hat{a}\rho\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\rho\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}\rho - \rho\hat{a}\hat{a}^\dagger), \quad (3.12)$$

al Lindbladiano (3.10) por cada modo,  $a$  y  $b$ , reemplazando  $\hat{a}$  ( $\hat{a}^\dagger$ ) por el respectivo operador de aniquilación (creación). La constante  $\bar{n}$  es el número de fotones promedio a temperatura  $T$  para el modo involucrado.

### 3.3. Problema a resolver

Recordemos que el problema a resolver, visto en la sección (3.2.4), es el encontrar  $\rho \in \mathcal{C}_0^2([0, t_f], \mathbb{C}^n \times \mathbb{C}^n)$ , y definido en (3.3), donde  $n$  es la dimensión total resultado del producto de las dimensiones de los espacios componentes vistos en (3.2.1) y  $t_f = \frac{100}{\kappa}$ , con  $\kappa$  igual a la tasa de pérdida de energía de las cavidades, véase [11]. Siendo la ecuación a satisfacer:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = f(t, \rho(t)) \quad (3.13)$$

$$= -i\hbar[H(t), \rho(t)] + \mathcal{L}(\rho(t)), \quad (3.14)$$

con  $H$  y  $\mathcal{L}$  dados por (3.8) + (3.9) y (3.10) respectivamente. Además  $t_f$  es el tiempo final que define el intervalo sobre el cual se desea resolver. Finalmente se tiene la condición inicial:

$$\rho(0) = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|, \quad |\psi(0)\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle_a \otimes |0\rangle_b. \quad (3.15)$$

En este trabajo, se resolverá este problema mediante integración numérica utilizando el método de Heun, sobre una malla temporal equiespaciada  $t_i$ ,  $i = 1 \dots N$ ,  $N = 20000$ ,  $t_1 = 0.0s$  y  $t_N = t_f$ . El análisis de la conveniencia de este método por sobre otros para este problema, es realizado en [5]. Debemos destacar que la Continuidad y Diferenciabilidad de la Ecuación Maestra siguen siendo válidas tras agregar el ruido térmico, puesto que esto sólo añade términos del tipo  $\|C_m\|$  en la constante de acotación  $M$  en el Capítulo 6 de [5], lo mismo ocurre en el análisis del cumplimiento de la condición de Lipschitz en la segunda variable de  $f$ .



### 3.3.1 Método de integración de Heun

Este método numérico de integración es del tipo *predictor-corrector* de segundo orden. Como hipótesis para la utilización del método, supondremos que  $f \in \mathcal{C}_0^2([0, t_f] \times \mathcal{H})$  de 3,14 cumple la condición de Lipschitz, esto es,  $\exists L \in \mathbb{R}_0^+$  tal que:

$$|f(t, \rho) - f(t, \rho')| \leq L \|\rho - \rho'\|_{\mathcal{H}}$$

$$\forall t \in [0, t_f], \forall \rho, \rho' \in \mathcal{H}.$$

Definiremos además la partición  $t_0 = 0 < t_1 < \dots < t_N = t_f$  del intervalo  $[0, t_f]$  que será utilizado por el método. El método de Heun, consiste en utilizar como predictor, el método Runge-Kutta de segundo orden, y como corrector el método del Trapecio. Así, el algoritmo de integración para nuestro problema resulta ser:

---

**Algoritmo 1:** Método de Heun

---

**Entrada:**  $f, Y_0, h, n, \{t_i\}_{i=0}^{n-1}, \epsilon$

**Salida:**  $\{Y_i\}_{i=0}^{n-1}$

1 **Inicio**

2     **Para**  $i = 0$  *hasta*  $i = n - 1$  **Hacer**

3          $Y_{i+1}^{(0)} = Y_i + hf(t_i, Y_i);$

4          $Y_{i+1}^{(1)} = Y_i + \frac{h}{2} \left\{ f(t_i, Y_i) + f(t_{i+1}, Y_{i+1}^{(0)}) \right\};$

5          $error = errRel(Y_{i+1}^{(1)}, Y_{i+1}^{(0)});$

6          $k = 2;$

7         **Mientras**  $error > \epsilon$  **Hacer**

8              $Y_{i+1}^{(k)} = Y_i + \frac{h}{2} \left\{ f(t_i, Y_i) + f(t_{i+1}, Y_{i+1}^{(k-1)}) \right\};$

9              $error = errRel(Y_{i+1}^{(k)}, Y_{i+1}^{(k-1)});$

10             $k = k + 1;$

11         **Fin**

12          $Y_{i+1} = Y_{i+1}^{(k)};$

13     **Fin**

14 **Fin**

---

Donde  $Y_0$  es el punto inicial  $\rho(0)$ ,  $h$  es el paso de integración (véase [5] Cap. 7),  $n$  es el tamaño de la malla temporal y  $\epsilon$  es la tolerancia del método corrector, en este trabajo  $\epsilon = 1E - 6$ .

### 3.3.2 Truncamiento de dimensión para $\mathcal{H}_a$ y $\mathcal{H}_b$

Ambos espacios  $\mathcal{H}_a$  y  $\mathcal{H}_b$  son de dimensión infinita. Sin embargo, como aproximación, se utilizan subespacios que aceptan un número máximo de fotones. Dicho número máximo, corresponde al número de fotones que son posibles de generar por el modelo. Para el caso sin ruido térmico, basta entonces escoger subespacios que aceptan como máximo dos fotones, se tiene que aquellos subespacios son de dimensión tres (ver primer párrafo de (3.2)). Ahora, al añadir ruido térmico es necesario aumentar el número de fotones posibles de estar presentes en los modos del campo electromagnético, puesto que justamente, es aquel el efecto del ruido térmico, el ingreso de fotones a la cavidad de manera no controlada. Para elegir ahora en qué dimensión truncar éstos espacios, se escoge la utilizada en el caso sin ruido térmico, posteriormente se aumentan las dimensiones en una unidad y se comparan las curvas obtenidas con las anteriores, cuando la diferencia (en error relativo) es menor que una tolerancia escogida (1E-6 en este trabajo) se concluye.

Parte II

## Problema Matemático-Computacional

# **CAPÍTULO 4**

## **Estudio computacional**

## Capítulo 4. Estudio computacional

---

### 4.1. Algoritmos generales

Comenzando el estudio computacional, escribiremos los algoritmos del programa realizado en FORTRAN. Nos referiremos a sus secciones y subsecciones con la profundidad que sea necesaria.

El primer algoritmo, y el más genérico, al que llamaremos *Main* o *Principal* es:

---

#### Algoritmo 2: Main

---

**Entrada:** Parámetros

**Salida:** Datos de Cálculos

**1 Inicio**

**2** | Carga de parámetros y definición de variables;

**3** | Inicialización de  $\rho(0)$ ;

**4** | Integración y registro;

**5 Fin**

---

Dada esta descripción, la línea o sección de mayor importancia del programa *main* será la 4, esto dado que los tiempos de cómputo de primera sección es despreciable.

El algoritmo para la integración y registro de datos es el mismo que el expresado en Algoritmo 1, pero esta vez añadiendo el cálculo de las cantidades físicas deseadas de obtener a partir de  $\rho$  y el

registro de éstas. Esto lo describimos a continuación:

---

**Algoritmo 3:** Main: Integración y registro

---

**Entrada:**  $f, \rho_0, h, n, \{t_i\}_{i=0}^{n-1}, \epsilon$

**Salida:**  $\{Calculos(\rho_i)\}_{i=1}^{n-1}$

1 **Inicio**

2     **Para**  $i = 0$  *hasta*  $i = n - 1$  **Hacer**

3          $Calculos(\rho_i)$  y registro;

4          $\rho_{i+1}^{(0)} = \rho_i + hf(t_i, \rho_i);$

5          $\rho_{i+1}^{(1)} = \rho_i + \frac{h}{2} \left\{ f(t_i, \rho_i) + f(t_{i+1}, \rho_{i+1}^{(0)}) \right\};$

6          $error = errRel(\rho_{i+1}^{(1)}, \rho_{i+1}^{(0)});$

7          $k = 2;$

8         **Mientras**  $error > \epsilon$  **Hacer**

9              $\rho_{i+1}^{(k)} = \rho_i + \frac{h}{2} \left\{ f(t_i, \rho_i) + f(t_{i+1}, \rho_{i+1}^{(k-1)}) \right\};$

10             $error = errRel(\rho_{i+1}^{(k)}, \rho_{i+1}^{(k-1)});$

11             $k = k + 1;$

12         **Fin**

13          $\rho_{i+1} = \rho_{i+1}^{(k)};$

14     **Fin**

15 **Fin**

---

El método escogido para la resolución de nuestro problema, se encuentra dentro de un tipo general de métodos numéricos tales que, para resolver la tarea dada, calculan la derivada de una función de manera explícita (que corresponde a evaluar  $f$  en nuestro caso). Esta característica será la de mayor coste computacional en nuestro trabajo y la gran mayoría de las estrategias que sean estudiadas serán desarrolladas en torno a aquella característica. Por ende, del Algoritmo 3, describiremos el algoritmo para las subrutinas  $Calculos(\rho_i)$ ,  $error$  (error relativo) y  $f$  en los Algoritmos 4, 5 y 6 respectivamente<sup>7</sup>.

Estos algoritmos, que han sido escritos superficialmente, nos servirán de base en la siguiente sección para el análisis de las estrategias a seguir para una mayor eficiencia del programa Main.

---

<sup>7</sup>Recordar que estamos considerando  $h = 1$

---

**Algoritmo 4:** Integración y registro: *Calculos*( $\rho$ )

---

**Entrada:**  $\rho$   
**Salida:**  $\{\eta_i\}_{i=1}^{N_{at}+N_{mod}}$

- 1 **Inicio**
- 2     **Para**  $i = 0$  *hasta*  $N_{at} - 1$  **Hacer**
- 3          $\eta_{i+1} = \text{tr}(|i\rangle\langle i|\rho)$ ;
- 4     **Fin**
- 5     **Para**  $i = 1$  *hasta*  $N_{mod}$  **Hacer**
- 6          $\eta_{i+N_{at}} = \text{tr}(a_i^\dagger a_i \rho)$ ;
- 7     **Fin**
- 8 **Fin**

---



---

**Algoritmo 5:** Integración y registro: *errRel*

---

**Entrada:**  $\rho, \rho'$   
**Salida:** *error*

- 1 **Inicio**
- 2      $error = \frac{\|\rho - \rho'\|}{\|\rho\|}$ ;
- 3 **Fin**

---



---

**Algoritmo 6:** Integración y registro: *f*

---

**Entrada:**  $t, \rho$   
**Salida:**  $z = f(t, \rho)$

- 1 **Inicio**
- 2      $h = H(t)$ ;
- 3      $c = -i[h, \rho]$ ;
- 4      $l = \text{lindbladiano}(\rho)$ ;
- 5      $z = c + l$ ;
- 6 **Fin**

---

## 4.2. Estrategias de cómputo

Deseamos identificar, los algoritmos que más trabajo computacional pueden significar, sin embargo, antes de realizar estudios al respecto, debemos tener cierta seguridad, de haber escrito algoritmos que ya poseen eficiencia de manera independiente para cada subproblema presente. Tras haber hecho esto, podemos trabajar en el subproblema que mayor costo tenga, luego el siguiente, etc.

En vista de lo anterior, analizaremos primero los algoritmos generales escritos en la sección anterior. Recordemos que en aquella sección, señalamos que es a partir del Algoritmo 3 que debemos concentrar nuestra atención.

**Algoritmo 3 :** Una característica importante que salta a la vista, tras compararlo con el Algoritmo 1, algoritmo desde el cual el primero fue derivado. En el segundo, donde se describe la integración a realizar en forma general, la salida del programa es  $\{Y_i\}_{i=0}^{n-1}$ , que en el contexto de nuestro trabajo, es equivalente a escribir  $\{\rho_i\}_{i=0}^{n-1}$ . Sin embargo, en el Algoritmo 3 la salida es  $\{Calculos(\rho_i)\}_{i=0}^{n-1}$ , dado que no son, esencialmente las matrices  $\rho_i$  las que nos interesan, si no las cantidades físicas que son posibles de calcular según la ecuación (3.5). Esto lleva a dos estrategias inmediatas de cómputo:

1. Calcular en cada paso  $k$  la matriz de densidad  $\rho_{k+1}$ , luego realizar y registrar  $Calculos(\rho_{k+1})$ , finalmente hacer  $\rho_k = \rho_{k+1}$ , perdiendo los datos de la matriz anterior y yendo al siguiente paso. De esta forma, no es necesario almacenar todas las matrices de densidad, ahorrando cinco órdenes en cantidad de memoria, puesto que el número de iteraciones a realizar es  $2E5$ .
2. Calcular en cada paso  $k$  la matriz de densidad  $\rho_{k+1}$  en una nueva variable. Tras finalizar la integración. Realizar en paralelo cada  $Calculo(\rho_k)$ , de esta forma aprovechamos todo el potencial del número de hilos de procesamiento que se tengan a disposición, pero a costo de un gran uso en la memoria disponible.

**Algoritmos 4 y 6 :** Lo importante a destacar en estos casos, es que éstos hacen uso de los operadores descritos en la sección (3.2.3). La forma de éstos operadores, y el método a utilizar para calcular expresiones en los que éstos se encuentren involucrados, tendrá gran relevancia en vistas de lograr algoritmos eficientes. Estudiaremos esto en la sección (4.3).

**Algoritmo 5 :** Se destaca que la norma utilizada es la de Frobenius, pero más aún, los operadores involucrados en este cálculo son siempre hermitianos (diferencia de dos matrices de densidad, hermitianas). Ahora bien, sea  $\rho$  la matriz de coeficientes  $\rho_{ij} \in \mathbb{C}$ ,  $i, j = 1 \dots n$  que representa



(en la base canónica) al operador  $\hat{\rho} : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$  hermitiano arbitrario. La norma de Frobenius de este operador (al cuadrado) se calcula según:

$$\|\hat{\rho}\|_F^2 \equiv \text{tr}(\rho^\dagger \rho) \quad (4.1)$$

$$= \text{tr}(\rho^2) \quad (4.2)$$

$$= \text{tr}\left(\sum_{k=1}^n \rho_{ik} \rho_{kj}\right) \quad (4.3)$$

$$= \sum_{i,j=1}^n \left\{ \delta_{ij} \sum_{k=1}^n \rho_{ik} \rho_{kj} \right\} \quad (4.4)$$

$$= \sum_{i,j=1}^n \rho_{ij} \rho_{ji} \quad (4.5)$$

$$= \sum_{i,j=1}^n |\rho_{ij}|^2. \quad (4.6)$$

Esta propiedad reduce el número de operaciones necesarias<sup>8</sup> para el cálculo de la norma de  $\mathcal{O}(n^3)$  a  $\mathcal{O}(n^2)$ .

### 4.3. Cómputo eficiente de operadores involucrados

De la ecuación (3.10), (3.8) y (3.9), vemos que los operadores mencionados en la sección (3.2.3), son de gran importancia en los cómputos de la función  $f$  a integrar. A continuación estudiaremos la estructura de éstos operadores con el fin de reducir el número de operaciones necesarias para el cómputo del Hamiltoniano y el Lindbladiano. Comenzaremos<sup>9</sup> esto estudiando el operador  $\hat{a}$  definido en (3.1). Antes, recordemos que si  $C = A \otimes B$  es el producto tensorial de dos matrices  $A \in \mathcal{M}_{n \times m}(\mathbb{C})$ ,  $B \in \mathcal{M}_{l \times k}(\mathbb{C})$ , entonces los coeficientes  $c_{ij}$  de  $C$  pueden ser calculados según:

$$\begin{aligned} c_{ij} &= a_{i_1 j_1} \cdot b_{i_2 j_2}, & i &= 1 \dots n \cdot l, j = 1 \dots m \cdot k \\ i_1 &= \left\lceil \frac{i}{l} \right\rceil, & j_1 &= \left\lfloor \frac{j}{k} \right\rfloor \\ i_2 &= (i - 1) \text{ mód } l + 1, & j_2 &= (j - 1) \text{ mód } k + 1, \end{aligned} \quad (4.7)$$

sin embargo, tras una breve inspección, nos damos cuenta que éste producto tiene la útil representación:

<sup>8</sup>Por *número de operaciones* entenderemos el número de multiplicaciones más el número de sumas.

<sup>9</sup>Las variables utilizadas en éstos estudios han sido descritas en la sección (3.2.2).

$$C = \left( \begin{array}{c|c|c|c} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1m}B \\ \hline a_{21}B & a_{22}B & \vdots & a_{2m}B \\ \hline \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hline a_{n1}B & a_{n2}B & \cdots & a_{nm}B \end{array} \right). \quad (4.8)$$

#### 4.3.1 Operador $\hat{a}$ , de creación del modo $a$ .

El operador de creación del modo  $a$  que actúa de  $\mathcal{H}_a \rightarrow \mathcal{H}_a$ , es representado en la base canónica por la matriz de coeficientes  $a_{ij}$ ,  $i, j = 1 \dots N_a$  según:

$$a_{ij} = \begin{cases} \sqrt{i} & , j = i + 1, i = 1 \dots (N_a - 1) \\ 0, & , i > N_a - 1 \end{cases}. \quad (4.9)$$

Ahora bien, recordemos se define un operador  $\hat{a}$ , que actúa de  $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  según lo visto en (3.2.3). Para estudiar su estructura, utilizamos (4.8) siendo en este caso  $A$  una matriz identidad de orden  $n = N_{at}$  y  $B$  la matriz representante del operador de creación del modo  $a$ . Así, es inmediato que:

$$I^n \otimes B = \left( \begin{array}{cccc} B & \mathbb{O} & \cdots & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & B & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & \cdots & \mathbb{O} & B \end{array} \right). \quad (4.10)$$

Donde  $\mathbb{O}$  son matrices nulas del mismo tamaño que  $B$ , siendo el número de bloques de la diagonal igual a  $N_{at}$ .

Ahora, utilizando nuevamente (4.8), siendo esta vez  $B$  la matriz identidad, de orden  $n$ , y  $A$  una

matriz cuadrada cualquiera de orden  $m$ , se tiene que:

$$A \otimes I^n = \begin{pmatrix} \begin{array}{ccc|ccc|ccc} a_{11} & & & a_{12} & & & & a_{1m} & & \\ & \ddots & & & \ddots & & \dots & & \ddots & \\ & & a_{11} & & a_{12} & & & & a_{1m} & \\ \hline a_{21} & & & a_{22} & & & & a_{2m} & & \\ & \ddots & & & \ddots & & \dots & & \ddots & \\ & & a_{21} & & a_{22} & & & & a_{2m} & \\ \hline & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \\ \hline a_{m1} & & & a_{m2} & & & & a_{mm} & & \\ & \ddots & & & \ddots & & \dots & & \ddots & \\ & & a_{m1} & & a_{m2} & & & & a_{mm} & \end{array} \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Donde cada bloque es una matriz diagonal de orden  $n$ . Es claro que el número de bloques es  $m^2$ . Aplicando primero (4.10) con la identidad de orden  $n = N_{at}$  y  $A$  el operador de creación del modo  $a$ , y luego aplicando a este resultado la ecuación (4.11) con  $A = I \otimes \hat{a}$  y la identidad de orden  $N_a$ , se tiene que el operador definido en (3.1) puede ser representado, según sus coeficientes, como<sup>10</sup>:

$$(I^n \otimes \hat{a} \otimes I^l)_{i,j} = \begin{cases} \sqrt{\lceil \frac{i}{l} \rceil \text{ mód } m} & , j = i + l, i = 1 \dots (n \cdot m - 1) \cdot l \\ 0 & , \text{c.o.c.} \end{cases}, \quad (4.12)$$

con  $n \equiv N_{at}$ ,  $m \equiv N_a$  y  $l \equiv N_b$ .

### 4.3.2 Operador de creación generalizado

Siguiendo las mismas ideas de la sección anterior, es sencillo encontrar la expresión para el operador definido por:

$$\hat{a}_g^{k,m} := I^{n_1} \otimes I^{n_2} \otimes \dots \otimes I^{n_{g-1}} \otimes \hat{a}^k \otimes I^{n_{g+1}} \otimes \dots \otimes I^{n_m}, \quad (4.13)$$

con  $k$  siendo la dimensión del subespacio en el cual actúa el operador de creación  $\hat{a}$ . Entonces:

$$\left( \hat{a}_g^{k,m} \right)_{ij} = \begin{cases} \sqrt{\lceil \frac{i}{\Pi_2} \rceil \text{ mód } k} & , j = i + \Pi_2, i = 1 \dots (\Pi_1 - 1) \cdot \Pi_2 \\ 0 & , i > (\Pi_1 - 1) \cdot \Pi_2 \end{cases}, \quad (4.14)$$

<sup>10</sup>la sigla “c.o.c.” significa *cualquier otro caso*.

con  $\Pi_2 = \prod_{i=g+1}^{n_m} n_i$ ,  $\Pi_1 = k \cdot \prod_{i=1}^{g-1} n_i$ . Donde esta vez el espacio de Hilbert considerado en el cual actúa este operador es de dimensión  $\Pi_1 \cdot \Pi_2$ . Esta expresión será importante en vistas de generar un algoritmo que pueda ser utilizado en modelos más generales que el considerado en este trabajo.

### 4.3.3 Operador $\hat{a}_{ij}$ , de transiciones atómicas

Recordemos que el operador de transición del nivel atómico  $|j\rangle$  a  $|i\rangle$  está definido por la proyección:

$$|i\rangle\langle j|,$$

donde cada  $|i\rangle$  es un vector perteneciente a la base canónica, como fue visto en (3.2). Luego, esta proyección puede ser representada según la composición:

$$e_i \cdot e_j^t,$$

que corresponde a una matriz de cuadrada de orden  $N_{at}$  tal que todos sus elementos son nulos salvo el ubicado en la  $i$ -ésima fila y la  $j$ -ésima columna. Es decir los coeficientes  $a_{kl}$  de la matriz que representa al operador  $\hat{a}_{ij}$  pueden ser descritos por:

$$a_{kl} = \delta_{kj}\delta_{li}, \quad k, l = 1 \dots N_{at}. \quad (4.15)$$

Ahora, repitiendo el análisis de la sección anterior para productos del tipo  $A \otimes I^n$ , esta vez con  $A$  descrito según (4.15), se tendrá que la matriz representante de (3.2) puede ser descrita por:

$$\hat{a}_{ij} \equiv |i\rangle\langle j| \otimes I_a \otimes I_b = \begin{pmatrix} \mathbb{O}_{11}^m & \mathbb{O}_{12}^m & \dots & \mathbb{O}_{1n}^m \\ \mathbb{O}_{21}^m & \mathbb{O}_{22}^m & \dots & \mathbb{O}_{2n}^m \\ \vdots & \vdots & I_{ji}^m & \vdots \\ \mathbb{O}_{n1}^m & \mathbb{O}_{n2}^m & \dots & \mathbb{O}_{nn}^m \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

con  $m = N_a \cdot N_b$  y  $n = N_{at}$ . Es decir, éstas matrices están compuestas por  $n^2$  bloques cuadrados de orden  $m$ , de los cuales todos son nulos salvo el bloque de la fila  $j$ , columna  $i$  que corresponde a una matriz identidad de orden  $m$ . Luego, los coeficientes  $a_{kl} : k, l = 1 \dots n \cdot m = \dim t$  de esta matriz, pueden ser descritos por:

$$c_{kl} = \begin{cases} \delta_{kl}, & k = (j-1) \cdot n + 1 \dots j \cdot n, l = (i-1) \cdot m + 1 \dots i \cdot m \\ 0, & \text{c.o.c.} \end{cases}. \quad (4.17)$$

#### 4.3.4 Operador de transiciones atómicas generalizado

Deseamos ahora encontrar expresiones para los elementos no nulos de la matriz que represente al nuevo operador, definido por:

$$\hat{a}_{ij} := |i\rangle\langle j| \otimes I^{n_1} \otimes I^{n_2} \otimes \dots \otimes I^{n_d}. \quad (4.18)$$

En este caso, el esquema de la matriz será semejante al dado por (4.16), la diferencia radicaré en que el orden  $m$  del esquema anterior, esta vez corresponderá al producto total de las dimensiones de los demás subespacios no asociados al átomo en cuestión (modos del campo electromagnético, otros átomos, etc.), es decir, en este caso  $m = \prod_{i=1}^d n_i$ . Esta vez, los coeficientes de las matrices representantes están dados por:

$$c_{kl} = \begin{cases} \delta_{kl}, & k = (j-1) \cdot \Pi + 1 \dots j \cdot \Pi, l = (i-1) \cdot \Pi + 1 \dots i \cdot \Pi \\ 0, & \text{c.o.c.} \end{cases}. \quad (4.19)$$

con  $k, l = 1 \dots N_{at} \cdot \Pi$  y  $\Pi = \prod_{i=1}^d n_i$ .

#### 4.4. Cómputo eficiente de operadores compuestos

De las expresiones (4.12) y (4.19) podemos apreciar que éstas matrices cumplen con la propiedad de ser matrices de baja *densidad* (o *sparse*), en el sentido que la proporción de elementos no nulos, sobre el total de elementos, es baja. De hecho, siendo  $dimt$  la dimensión del espacio mayor y por ende el orden de los operadores generalizados definidos en la sección anterior, se tiene que para el caso del operador de creación  $\hat{a}$  definido en (4.3.2), entonces su densidad  $\rho_{\hat{a}}$  cumple:

$$\rho_{\hat{a}} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{dimt}\right),$$

mientras que para el operador  $\hat{a}_{ij}$  definido en (4.3.4) su densidad cumple:

$$\rho_{\hat{a}_{ij}} = \frac{1}{N_{at} \cdot dimt}.$$

Por ejemplo, para el caso más sencillo estudiado, en el cual  $dimt = 45$ , se tiene  $\hat{a}$  tiene una densidad del 2.1 % y la densidad de  $\hat{a}_{ij}$  es de 0.4 %.

La baja densidad de éstos operadores y el poseer una estructura bien definida, nos permitirá escribir

algoritmos que calculen expresiones algebraicas (en las que éstos operadores participen) con mayor eficiencia, al no ser necesario realizar todas las operaciones que se realizarían de no haber estructura y no poseer baja densidad. Esto lo analizamos con mayor profundidad a continuación, primero definiendo las siguientes variables de importancia, indicando al final entre paréntesis los valores particulares para este trabajo.

- $N$  :      Número de espacios componentes del espacio mayor. ( $N = 3$ ).
- $n_i$  :       $i = 1 \dots N$ . Dimensión del  $i$ -ésimo espacio. ( $n_1 = 5$ ).
- $\Pi_1^g$  :      Equivalente a  $\prod_{i=1}^{g-1} n_i$  con  $g = 2 \dots N$ .
- $\Pi_2^g$  :      Equivalente a  $\prod_{i=g+1}^N n_i$ .
- $T^g$  :      Equivalente a  $(n_g - 1)\Pi_2^g$ .
- $\Pi_3^g$  :      Equivalente a  $T^g + \Pi_2^g$ .
- $\Pi$  :      Equivalente a  $\prod_{i=2}^N n_i$ .
- $ord$  :      Arreglo de enteros que especifica la dimensión de cada subespacio.

A continuación, describiremos esquemas de cómputo para diferentes expresiones de interés. Donde  $\rho$  será una matriz compleja de orden  $dimt$  con coeficientes  $\rho_{ij}$ ,  $i, j = 1 \dots dimt$ . En todos los casos a presentar se tiene que el número original de operaciones a realizar (esto es sin aprovechar las estructuras de los operadores) es

$$\mathcal{O}(dimt^3).$$

#### 4.4.1 Expresiones tipo $\hat{\rho} \rightarrow \hat{a}\hat{\rho}$

Con  $\hat{a} \equiv \hat{a}_g^{n_g, N}$ , definido en (4.3.2). A continuación presentamos brevemente esquematizaciones de cómo operan estas expresiones sobre  $\rho$ , junto con el algoritmo a utilizar dado el esquema, esto lo haremos a partir de lo expuesto en (4.18) y (4.19).

**Expresiones  $\hat{a}\hat{\rho}$  y  $\hat{a}^\dagger\hat{\rho}$ :**

En el primer caso  $\hat{a}\hat{\rho}$ ,  $\rho$  es dividida en *sub-matrices fila*, esquemáticamente:

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ B_1 \\ - \quad - \quad - \\ \vdots \\ B_2 \\ - \quad - \quad - \\ \vdots \\ - \quad - \quad - \\ \vdots \\ B_n \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

Donde los  $n = \Pi_1$  bloques esta vez poseen  $T^g$  filas y  $dimt$  columnas, es decir abarcan todos las columnas de  $\rho$ . Los puntos suspensivos justo debajo de los bloques indican elementos que no serán considerados y serán nulos en el resultado, cuyo esquema es:

$$\begin{pmatrix} B_1 \\ \vdots \\ - \quad - \quad - \\ B_2 \\ \vdots \\ - \quad - \quad - \\ \vdots \\ - \quad - \quad - \\ B_n \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

Es decir, se realiza un movimiento hacia arriba de los bloques seleccionados. Además si  $M = B_i$  y  $S = B_i$  entonces las relaciones entre sus coeficientes son:

$$M_{kl} = \gamma_k S_{kl}, \quad k = 1 \dots T^g, l = 1 \dots dimt, \quad (4.22)$$

con

$$\gamma_k = \sqrt{\left\lceil \frac{k}{\Pi_2^g} \right\rceil} \text{ mód } n_g. \quad (4.23)$$

Escribimos a continuación el algoritmo que realiza el cómputo de esta expresión:

---

**Algoritmo 7:** arMod

---

**Entrada:**  $\rho$ ,  $id$ : Matriz densidad, n° subespacio asociado al modo.

**Salida:**  $r = \hat{a}\rho$

```

1 Inicio
2    $k = ord[id];$ 
3    $pi1 = producto(ord[1 : id - 1]);$ 
4    $pi2 = producto(ord[id + 1 : dimt]);$ 
5    $T = (k - 1) * pi2;$ 
6    $pi3 = T + pi2;$ 
7    $r = ceros(dimt);$ 
8   Para  $bi = 0$  hasta  $(pi1 - 1) \cdot pi3$ ;  $bi += pi3$  Hacer
9     Para  $ei = 1$  hasta  $T$  Hacer
10      Para  $ej = 1$  hasta  $dimt$  Hacer
11         $\gamma = \sqrt{\left\lceil \frac{ei}{pi2} \right\rceil} \text{ mód } k;$ 
12         $r[bi + ei, ej] = \gamma \cdot \rho[pi2 + bi + ei, ej];$ 
13      Fin
14    Fin
15  Fin
16 Fin
```

---

El número de operaciones realizado por el algoritmo es

$$\mathcal{O}\left(dimt^2 \left(\frac{n_g - 1}{n_g}\right)\right) = \mathcal{O}(dimt^2).$$

El caso  $\hat{a}^\dagger \rho$  es análogo al anterior, salvo que esta vez el movimiento de los bloques es hacia abajo.

**Expresiones  $\hat{\rho}\hat{a}$  y  $\hat{\rho}\hat{a}^\dagger$ :**

En este caso,  $\rho$  es dividida en *sub-matrices columna*, esquemáticamente:

$$\rho = \left( \begin{array}{ccc|ccc|ccc} B_1 & \cdots & & B_2 & \cdots & & \cdot & \cdot & \cdot & & B_n & \cdots \end{array} \right), \quad (4.24)$$



donde los  $B_i$  son sub-matrices de  $dimt$  filas y  $T^g$  columnas,  $n = \Pi_1$ , y los puntos suspensivos a la derecha de cada bloque denotan columnas que no son consideradas. Así el resultado se puede describir por:

$$\left( \cdots \quad B_1 \mid \cdots \quad B_2 \mid \cdots \mid \cdots \mid \cdots \quad B_n \right), \quad (4.25)$$

Es decir, se mueven los bloques hacia la derecha. Además si  $M = B_i$  y  $S = B_i$  entonces las relaciones entre sus coeficientes son:

$$M_{kl} = \gamma_l S_{kl}, \quad k = 1 \dots dimt, l = 1 \dots T^g, \quad (4.26)$$

con

$$\gamma_l = \sqrt{\left\lceil \frac{l}{\Pi_2^g} \right\rceil \bmod n_g}. \quad (4.27)$$

Escribimos a continuación el algoritmo que realiza el cómputo de esta expresión:

---

**Algoritmo 8:** raMod

---

**Entrada:**  $\rho$ ,  $id$ : Matriz densidad, n° subespacio asociado al modo.

**Salida:**  $r = \rho \hat{a}$

```

1  Inicio
2  |    $k = ord[id]$ ;
3  |    $pi1 = producto(ord[1 : id - 1])$ ;
4  |    $pi2 = producto(ord[id + 1 : dimt])$ ;
5  |    $T = (k - 1) * pi2$ ;
6  |    $pi3 = T + pi2$ ;
7  |    $r = ceros(dimt)$ ;
8  |   Para  $bj = 0$  hasta  $(pi1 - 1) \cdot pi3$ ;  $bi+ = pi3$  Hacer
9  |   |   Para  $ei = 1$  hasta  $dimt$  Hacer
10  |   |   |   Para  $ej = 1$  hasta  $T$  Hacer
11  |   |   |   |    $\gamma = \sqrt{\left\lceil \frac{ej}{pi2} \right\rceil \bmod k}$ ;
12  |   |   |   |    $r[ei, pi2 + bj + ej] = \gamma \cdot \rho[ei, bj + ej]$ ;
13  |   |   |   Fin
14  |   |   Fin
15  |   Fin
16 Fin
```

---

El número de operaciones realizado por el algoritmo es

$$\mathcal{O}\left(\dim t^2 \left(\frac{n_g - 1}{n_g}\right)\right) = \mathcal{O}(\dim t^2).$$

El caso  $\rho \hat{a}^\dagger$  es análogo al anterior, salvo que esta vez el movimiento de los bloques es hacia la izquierda.

#### 4.4.2 Expresiones tipo $\hat{\rho} \rightarrow \hat{a}_{ij} \hat{\rho}$

Con  $\hat{a}_{ij}$  definido en (4.3.4). Esta vez, a partir de (4.12) podemos deducir esquemas simples que caractericen la acción del operador de transiciones generalizado en las distintas expresiones consideradas en el Lindbladiano.

**Expresión  $\hat{a}_{ij} \hat{\rho}$ :**

Esta vez,  $\rho$  será dividida en  $N_{at}$  bloques fila, de  $\Pi$  filas y  $\dim t$  columnas, es decir:

$$\rho = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_\Pi \end{pmatrix}. \quad (4.28)$$

Y resultado es esquematizado por:

$$i\text{-ésimo}\left\{ \begin{pmatrix} \dots \\ B_j \\ \dots \end{pmatrix} \right\}.$$

Por ejemplo si  $N_a = 3$  y escribimos:

$$\rho = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix},$$

entonces:

$$\hat{a}_{13} \rho = \begin{pmatrix} B_3 \\ \mathbb{O}^\Pi \\ \mathbb{O}^\Pi \end{pmatrix}.$$

Escribimos a continuación el algoritmo que realiza el cómputo de esta expresión:

---

**Algoritmo 9:** arAt

---

**Entrada:**  $\rho, i, j$ .

**Salida:**  $r = \hat{a}_{ij} \rho \hat{a}_{ij}^\dagger$

1 **Inicio**

2      $pi = \text{producto}(\text{ord}[2 : \text{dimt}]);$

3      $i1 = i \cdot pi;$

4      $j1 = j \cdot pi;$

5      $r = \text{ceros}(pi);$

6     **Para**  $ei = 1$  **hasta**  $pi$  **Hacer**

7         **Para**  $ej = 1$  **hasta**  $\text{dimt}$  **Hacer**

8              $r[i1 + ei, ej] = \text{rho}[j1 + ei, j1 + ej];$

9             **Fin**

10         **Fin**

11 **Fin**

---

El número de *asignaciones* realizado por el algoritmo es

$$\frac{\text{dimt}^2}{N_{at}} = \mathcal{O}(\text{dimt}^2).$$

El caso  $\hat{a}_{ij}^\dagger \hat{\rho}$  es igual al anterior, pero intercambiando  $i$  po  $j$ , esto es inmediato dado que  $(|i\rangle\langle j|)^\dagger = |j\rangle\langle i|$ .

**Expresión  $\hat{\rho} \hat{a}_{ij}$ :**

Esta vez la esquematización de la forma de escoger los elementos de  $\rho$  viene dada por los  $N_{at}$  bloques columna de  $\text{dimt}$  filas y  $\Pi$  columnas:

$$\rho = \left( \begin{array}{cccc} B_1 & B_2 & \cdots & B_\Pi \end{array} \right). \quad (4.29)$$

Y resultado es esquematizado por:

$$\left( \begin{array}{ccc} \cdots & \overbrace{B_i}^{j\text{-ésimo}} & \cdots \end{array} \right).$$

Por ejemplo si  $N_a = 3$  y escribimos:

$$\rho = \begin{pmatrix} B_1 & B_2 & B_3 \end{pmatrix},$$

entonces:

$$\rho \hat{a}_{13} = \begin{pmatrix} \mathbb{O}^\Pi & \mathbb{O}^\Pi & B_1 \end{pmatrix}.$$

Escribimos a continuación el algoritmo que realiza el cómputo de esta expresión:

---

**Algoritmo 10:** raAt

---

**Entrada:**  $\rho, i, j$ .

**Salida:**  $r = \hat{a}_{ij} \rho \hat{a}_{ij}^\dagger$

**1 Inicio**

2	$pi = \text{producto}(\text{ord}[2 : \text{dimt}]);$
3	$i1 = i \cdot pi;$
4	$j1 = j \cdot pi;$
5	$r = \text{ceros}(pi);$
6	<b>Para</b> $ei = 1$ <i>hasta</i> $\text{dimt}$ <b>Hacer</b>
7	<b>Para</b> $ej = 1$ <i>hasta</i> $pi$ <b>Hacer</b>
8	$r[ei, j1 + ej] = \text{rho}[ei, i1 + ej];$
9	<b>Fin</b>
10	<b>Fin</b>

**11 Fin**

---

El número de *asignaciones* realizado por el algoritmo es

$$\frac{\text{dimt}^2}{N_{at}} = \mathcal{O}(\text{dimt}^2).$$

También, el caso  $\hat{\rho} \hat{a}_{ij}^\dagger$  equivalente al primero pero intercambiando  $i$  por  $j$ .

#### 4.4.3 Expresiones tipo $\hat{\rho} \rightarrow \hat{a} \hat{\rho} \hat{a}^\dagger$

Estos casos son una continuación de lo realizado en (4.4.1).



El efecto entonces de esta transformación es mover ciertos bloques de  $\rho$  hacia arriba y la izquierda, multiplicándolos por los  $\gamma_{kl}$  y anulando todos los demás elementos no considerados. Podemos ahora escribir el algoritmo que realice los respectivos cálculos de esta expresión:

---

**Algoritmo 11:** *aratMod*

---

**Entrada:**  $\rho, id$ : Matriz densidad, n° subespacio asociado al modo.

**Salida:**  $r = \hat{a}\rho\hat{a}^\dagger$

```

1 Inicio
2    $k = \text{ord}[id];$ 
3    $pi1 = \text{producto}(\text{ord}[1 : id - 1]);$ 
4    $pi2 = \text{producto}(\text{ord}[id + 1 : \text{dimt}]);$ 
5    $T = (k - 1) * pi2;$ 
6    $pi3 = T + pi2;$ 
7    $r = \text{ceros}(\text{dimt});$ 
8   Para  $\{bi, bj\} = 0$  hasta  $(pi1 - 1) \cdot pi3; \{bi, bj\} + = pi3$  Hacer
9     Para  $\{ei, ej\} = 1$  hasta  $T$  Hacer
10        $\gamma = \sqrt{\left(\left[\frac{ei}{pi2}\right] \bmod k\right) \left(\left[\frac{ej}{pi2}\right] \bmod k\right)};$ 
11        $r[bi + ei, bi + ej] = \gamma \cdot \rho[pi2 + bi + ej, pi2 + bj + ej];$ 
12     Fin
13   Fin
14 Fin
```

---

Así, el número de operaciones baja ahora a:

$$\mathcal{O} \left( \text{dimt}^2 \left( \frac{n_g - 1}{n_g} \right)^2 \right) = \mathcal{O}(\text{dimt}^2).$$

**Expresión**  $\hat{a}^\dagger \hat{\rho} \hat{a}$ :

Esta expresión tiene las mismas características que la anterior, con la salvedad que esta vez los bloques son definidos desde arriba a la izquierda y desplazados hacia abajo a la derecha. Esquemáticamente

la selección es:

$$\rho = \left( \begin{array}{ccc|ccc|ccc} B_{11} & \cdots & & B_{12} & \cdots & & \cdots & B_{1n} & \cdots \\ \vdots & \ddots & & \vdots & \ddots & & & \vdots & \ddots \\ \hline B_{21} & \cdots & & B_{21} & \cdots & & \cdots & B_{2n} & \cdots \\ \vdots & \ddots & & \vdots & \ddots & & & \vdots & \ddots \\ \hline & \vdots & & & \vdots & & & & \vdots \\ \hline B_{n1} & \cdots & & B_{n2} & \cdots & & \cdots & B_{nn} & \cdots \\ \vdots & \ddots & & \vdots & \ddots & & & \vdots & \ddots \end{array} \right), \quad (4.33)$$

mientras que el resultado de la expresión es:

$$\left( \begin{array}{ccc|ccc|ccc} \ddots & \vdots & & \ddots & \vdots & & \cdots & \ddots & \vdots \\ \cdots & \mathcal{B}_{11} & \cdots & \mathcal{B}_{12} & \cdots & & \cdots & \mathcal{B}_{1n} & \cdots \\ \hline \ddots & \vdots & & \ddots & \vdots & & & \ddots & \vdots \\ \cdots & \mathcal{B}_{21} & \cdots & \mathcal{B}_{22} & \cdots & & \cdots & \mathcal{B}_{2n} & \cdots \\ \hline & \vdots & & & \vdots & & & & \vdots \\ \hline \ddots & \vdots & & \ddots & \vdots & & & \ddots & \vdots \\ \cdots & \mathcal{B}_{n1} & \cdots & \mathcal{B}_{n2} & \cdots & & \cdots & \mathcal{B}_{nn} & \cdots \end{array} \right). \quad (4.34)$$

Siendo la relación entre los bloques  $B_{ij}$  y  $\mathcal{B}_{ij}$  la misma que la definida en la sección anterior. El algoritmo de cómputo es entonces:

---

**Algoritmo 12:** atraMod

---

**Entrada:**  $\rho$ ,  $id$ : Matriz densidad, n° subespacio asociado al modo.

**Salida:**  $r = \hat{a}^\dagger \rho \hat{a}$

```

1 Inicio
2    $k = \text{ord}[id];$ 
3    $pi1 = \text{producto}(\text{ord}[1 : id - 1]);$ 
4    $pi2 = \text{producto}(\text{ord}[id + 1 : dimt]);$ 
5    $T = (k - 1) * pi2;$ 
6    $pi3 = T + pi2;$ 
7    $r = \text{ceros}(dimt);$ 
8   Para  $\{bi, bj\} = 0$  hasta  $(pi1 - 1) \cdot pi3; \{bi, bj\} + = pi3$  Hacer
9     Para  $\{ei, ej\} = 1$  hasta  $T$  Hacer
10        $\gamma = \sqrt{\left(\left\lceil \frac{ei}{pi2} \right\rceil \bmod k\right) \left(\left\lceil \frac{ej}{pi2} \right\rceil \bmod k\right)};$ 
11        $r[pi2 + bi + ei, pi2 + bi + ej] = \gamma \cdot \rho[bi + ej, bj + ej];$ 
12     Fin
13   Fin
14 Fin
```

---

Siendo, también en este caso, el número de operaciones igual a:

$$\mathcal{O} \left( dimt^2 \left( \frac{n_g - 1}{n_g} \right)^2 \right) = \mathcal{O} (dimt^2) .$$

**Expresión  $\hat{a}^\dagger \hat{a} \rho$ :**

En este caso, la definición de los bloques la misma que la utilizada en la sección (4.4.1). Y podemos observar de aquella sección que esta vez no habrá movimiento de los bloques, la única diferencia estará entonces en los coeficientes que definen la transformación de los bloques. Así el esquema para



$\rho$  es el mismo que (4.20), pero el resultado es:

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ \mathcal{B}_1 \\ \vdots \\ \mathcal{B}_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \mathcal{B}_n \end{pmatrix}. \quad (4.35)$$

Definiendo nuevamente  $M = \mathcal{B}_i$  y  $S = B_i$ , entonces las nuevas relaciones entre sus coeficientes son:

$$M_{kl} = \gamma_k S_{kl}, \quad k = 1 \dots T^g, l = 1 \dots dimt, \quad (4.36)$$

y:

$$\gamma_k = \left[ \frac{k}{\Pi_2^g} \right] \text{ mód } n_g. \quad (4.37)$$

Esta vez, el algoritmo para el cómputo de la expresión es:

---

**Algoritmo 13:** atarMod
 

---

**Entrada:**  $\rho$ ,  $id$ : Matriz densidad, n° subespacio asociado al modo.

**Salida:**  $r = \hat{a}^\dagger \hat{a} \rho$

```

1 Inicio
2    $k = ord[id];$ 
3    $pi1 = producto(ord[1 : id - 1]);$ 
4    $pi2 = producto(ord[id + 1 : dimt]);$ 
5    $T = (k - 1) * pi2;$ 
6    $pi3 = T + pi2;$ 
7    $r = ceros(dimt);$ 
8   Para  $bi = 0$  hasta  $(pi1 - 1) \cdot pi3$ ;  $bi += pi3$  Hacer
9     Para  $ei = 1$  hasta  $T$  Hacer
10      Para  $ej = 1$  hasta  $dimt$  Hacer
11         $\gamma = \left\lceil \frac{ei}{pi2} \right\rceil \text{ mód } k;$ 
12         $r[pi2 + bi + ei, ej] = \gamma \cdot \rho[pi2 + bi + ei, ej];$ 
13      Fin
14    Fin
15  Fin
16 Fin
    
```

---

Siendo ahora el número de operaciones:

$$\mathcal{O} \left( dimt^2 \left( \frac{n_g - 1}{n_g} \right) \right) = \mathcal{O} (dimt^2).$$

**Expresión**  $\hat{\rho} \hat{a}^\dagger \hat{a}$ :

En este caso, los bloques se definen como *sub-matrices column*, desde el lado derecho de  $\rho$ . Esquemáticamente la selección desde los elementos de  $\rho$  es:

$$\rho = \left( \begin{array}{ccccccc} \cdots & B_1 & \vdots & \cdots & B_2 & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & B_n \end{array} \right), \quad (4.38)$$

donde los  $B_i$  son sub-matrices de  $dimt$  filas y  $T$  columnas,  $n = \Pi_1$ , y los puntos suspensivos a la derecha de cada bloque denotan columnas que no son consideradas. Así el resultado se puede describir

por:

$$\left( \begin{array}{ccccccc} \dots & \mathcal{B}_1 & \vdots & \dots & \mathcal{B}_2 & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \mathcal{B}_n \end{array} \right), \quad (4.39)$$

Además si  $M = \mathcal{B}_i$  y  $S = B_i$  entonces las relaciones entre sus coeficientes son:

$$M_{kl} = \gamma_l S_{kl}, \quad k = 1 \dots \dim t, l = 1 \dots T^g, \quad (4.40)$$

y:

$$\gamma_l = \left\lfloor \frac{l}{\Pi_2^g} \right\rfloor \text{ mód } n_g. \quad (4.41)$$

Finalmente el algoritmo de cómputo, esta vez es:

---

**Algoritmo 14:** rataMod
 

---

**Entrada:**  $\rho, id$ : Matriz densidad, n° subespacio asociado al modo.

**Salida:**  $r = \rho \hat{a}^\dagger \hat{a}$

**1 Inicio**

**2**      $k = \text{ord}[id];$

**3**      $pi1 = \text{producto}(\text{ord}[1 : id - 1]);$

**4**      $pi2 = \text{producto}(\text{ord}[id + 1 : \dim t]);$

**5**      $T = (k - 1) * pi2;$

**6**      $pi3 = T + pi2;$

**7**      $r = \text{ceros}(\dim t);$

**8**     **Para**  $bj = 0$  *hasta*  $(pi1 - 1) \cdot pi3; bj+ = pi3$  **Hacer**

**9**         **Para**  $ei = 1$  *hasta*  $\dim t$  **Hacer**

**10**             **Para**  $ej = 1$  *hasta*  $T$  **Hacer**

**11**                  $\gamma = \left\lfloor \frac{ej}{pi2} \right\rfloor \text{ mód } k;$

**12**                  $r[ei, pi2 + bj + ej] = \gamma \cdot \rho[ei, pi2 + bj + ej];$

**13**             **Fin**

**14**         **Fin**

**15**     **Fin**

**16 Fin**

---

Y el número de operaciones necesarias es:

$$\mathcal{O} \left( \dim t^2 \left( \frac{n_g - 1}{n_g} \right) \right) = \mathcal{O}(\dim t^2).$$

**Expresión  $\hat{\rho}\hat{a}\hat{a}^\dagger$ :**

Utilizando el mismo esquema que en (4.24), esta vez el resultado se puede describir por:

$$\left( \begin{array}{cccc} \mathcal{B}_1 & \cdots & \vdots & \mathcal{B}_2 & \cdots & \vdots & \cdot & \cdot & \cdot & \vdots & \mathcal{B}_n & \cdots \end{array} \right), \quad (4.42)$$

Además si  $M = \mathcal{B}_i$  y  $S = B_i$  entonces las relaciones entre sus coeficientes son:

$$M_{kl} = \gamma_l S_{kl}, \quad k = 1 \dots dimt, l = 1 \dots T^g, \quad (4.43)$$

y:

$$\gamma_k = \left\lceil \frac{k}{\Pi_2^g} \right\rceil \text{ mód } n_g. \quad (4.44)$$

Finalmente el algoritmo de cómputo, esta vez es:

---

**Algoritmo 15:** raatMod

---

**Entrada:**  $\rho, id$ : Matriz densidad, n° subespacio asociado al modo.

**Salida:**  $r = \hat{\rho}\hat{a}\hat{a}^\dagger$

1 **Inicio**

2      $k = ord[id];$

3      $pi1 = producto(ord[1 : id - 1]);$

4      $pi2 = producto(ord[id + 1 : dimt]);$

5      $T = (k - 1) * pi2;$

6      $pi3 = T + pi2;$

7      $r = ceros(dimt);$

8     **Para**  $bj = 0$  *hasta*  $(pi1 - 1) \cdot pi3; bj += pi3$  **Hacer**

9         **Para**  $ei = 1$  *hasta*  $dimt$  **Hacer**

10             **Para**  $ej = 1$  *hasta*  $T$  **Hacer**

11                  $\gamma = \left\lceil \frac{ej}{pi2} \right\rceil \text{ mód } k;$

12                  $r[ei, bj + ej] = \gamma \cdot \rho[ei, bj + ej];$

13             **Fin**

14         **Fin**

15     **Fin**

16 **Fin**

---

Y el número de operaciones necesarias es:

$$\mathcal{O}\left(\dim t^2 \left(\frac{n_g - 1}{n_g}\right)\right) = \mathcal{O}(\dim t^2).$$

#### 4.4.4 Expresiones tipo $\hat{\rho} \rightarrow \hat{a}_{ij}\hat{\rho}\hat{a}_{ij}^\dagger$

Esta vez se continuará lo realizado en (4.4.2). Comenzaremos con:

**Expresión  $\hat{a}_{ij}\hat{\rho}\hat{a}_{ij}^\dagger$ :**

Esta vez,  $\rho$  será dividido en  $N_{at}^2$  bloques cuadrados del mismo orden  $\Pi$ . Así,  $\rho$  es esquematizado según:

$$\rho = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1\Pi} \\ B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2\Pi} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{\Pi 1} & B_{\Pi 2} & \cdots & B_{\Pi\Pi} \end{pmatrix}. \quad (4.45)$$

Y el resultado de  $\hat{a}_{ij}\hat{\rho}\hat{a}_{ij}^\dagger$  es esquematizado según:

$$i\text{-ésimo} \left\{ \begin{matrix} \overbrace{\vdots}^{i\text{-ésimo}} \\ \cdots & B_{jj} & \cdots \\ \vdots \end{matrix} \right\}. \quad (4.46)$$

Es decir, el bloque  $B_{jj}$  es trasladado a la posición del bloque  $B_{ii}$  y el resto de la matriz resultado son elementos nulos. Por ejemplo, si  $N_{at} = 3$ , podemos dividir  $\rho$  en los nueve bloques cuadrados de orden  $\Pi$ :

$$\rho = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} \end{pmatrix},$$

entonces:

$$\hat{a}_{13}\hat{\rho}\hat{a}_{13}^\dagger = \begin{pmatrix} B_{33} & \mathbb{O}^\Pi & \mathbb{O}^\Pi \\ \mathbb{O}^\Pi & \mathbb{O}^\Pi & \mathbb{O}^\Pi \\ \mathbb{O}^\Pi & \mathbb{O}^\Pi & \mathbb{O}^\Pi \end{pmatrix}.$$

El algoritmo que realiza estos cálculos es descrito a continuación:

---

**Algoritmo 16:** arAtAt

---

**Entrada:**  $\rho, i, j$ .

**Salida:**  $r = \hat{a}_{ij}\rho\hat{a}_{ij}^\dagger$

```

1 Inicio
2    $pi = \text{producto}(\text{ord}[2 : \text{dimt}]);$ 
3    $i1 = i \cdot pi;$ 
4    $j1 = j \cdot pi;$ 
5    $r = \text{ceros}(pi);$ 
6   Para  $\{ei, ej\} = 1$  hasta  $pi$  Hacer
7      $r[i1 + ei, i1 + ej] = \text{rho}[j1 + ei, j1 + ej];$ 
8   Fin
9 Fin
```

---

**Expresión**  $\hat{a}_{ij}^\dagger \hat{a}_{ij} \hat{\rho}$

Utilizando nuevamente el esquema (4.28), esta vez el resultado es esquematizado por:

$$j\text{-ésimo} \left\{ \begin{pmatrix} \dots \\ B_j \\ \dots \end{pmatrix} \right.$$

Por ejemplo si  $N_a = 3$  y escribimos:

$$\rho = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix},$$

entonces:

$$\rho \hat{a}_{13}^\dagger \hat{a}_{13} = \begin{pmatrix} \mathbb{O}^\Pi \\ \mathbb{O}^\Pi \\ B_3 \end{pmatrix}.$$

Describimos ahora el algoritmo que realiza éstos cálculos:

---

**Algoritmo 17:** atarAt

---

**Entrada:**  $\rho, i, j$ .

**Salida:**  $r = \hat{a}_{ij}^\dagger \hat{a}_{ij} \rho$

1 **Inicio**

2      $pi = \text{producto}(\text{ord}[2 : \text{dimt}]);$

3      $j1 = j \cdot pi;$

4      $r = \text{ceros}(pi);$

5     **Para**  $ei = 1$  *hasta*  $pi$  **Hacer**

6         **Para**  $ej = 1$  *hasta*  $\text{dimt}$  **Hacer**

7              $r[j1 + ei, j1 + ej] = \text{rho}[j1 + ei, j1 + ej];$

8         **Fin**

9     **Fin**

10 **Fin**

---

**Expresión**  $\hat{\rho} \hat{a}_{ij}^\dagger \hat{a}_{ij}$

Utilizando nuevamente el esquema (4.29), el resultado estará dado por:

$$\left( \cdots \overbrace{B_j}^{j\text{-ésimo}} \cdots \right).$$

Es decir, en este caso no hay movimiento del bloque, sólo anulación de todo el resto de los elementos. Por ejemplo si  $N_a = 3$  y escribimos:

$$\rho = \left( \begin{array}{ccc} B_1 & B_2 & B_3 \end{array} \right),$$

entonces:

$$\hat{a}_{13}^\dagger \hat{a}_{13} \rho = \left( \begin{array}{ccc} \mathbb{O}^\Pi & \mathbb{O}^\Pi & B_3 \end{array} \right).$$

A continuación se presenta el algoritmo que genera éstos cálculos:

---

**Algoritmo 18:** *rataAt*

---

**Entrada:**  $\rho, i, j$ .

**Salida:**  $r = \rho \hat{a}_{ij}^\dagger \hat{a}_{ij}$

1 **Inicio**

2      $pi = \text{producto}(\text{ord}[2 : \text{dimt}]);$

3      $j1 = j \cdot pi;$

4      $r = \text{ceros}(pi);$

5     **Para**  $ei = 1$  *hasta*  $\text{dimt}$  **Hacer**

6         **Para**  $ej = 1$  *hasta*  $pi$  **Hacer**

7              $r[j1 + ei, j1 + ej] = \text{rho}[j1 + ei, j1 + ej];$

8         **Fin**

9     **Fin**

10 **Fin**

---

### Número de operaciones

Los resultados mostrados en esta sección son de relevante importancia, puesto que hemos reemplazado las  $\mathcal{O}(\text{dimt}^3)$  operaciones por:

$$\frac{\text{dimt}^2}{N_{at}^2} = \mathcal{O}(\text{dimt}^2)$$

*asignaciones* en el primer caso, y:

$$\frac{\text{dimt}^2}{N_{at}} = \mathcal{O}(\text{dimt}^2),$$

*asignaciones* en el los dos últimos.

## 4.5. Algoritmos específicos

Ahora que conocemos la forma de computar los operadores involucrados en nuestro modelo, y las también las composiciones de dichos operadores, utilizamos éstos algoritmos para escribir los que compondrán a los algoritmos generales escritos en (4.1). Antes, definimos las variables globales a ser utilizadas:



Variable	Descripción
$nlaser$	Número de láseres acoplados al átomo.
$omega(i)$	Amplitud fija del láser $i$ .
$sigma(i)$	Varianza de gaussiana de la amplitud del láser $i$ en el tiempo.
$nmod \equiv N_{mod}$	Equivalente al número de modos acoplados al átomo.
$mod$	Arreglo de enteros. $mod(i)$ indica la posición del modo $i$ en la composición de espacios.
$g$	Arreglo de reales. $g(i)$ es la constante de acoplamiento del modo $i$ al átomo.
$v$	Arreglo de reales. $v(i)$ es el cambio de fase del láser $i$ determinadas a segundo orden, véase [6].
$exprAt$	Arreglo de cadenas de caracteres. Especifica el tipo de expresiones atómicas involucradas en (3.10).
$exprMod$	Arreglo de cadenas de caracteres. Especifica el tipo de expresiones de los modos involucradas en (3.10).
$gammaAt$	Arreglo de reales. $gammaAt(i)$ es el coeficiente que pondera a $exprAt(i)$ en (3.10).

### 4.5.1 Error Relativo

Empezaremos fijando la atención en la Línea 2 del Algoritmo 5. Vemos que lo hace falta un algoritmo que calcule la norma de Frobenius de una matriz utilizando el resultado (4.6). Así, escribimos:

---

**Algoritmo 19:** normFrob

---

**Entrada:**  $\rho$

**Salida:**  $error$

1  $error = 0;$

2 **Inicio**

3     **Para**  $i = 1$  *hasta*  $dimt$  **Hacer**

4         **Para**  $j = i + 1$  *hasta*  $dimt$  **Hacer**

5              $error = error + 2 \cdot rho[i, j] \cdot rho[i, j]^*;$

6         **Fin**

7          $error = error + rho[i, i] \cdot rho[i, i]^*;$

8     **Fin**

9 **Fin**

---

Donde hemos usado el hecho que la matriz es Hermítica, por tanto basta sumar sobre la diagonal y *dos veces* la matriz triangular superior.

### 4.5.2 Conmutador de Hamiltoniano y $\rho$

En este trabajo se hará uso del Punto de Vista de Interacción (o *interaction picture*), marco teórico en el cual sólo es considerado el Hamiltoniano de Interacción (3.9), para mayor información acerca de esta transformación de las ecuaciones el lector puede referirse a [7] sección 1.2. Observando entonces (3.9), es inmediato que dos posibles estrategias aparecen. La primera, calcular el Hamiltoniano en el momento  $t$  y luego hacer  $(H\rho - \rho H)$ . La segunda, y que resultó ser, como se esperaba la de mayor eficiencia, es hacer uso de los algoritmos, que computan la acción de cada uno de los operadores, que componen (3.9), sobre  $\rho$ , tanto por la izquierda como por la derecha. Realizamos a continuación el

algoritmo de esta segunda forma de cómputo:

---

**Algoritmo 20:** conmuH

---

**Entrada:**  $\rho, t, z$

**Salida:**  $z = z + i \cdot [H(t), \rho]$

1 **Inicio**

```

2    $c = \text{ceros}(\text{dim}t);$ 
3   // parte acoplamiento láser-átomo, suponemos un pulso gaussiano;
4   Para  $i = 1$  hasta  $nlaser$  Hacer
5        $Aomega = omega[i] \cdot \exp(-(t - tm)^2 / sigma[i]^2);$ 
6       // multiplicación por la derecha;
7        $c = c + Aomega \cdot \exp(-i \cdot v(i)t) \cdot \text{arAt}(\rho, \text{intAt}(i), 'n');$ 
8       // multiplicación por la derecha conjugada;
9        $c = c + Aomega \cdot \exp(i \cdot v(i)t) \cdot \text{arAt}(\rho, \text{intAt}(i), 'c');$ 
10      // multiplicación por la izquierda;
11       $c = c - Aomega \cdot \exp(-i \cdot v(i)t) \cdot \text{raAt}(\rho, \text{intAt}(i), 'n');$ 
12      // multiplicación por la izquierda conjugada;
13       $c = c - Aomega \cdot \exp(i \cdot v(i)t) \cdot \text{raAt}(\rho, \text{intAt}(i), 'c');$ 

```

14 **Fin**

15 // parte acoplamiento modo-átomo;

16 **Para**  $i = 1$  *hasta*  $nmod$  **Hacer**

```

17     // multiplicación por la derecha;
18      $aux = \text{arMod}(\rho, \text{mod}(i), 'n');$ 
19      $c = c + g(i) \cdot \text{arAt}(aux, \text{acop}(i), 'n');$ 
20     // multiplicación por la derecha conjugada;
21      $aux = g(i) \cdot \text{arAt}(\rho, \text{acop}(i), 'c');$ 
22      $c = c + \text{arMod}(aux, \text{mod}(i), 'c');$ 
23     // multiplicación por la izquierda;
24      $aux = g(i) \cdot \text{raAt}(\rho, \text{acop}(i), 'n');$ 
25      $c = c - \text{raMod}(aux, \text{mod}(i), 'n');$ 
26     // multiplicación por la izquierda conjugada;
27      $aux = \text{raMod}(\rho, \text{mod}(i), 'c');$ 
28      $c = c + g(i) \cdot \text{raAt}(aux, \text{acop}(i), 'c');$ 

```

29 **Fin**

30  $z = z + i \cdot c;$

31 **Fin**

---

En el Algoritmo 20 hemos incluido una leve variante a los algoritmos  $\text{arMod}$   $\text{arAt}$  y sus variantes, ésta consiste en indicar mediante un parámetro, 'n' o 'c', si el operador involucrado debe ser conjugado o no, de esta forma ahorramos unas líneas de código, siendo fácil implementar dichas modificaciones en los Algoritmos respectivos.

### 4.5.3 Lindbladiano

Escribiremos una forma general de cómputo del Lindbladiano a partir de (3.10).

---

#### Algoritmo 21: lindbladiano

---

**Entrada:**  $\rho, l$

**Salida:**  $l = l + \text{Lindbladiano}(\rho)$

```

1 Inicio
2   // En este trabajo;
3   //  $\text{exprAt} = \text{'arat'}$ ,  $\text{'atar'}$ ,  $\text{'rata'}$ ;
4   //  $\text{exprMod} = \text{'arat'}$ ,  $\text{'atar'}$ ,  $\text{'rata'}$ ,  $\text{'atra'}$ ,  $\text{'raat'}$ ;
5   Para  $i = 1$  hasta  $n_{\text{iterAt}}$  Hacer
6     |  $l = l + \text{araAt2}(\rho, \text{intAt}(i), \text{gammaAt}(i), \text{exprAt})$ ;
7   Fin
8   Para  $i = 1$  hasta  $n_{\text{mod}}$  Hacer
9     |  $l = l + \text{araMod2}(\rho, \text{mod}(i), \text{gammaMod}(i), \text{exprMod})$ ;
10  Fin
11 Fin

```

---

En el Algoritmo 21 hemos utilizado las dos funciones auxiliares  $\text{araAt2}$  y  $\text{araMod2}$ , sólo es necesario especificas que éstas funciones seleccionan la rutina a ejecutar, de las vistas en (4.4) a partir de los arreglos de expresiones  $\text{exprAt}$  y  $\text{exprMod}$ , multiplicando cada resultado por los coeficientes asignados a los arreglos  $\text{gammaAt}$  y  $\text{gammaMod}$  respectivamente.

#### 4.6. Plataforma Ejecución

Describiremos a continuación, las principales características del equipo utilizado para la ejecución del programa.

**Nombre Servidor y ubicación :** Kudi. C.E.M.C.C. Universidad de La Frontera. Temuco.

**Procesador :** Intel XEON CPU, E5506. Velocidad reloj 2.13GHZ.

**N° Núcleos :** 4 núcleos, 8 Hilos de procesamiento.

**Memoria RAM :** 16GB.

**Caché L1 :** 32KB por Núcleo.

**Caché L2 :** 256KB por Núcleo.

**Caché L3 :** 4MB compartida.

**S.O. :** GNU/Linux, distribución Fedora Core 13, Kernel 2.6.34.7-66.fc13.x86\_64.

### Parte III

## Resultados y conclusiones

## **CAPÍTULO 5**

### **Resultados**

## Capítulo 5. Resultados

---

En las figuras 3, 4 y 5 se presentan la evolución del sistema obtenida en el trabajo anterior [5] para el caso  $N_a = 3$ ,  $N_b = 3$  sin ruido térmico.

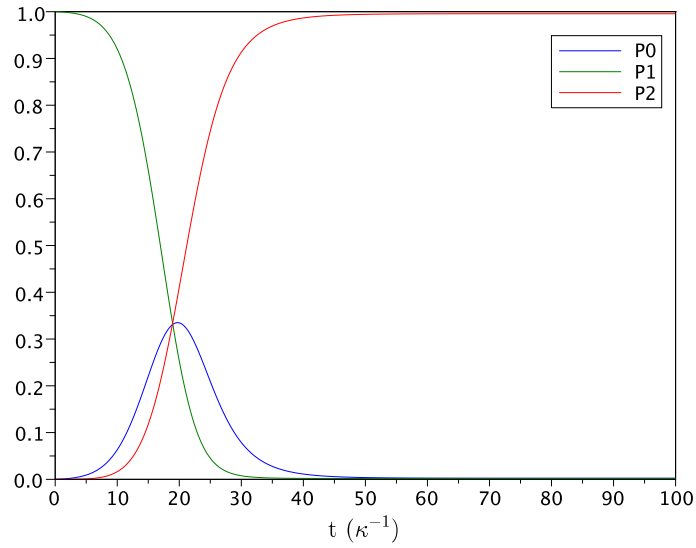


Figura 3: Evolución de niveles atómicos 0, 1 y 2 en trabajo anterior.

### 5.1. Resultados niveles atómicos y poblaciones de los modos

Presentamos las curvas obtenidas de la evolución del sistema, para diferentes niveles de ruido, esto es, en el rango  $\bar{n} \in [0.0001, 0.5]$  de manera tal que, la dominancia de los términos producto del ruido en el Lindbladiano (3.10) varíe suavemente desde una leve interferencia hasta una mayor dominancia como será reflejado en las soluciones. Este es un análisis análogo al realizado en [12], y [7] Lectura 8. Omitimos la evolución del nivel 3 puesto que es muy similar a la del nivel 4 y son ambas despreciables en orden, comparadas con los demás niveles.



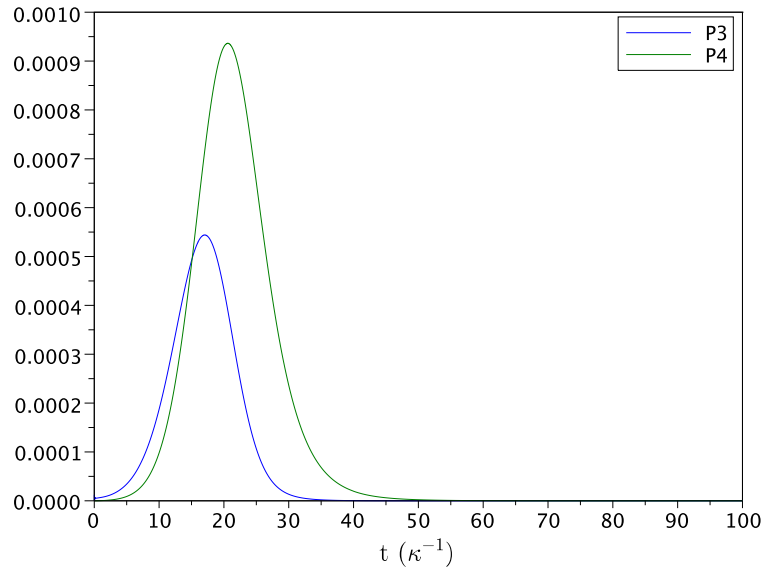


Figura 4: Evolución de niveles atómicos 3 y 4 en trabajo anterior.

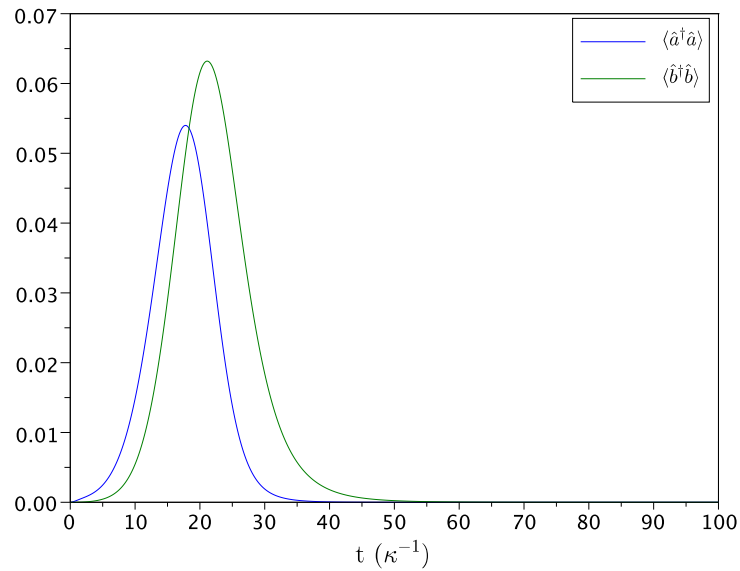


Figura 5: Evolución poblacional modos  $a$  y  $b$  en trabajo anterior.

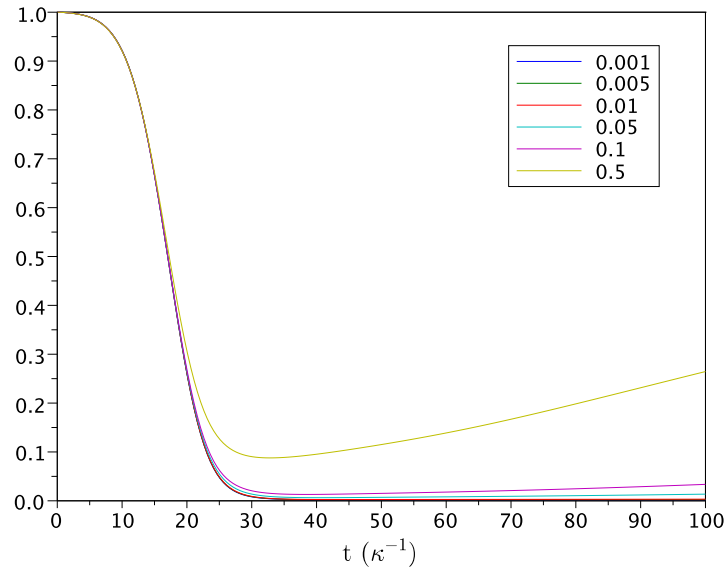


Figura 6: Evolución del nivel atómico 0 para los diferentes niveles de ruido considerados.

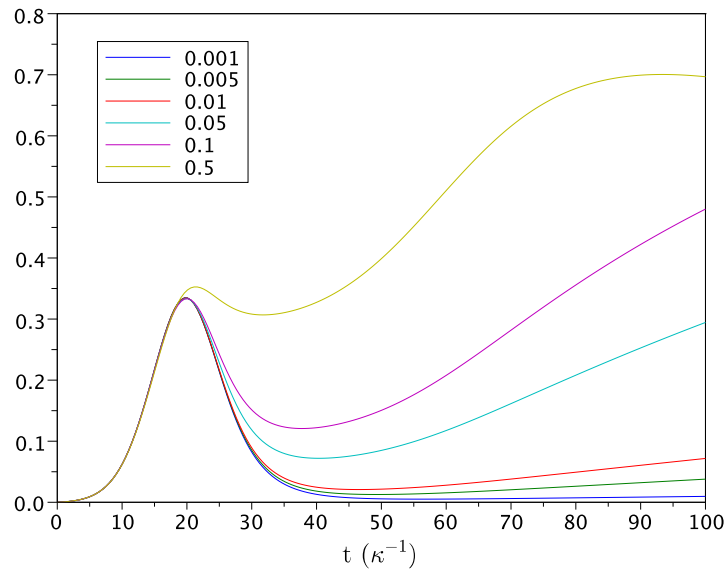


Figura 7: Evolución del nivel atómico 1 para los diferentes niveles de ruido considerados.

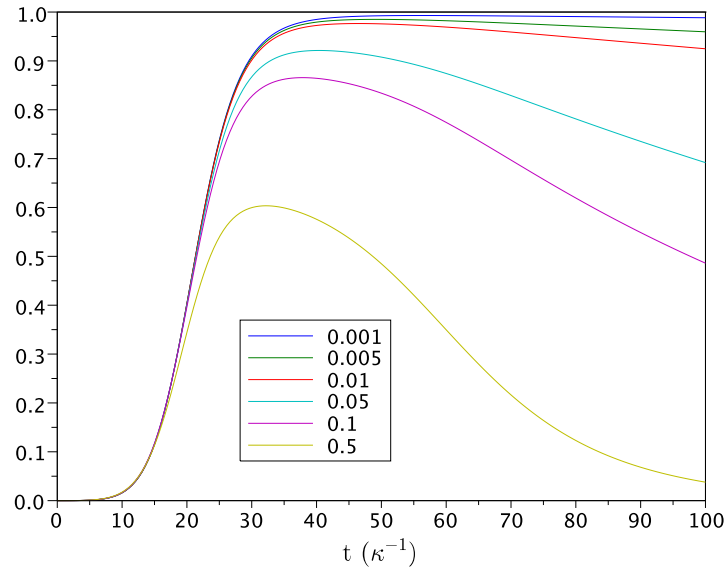


Figura 8: Evolución del nivel atómico 2 para los diferentes niveles de ruido considerados.

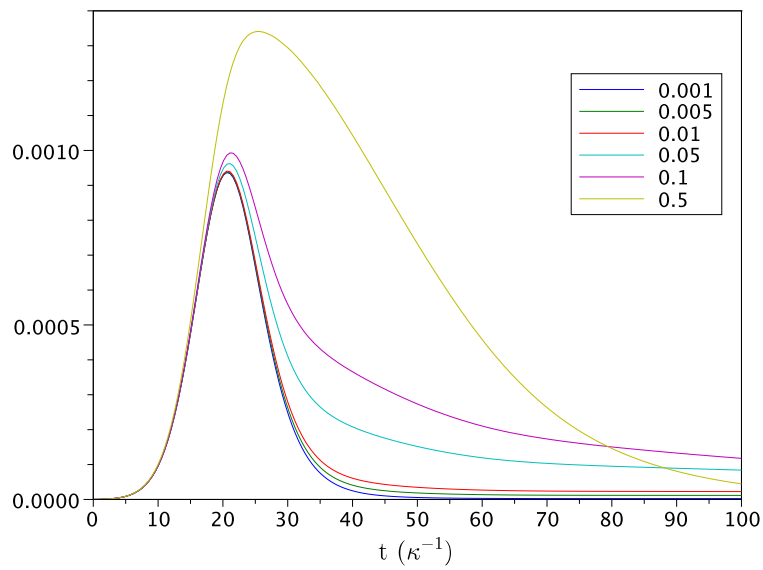


Figura 9: Evolución del nivel atómico 4 para los diferentes niveles de ruido considerados.

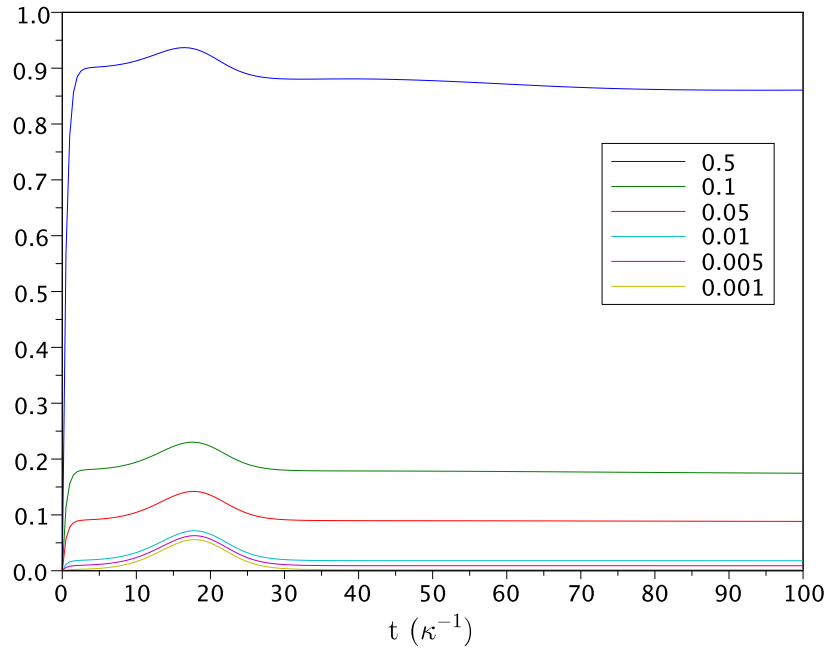


Figura 10: Evolución población modo  $a$  ,  $\bar{n} = 0.001$ .

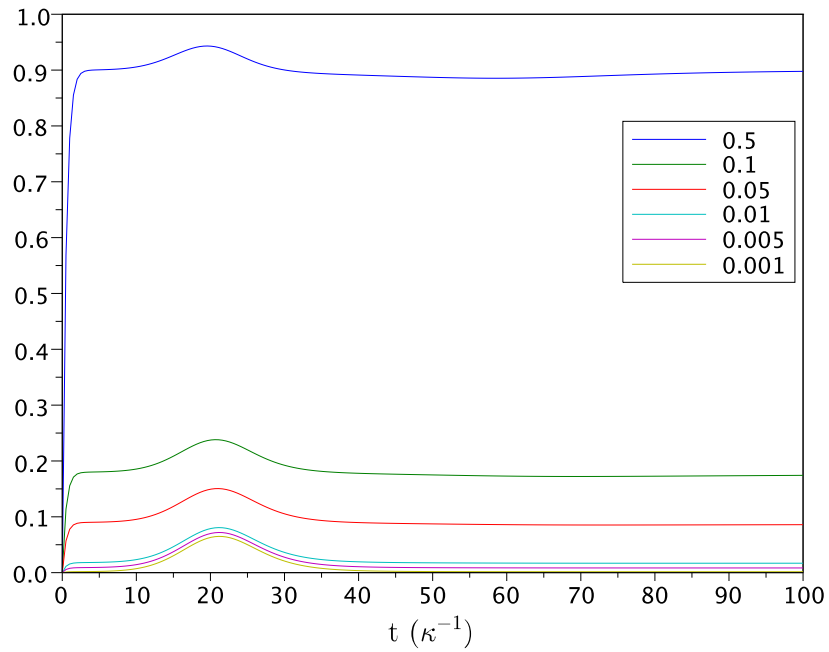


Figura 11: Evolución población modo  $b$  ,  $\bar{n} = 0.001$ .

## 5.2. Espectros obtenidos

Ahora presentamos los espectros (normalizados) para las curvas de población de ambos modos,  $a$  y  $b$  del campo. Estos espectros consisten en el valor absoluto de la Transformada Rápida de Fourier de las curvas obtenidas para las poblaciones de ambos modos  $a$ ,  $b$  del campo electromagnético. Por

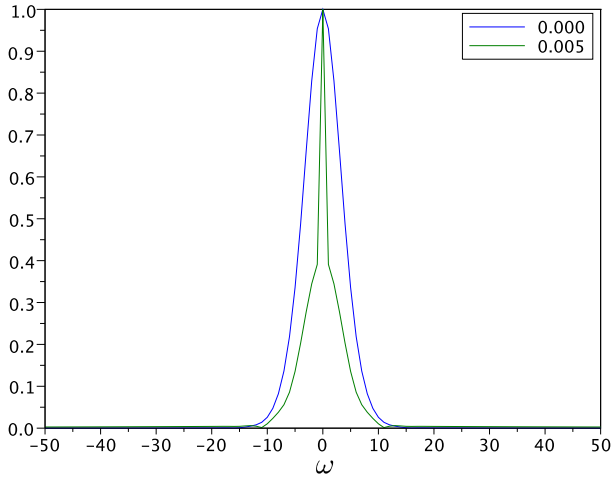


Figura 12: Espectros modo  $a$ , para niveles de ruido menores.

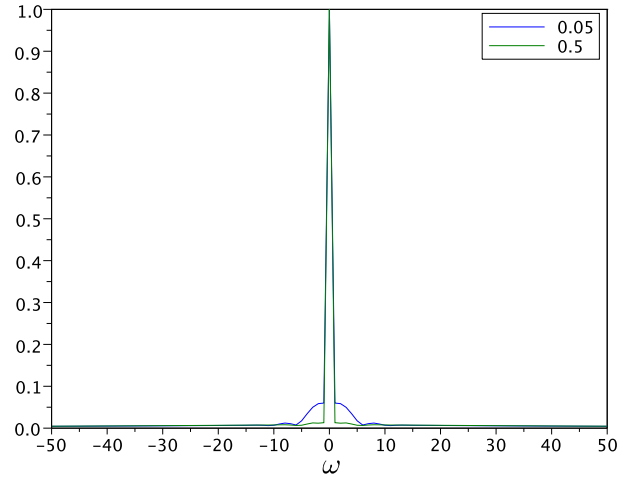


Figura 13: Espectros modo  $a$ , para niveles de ruido más altos.

último, exhibimos el comportamiento del sistema para el máximo ruido considerado ( $\bar{n} = 0.5$ ), para un tiempo 20 veces mayor al anteriormente utilizado en las figura 16.

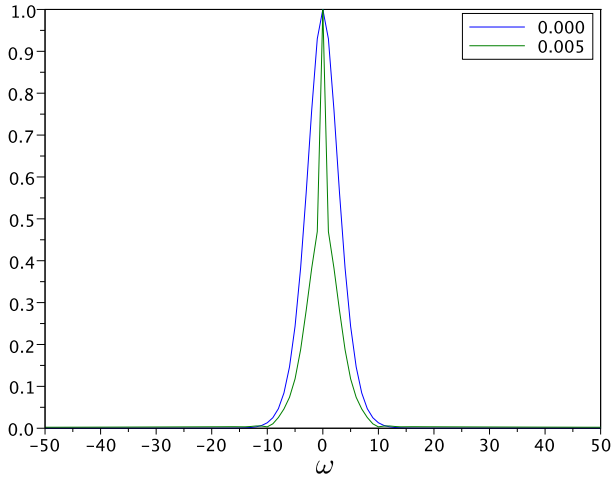


Figura 14: Espectros modo  $b$ , para niveles de ruido menores.

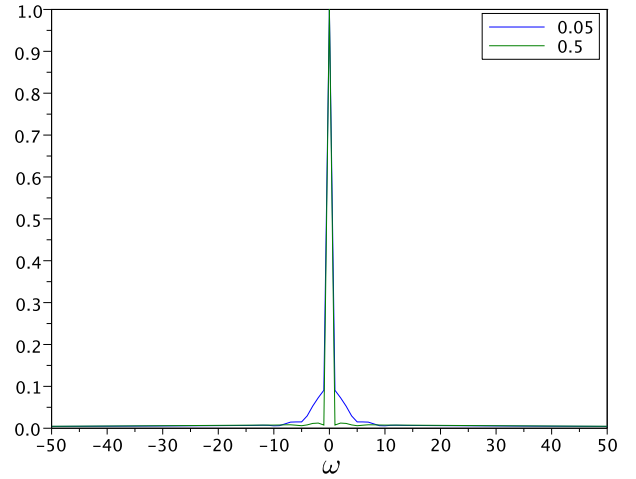


Figura 15: Espectros modo  $b$ , para niveles de ruido más altos.

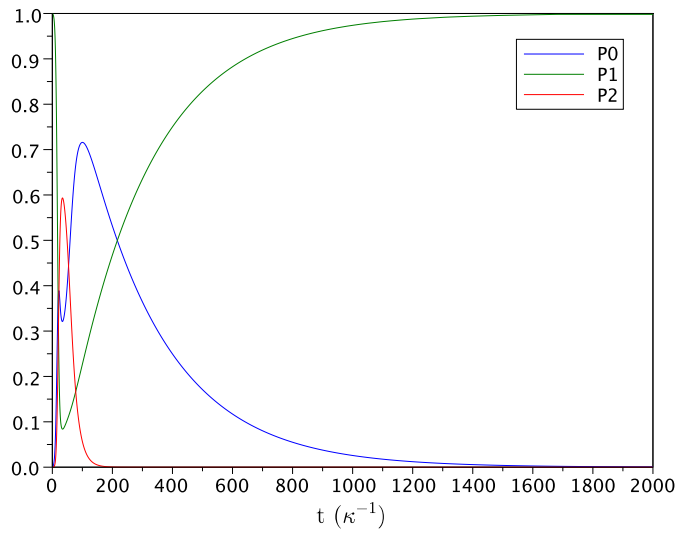


Figura 16: Evolución de los niveles 0, 1 y 2 para un tiempo 20 veces mayor.

### 5.3. Tiempos de ejecución

En la Tabla 2 presentamos los tiempos<sup>11</sup> de ejecución resultantes para diferentes truncamientos de los espacios asociados a los modos del campo, tomando siempre ( $N_a = N_b = 2 \dots 10$ ).

En las siguientes tablas, denotaremos por  $R_f$  el Algoritmo 6 asociado al cálculo de la función objetivo a integrar;  $R_e$  denotará al Algoritmo 5, asociado al cálculo del error relativo y  $R_c$  que denotará al Algoritmo 4 asociado al cálculo de las cantidades físicas a medir. En la Tabla 3, mostramos los tiempos de ejecución, del Programa original en FORTRAN. Este programa corresponde a la traducción del programa utilizado en [5] y escrito en MATLAB, para la resolución del problema del presente trabajo, con  $N_a = N_b = 2$  y sin ruido térmico. Además se muestran también las proporciones (en porcentaje) de los tiempos de demora de cada una de las rutinas principales definidas anteriormente. También, en la Tabla 1 se muestra la cantidad de memoria utilizada para almacenar  $\rho$ , el color azul, verde y rojo, indican que para el tamaño de los espacios modales asociado, la matriz  $\rho$ , el programa entero, se pueden almacenar totalmente en la caché L1, L2 o L3 respectivamente. Esto último ha de ser utilizado para poseer una visión de la escalas (en memoria) de las variables utilizadas, no de manera exacta puesto que la utilización no es controlada por el lenguaje utilizado, en este caso FORTRAN.

Además, en la Tabla 5, fijando  $N_a = N_b = 7$  y haciendo variar  $\bar{n}$ , se observa cómo varía el número de iteraciones que realiza el método corrector en la integración.

$N_a = N_b$	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$\rho$	16	50	122	253	469	800	1281	1953	2860	4050	5578
Total	1012	1276	1796	2596	3868	5784	8640	12288	17408	24576	33792

Tabla 1: Memoria utilizada por la matriz  $\rho$  en y el programa completo en KB.

	$N_a = N_b$									
$\bar{n}$	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Total
0.001	17s	1m02s	3m01s	6m54s	15m40s	35m53s	1h31m	2h03m	4h16m	8h53m
0.005	18s	1m03s	3m04s	6m56s	15m26s	36m16s	1h38m	2h51m	4h34m	10h06m
0.01	19s	1m10s	3m21s	7m45s	15m31s	38m00s	1h35m	2h54m	5h02m	10h37m
0.05	20s	1m11s	3m25s	7m41s	15m36s	45m40s	1h59m	3h09m	4h44m	11h06m
0.1	20s	1m14s	3m32s	8m02s	16m58s	46m09s	1h41m	3h58m	5h55m	12h51m
0.5	22s	1m20s	3m51s	8m55s	18m42s	50m27s	2h10m	4h06m	6h16m	13h55m

Tabla 2: Tiempos de ejecución para diferentes dimensiones de los espacios modales.

<sup>11</sup>En esta sección, los intervalos de tiempo serán denotados según “DDdHHhMMmSSs“, donde DD es la cantidad de días, HH horas, MM minutos y SS segundos.

$N_a = N_b$	2	3	4	5	6	7	8	9
Tiempo	24m	2h18m	8h	1d	3d9h	14d19h	21d	38d
$R_f$ %	90.6	92.4	91.1	91.3	94.0	93.8	94.2	88.9
$R_e$ %	3.9	3.7	3.7	3.8	2.2	2.6	2.1	3.6
$R_c$ %	4.7	4.6	4.6	4.8	3.4	3.6	3.2	7.3

Tabla 3: Tiempos de ejecución y porcentajes por rutina del trabajo anterior.

$N_a = N_b$	2	3	4	5	6	7	8	9
Tiempo	12s	37s	1m48s	4m03s	10m8s	21m26s	52m44s	1h42m
$R_f$ %	86.6	89.5	90.2	89.8	85.5	84.8	85.8	87.7
$R_e$ %	4.0	3.0	3.2	3.2	4.8	4.8	3.8	2.8
$R_c$ %	3.8	3.0	2.8	2.8	3.0	3.3	4.6	5.0

Tabla 4: Tiempos de ejecución y porcentajes por rutina del trabajo actual sin ruido térmico.

	$\bar{n}$						
$n$	0.0	0.001	0.005	0.01	0.05	0.1	0.5
0	3654	0	0	0	0	0	0
1	4513	0	0	0	0	0	0
2	3853	11896	10974	0	0	0	0
3	3627	3743	4630	15560	14910	10906	1492
4	4353	4361	4396	4440	5090	9094	17573
5	0	0	0	0	0	0	935

 Tabla 5: Número de correcciones  $n$ , en el método de integración,  $N_a = N_b = 7$ .



#### 5.4. Proporciones de demora los Algoritmos

Ahora, otros datos de interés son las proporciones, sobre el tiempo total, de demora de cada subrutina importante identificada en (4.1). Resumimos éstas proporciones de tiempo de ejecución en la Tabla 6.

$N_a = N_b$	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Promedio
$\bar{n} = 0.001$										
$R_f$	90.2	92.7	93.6	93.8	91.2	89.1	89.6	90.7	90.2	91.2
$R_e$	3.0	2.6	2.2	2.1	3.0	3.4	2.9	2.2	2.3	2.6
$R_c$	2.6	1.8	1.7	1.6	1.7	2.5	2.9	3.7	3.7	2.5
$\bar{n} = 0.005$										
$R_f$	90.5	92.7	93.5	93.8	92.3	89.3	90.0	89.6	90.3	91.3
$R_e$	2.7	2.5	2.2	2.1	2.6	3.4	2.8	2.6	2.2	2.6
$R_c$	2.5	1.7	1.7	1.5	1.7	2.4	2.7	3.6	4.1	2.4
$\bar{n} = 0.01$										
$R_f$	90.5	92.8	93.7	93.9	94.3	90.0	89.2	90.7	90.3	91.7
$R_e$	3.0	2.6	2.3	2.1	2.0	3.4	3.2	2.5	2.6	2.6
$R_c$	2.2	1.6	1.5	1.4	1.5	2.1	2.6	3.1	3.3	2.1
$\bar{n} = 0.05$										
$R_f$	90.5	90.8	93.7	94.2	94.3	87.9	89.0	89.8	87.8	90.9
$R_e$	3.0	3.8	2.3	2.1	2.0	4.2	3.4	2.8	2.3	2.9
$R_c$	1.9	1.7	1.4	1.4	1.5	2.1	2.4	3.2	3.2	2.1
$\bar{n} = 0.1$										
$R_f$	90.5	93.1	93.7	94.0	92.5	89.3	90.7	88.8	87.4	91.1
$R_e$	3.0	2.5	2.3	2.2	2.6	3.6	2.9	3.2	2.7	2.8
$R_c$	2.1	1.6	1.4	1.3	1.4	2.0	2.4	2.9	3.2	2.0
$\bar{n} = 0.5$										
$R_f$	90.8	92.8	93.8	94.0	92.7	89.9	89.2	88.9	88.3	91.2
$R_e$	3.0	2.9	2.4	2.2	2.7	3.4	3.4	3.3	2.8	2.9
$R_c$	2.0	1.4	1.3	1.2	1.3	2.0	2.4	2.6	2.8	1.9

Tabla 6: Porcentajes de tiempos de ejecución para diferentes dimensiones de los espacios modales.

En la Tabla 7: ' $R_f$ ' denota al Algoritmo 6, mientras que 'Li', 'CH' denotan a los algoritmos 21 y 20 respectivamente, subrutinas de 'F'. 'Md', denota entre las líneas 8 y 10 del Algoritmo 21 involucra sólo operadores modales como aratMod; también 'At' denota desde la línea 5 y 7, éstas líneas sólo involucran operadores atómicos, como aratAt. Seguidamente, 'AM' denota entre las líneas 16 y 29 del Algoritmo 20, dichas líneas operadores atómicos y de modos; 'AtC' denota entre las líneas 4 y 14, éstas líneas involucran únicamente operadores Atómicos. Ésta tabla contiene los porcentajes de demora de cada una de las secciones mencionadas, comparados sus tiempos versus la demora total del Algoritmo

que las contiene.

De la Tabla 7, podemos concluir, los Algoritmos que involucran operadores de los modos, demoran casi 8 veces en su cómputo que los Algoritmos que involucran operadores atómicos.

		$N_a = N_b$					
Ámbito	Algor.	2	4	6	8	10	12
$R_f$	Li	69	75	71	59	55	54
	CH	31	25	29	41	45	46
Li	Md	93	97	97	96	96	95
	At	7	3	3	4	4	5
CH	AM	87	89	91	93	93	94
	AtC	13	11	9	7	7	6

Tabla 7: Proporciones (%) de demora sobre el total (del resp. ámbito) de Algoritmos 6, 21 y 20.

## 5.5. Resultados paralelización

Para el cómputo en paralelo, se utilizaron los resultados expuestos en la sección anterior. Se observa de aquellos resultados, que ha de ser conveniente calcular el Lindbladiano (Li en Tabla 7) y el Conmutador del Hamiltoniano (CH en Tabla 7) en paralelo, ésta paralelización será denotada por P1. Además, se observa que las rutinas que más costo computacional tienen, de las expuestas en (4.4), son las asociadas a operadores del campo electromagnético (4.4.3), por ende, una segunda paralelización es el cálculo en paralelo del bucles, o *loops* que aparecen en éstos algoritmos (por ejemplo, Algoritmo 11 línea 8, ésta segunda paralelización será denotada por P2. Finalmente, una tercera paralelización, P3, estará dada por la combinación de ambas paralelizaciones, mientras que la rutina original (pero con el número de correcciones fijadas a tres) será denotada por P0.

Para medir el rendimiento (*performance*) de las paralelizaciones, expondremos los tiempos totales de demora de cada versión (para diferentes dimensiones de los espacios modales), el factor de mejora  $\alpha$  y la eficiencia lograda. Para ésto último; si  $T_s$  es el tiempo de demora del programa *serial*, esto es, el programa original;  $T_p$  es el tiempo de demora *real* del programa paralelizado, esto es, el tiempo que el usuario mide;  $T_t$  es el tiempo total de demora, esto es, la suma de los tiempos en cada hilo de procesamiento. Entonces,  $\alpha = T_s/T_p$  y la eficiencia  $E_A$  de un algoritmo  $A$  es calculada según:

$$E_A = 100 \cdot \frac{T_s}{T_t} \%$$

Notemos que si  $n$  es el número de hilos de procesamiento, entonces para obtener una eficiencia del

100 % es necesario que cada hilo tenga un tiempo de procesamiento igual a  $T_s/n$  y que será equivalente en dicho caso a  $T_p$ . En la Tabla 8 se muestran tanto los factores de mejora de los tiempos, como las eficiencias logradas, mientras que en la Tabla 9 se muestran los tiempos respectivos. En todos éstos casos, el número de correcciones del método de integración fue fijado a tres, esto para tener una mejor medida del producto de las paralelizaciones en sí, además el parámetro relacionado con el ruido térmico fue fijado en  $\bar{n} = 0.001$ .

$N_a = N_b$	2		4		6		8		10		12	
Rutina	$\alpha$	$E_A$ %	$\alpha$	$E_A$ %	$\alpha$	$E_A$ %	$\alpha$	$E_A$ %	$\alpha$	$E_A$ %	$\alpha$	$E_A$ %
P1	1.16	59	1.11	57	1.04	54	1.29	68	1.30	69	1.27	69
P2	0.98	50	1.25	63	1.25	64	1.21	64	1.2	67	1.23	69
P3	1.32	45	1.68	57	1.63	57	1.85	64	1.84	65	1.73	61

Tabla 8: Rendimiento de las paralelizaciones realizadas.

	$N_a = N_b$					
Rutina	2	4	6	8	10	12
P0	24s	4m03s	18m49s	1h19m	3h59m	8h13m
P1	20s	3m38s	18m09s	1h01m	3h04m	6h29m
P2	24s	3m14s	15m03s	1h05m	3h16m	6h41m
P3	18s	2m24s	11m31s	42m58s	2h10m	4h45m

Tabla 9: Tiempos de demora de rutinas paralelizadas.

# **CAPÍTULO 6**

## **CONCLUSIONES**

## Capítulo 6. Conclusiones

---

### 6.1. Sobre los resultados con ruido térmico

De las figuras 6 a la 9 se puede apreciar cómo la introducción de ruido térmico modifica las poblaciones de los niveles atómicos, en particular, afecta directamente la eficiencia con la cual es posible emitir fotones. Esto último se evidencia claramente en las figuras 10 y 11, en las que se aprecia cómo, producto que los modos son poblados por fotones ingresados a la cavidad por el ruido térmico, cada vez es más difícil distinguir los fotones ingresados por el átomo. También se evidencia esto en las figuras 12, 13, 14 y 15. En aquellas figuras se aprecia cómo los espectros de las poblaciones modales son cada vez más parecidos al espectro de una función constante. Recordemos que la transformada de Fourier de una función real constante es una delta de Dirac  $\delta(\omega)$ . Además, en la Figura 16 se observa cómo, a una escala de tiempo 20 veces mayor que la considerada en los demás casos, el átomo tiende a regresar al nivel  $|1\rangle$ , ésto ocurre puesto que para tal escala de tiempo, los pulsos de los láseres pueden considerarse ya apagados; además, el átomo no regresa al nivel fundamental  $|0\rangle$ , puesto que en éste modelo no se considera la transición entre el nivel  $|1\rangle$  y  $|0\rangle$  debido al decaimiento espontáneo, esto se justifica en que la vida media del átomo en el primer nivel mencionado, es del orden de segundos, como se expone en la Figura 1, mucho mayor que la escala de nanosegundos de las demás transiciones. En resumen, el ruido térmico amortigua la eficiencia obtenida en el caso ideal, siendo más difícil distinguir la emisión de los fotones en la cavidad. Por ende es deseable poder controlar tal nivel de ruido, lo que se logra alcanzando temperaturas muy cercanas al cero absoluto, en la escala de los micro-Kelvin.

### 6.2. Sobre los tiempos de ejecución obtenidos

De la Tabla 2, es claro que los tiempos de ejecución del programa principal (Algoritmo 2) aumentan según lo hacen también las dimensiones de los espacios de Hilbert involucrados  $\mathcal{H}_a$  y  $\mathcal{H}_b$ , ésto se explica por la dependencia cuadrática, con dichas dimensiones del número de operaciones de los algoritmos descritos en (4.4). Además, se aprecia cómo los tiempos de cómputo también aumentan a medida que el parámetro  $\bar{n}$  (ruido térmico) aumenta; esto se debe a una mayor variación del estado del sistema para niveles de ruido más elevados, por ende el método corrector deberá realizar un número de correcciones más elevado, como lo confirman los datos expuestos en la Tabla 5. También, al comparar las tablas 3 y 4 se aprecia claramente una mejora en los tiempos de ejecución, con respecto al trabajo anterior.

También podemos observar que el algoritmo de mayor coste computacional, está asociada al cálculo de la función  $F$ , ésto se aprecia claramente en la Tabla 6. Además, mediante los datos obtenidos

en la Tabla 7 podemos confirmar que el algoritmo con mayor coste computacional son los asociados a los modos del campo electromagnético acoplados al átomo. Ésta información la utilizamos para establecer qué rutinas debían tener prioridad en los programas escritos con directivas de paralelización (OpenMP). Lo anterior nos lleva a establecer que de realizarse un aumento del número de niveles atómicos, el coste computacional no aumentará en exceso, en comparación con el modelo expuesto en este trabajo, puesto que en dicho caso, habrá un aumento en el uso de operadores atómicos, como los expuestos en (4.4.4), dichos operadores mostraron tener un menor coste computacional que los asociados al los modos acoplados al átomo.

Las variaciones en las eficiencias obtenidas para distintas dimensiones modales, pueden ser explicadas debido al aumento de la memoria utilizada por el programa, ésto tiene una íntima relación con el rendimiento puesto que varía la proporción de instrucciones y datos que pueden ser alojados en las memorias de mejor rendimiento o caches, véase por ejemplo Tabla 1. Así, las velocidades a las cuales un dato o instrucción son accedados por el hilo de procesamiento pueden variar dramáticamente (para profundizar en el tema, el lector puede revisar [19]).

Además, en un trabajo futuro, la adaptación de los programas estará facilitada por la característica de utilizar las diferentes expresiones expuestas en (4.4) como bloques de construcción. Además, los parámetros del problema, como dimensiones, acoplamientos, constantes, han sido ingresados de manera dinámica, es decir, son incluidas en un módulo aparte (llamado en particular “datos.f90”), de manera tal que la modificación de la Ecuación Maestra, al incluir posibles nuevos niveles y acoplamientos, sea posible de forma directa afectando sólo los arreglos que contienen coeficientes asociados a los términos y las variables asociadas a dimensiones, como número de modos, número de fotones por modo, etc.

## Nomenclatura y constantes

Símbolo	Descripción
$\hbar$	Constante de Planck.
$\omega_a$	Frecuencia de resonancia del modo $a$ del campo electromagnético. Análogo para $\omega_b$ .
$\omega_i$	Frecuencia de resonancia del nivel atómico $i$ .
$\Omega_i(t)$	Intensidad del láser $i$ en el tiempo $t$ .
$g_a$	Factor de acoplamiento del modo $a$ a los niveles atómicos asociados. Análogo para $g_b$ .
$\kappa_a$	Factor de pérdida de energía en la cavidad asociado al modo $a$ . Análogo para $\kappa_b$ .
$\nabla^2$	Operador Laplaciano.
$[a, b]$	Conmutador $ab - ba$ de $a$ y $b$ .
$\otimes$	Producto tensorial de espacios vectoriales.
$\delta_{i,j}$	Delta de Kronecker.
$a^\dagger$	Operador adjunto de $a$ .
$tr(a)$	Traza de la matriz representante del operador $\hat{a}$ .
$nEm$	Notación exponencial: $nEm = n \cdot 10^m$ , $n, m \in \mathbb{R}$ .
$[x]$	Parte entera superior de $x \in \mathbb{R}$ .
$n \bmod p$	Módulo de congruencia de $n$ , $p \in \mathbb{Z}$ .

Símbolo	Descripción
$e^t$	Vector transpuesto de $e$ .
$I^n$	Matriz identidad de orden $n$ .
$\mathbb{O}^n$	Matriz nula de orden $n$ .



## Bibliografía

- [1] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Pearson Education. Second Edition, 2005.
- [2] Robert Eisberg, Robert Resnick. *Física Cuántica*. Editorial Limusa, 2009.
- [3] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Frank Laloe. *Quantum Mechanics, Volume 1*. WILEY-VCH, 1991.
- [4] Sergio M. Dutra. *Cavity Quantum Electrodynamics, The Strange Theory of Light in a Box*. WILEY-INTERSCIENCE, 2005.
- [5] Gino Montecinos. *Cálculo de Funciones de Correlación en la generación de dos fotones por encargo. Trabajo para optar al Título de Ingeniero Matemático*. UFRO, 2008.
- [6] R. Guzmán. *Procesamiento de Información en Sistemas Cuánticos*. Tesis Doctoral. USACH, 2004.
- [7] Howard Carmichael. *An Open Systems Approach to Quantum Optics, Lectures presented at the Université Libre de Bruxelles, October 28 to November 4, 1991*. Springer-Verlag, 1993.
- [8] Claude Cohen-Tannoudji, Jacques Dupont-Roc, Gilbert Grynberg. *Photons & Atoms, Introduction to Quantum Electrodynamics*. WILEY-VCH, 2004.
- [9] D.F. Walls and G.J. Milburn. *Quantum Optics*. Springer, 2006.
- [10] Christian Maurer, Christoph Becker, Carlos Russo, Jürgen Eschner and Rainer Blatt. *A single-photon source based on a single  $\text{Ca}^+$  ion*. New Journal of Physics, 6(2004)94.
- [11] M. Keller, B. Lange, K. Hayasaka, W. Lange and H. Walther. *A calcium ion in a cavity as a controlled single-photon source*. New Journal of Physics, 6(2004)95.
- [12] I Wilson-Rae, N Nooshi, J Dobrindt, TJ Kippenberg and W Zwerger. *Cavity-assisted backaction cooling of mechanical resonators*. New Journal Of Physics, 2008.
- [13] David J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*. Prentice Hall. 3rd Edition, 1999.
- [14] Marcelo Martinelli. *Luz e Átomos como ferramentas para Informação Quântica*. Instituto de Física, Laboratório de Manipulação Coerente de Átomos e Luz. Universidade do São Paulo. Curso de Verão 2011.

- [15] C. H. Bennett, G. Brassard, S. Popescu, B. Schumacher, J.A. Smolin, W. K. Wootters. Phys.Rev.Lett. 76, 722 (1996); C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin, W.K. Wootters, Phys.Rev. A 54 3824(1996).
- [16] D. Deutsch and R. Jozsa. Proc. R. Soc. London A, 439 (1992).
- [17] C. H. Bennett, F. Bessette, G. Brassard, L. Salvail, and J. Smolin. Cryptology 5, 5-28 (1992).
- [18] Barbara Chapman, Gabriele Jost and Ruud Van Der Pas. *Using OpenMP, Portable Shared Memory Parallel Programming*. The MIT Press, 2008.
- [19] David A. Patterson, John L. Hennessy, Ramón Canal Corretger. *Estructura y diseño de computadores, Vol 2..* Editorial Reverté, 2000.
- [20] George Gamow. *En el país de las maravillas: relatividad y cuantos*. Fondo de Cultura Económica, 1958.

## Anexo

A continuación hacemos una breve descripción del software utilizado durante la realización del presente trabajo.

### A.1. IFORT

Compilador de Intel para el lenguaje de programación Fortran, utilizado en este trabajo. Es un compilador de alto rendimiento pensado en especial para procesadores Intel, mayor información puede ser obtenida en:

`http://software.intel.com/en-us/articles/intel-composer-xe/`

En pruebas realizadas, superó ampliamente al popular compilador GNU `gfortran`. Además se utilizó la licencia de “Software No Comercial” (Non-Commercial Software), se puede encontrar información acerca de este tipo de Software de Intel en:

`http://software.intel.com/en-us/articles/non-commercial-software-download/`

### A.2. OpenMP

Es una “Interfaz de programación de aplicaciones” o API, por sus siglas en inglés. Permite la creación de programas que realicen cálculos en paralelo en arquitecturas de memoria compartida (véase [19]). La idea de su creación fue facilitar la creación de Software de cómputo en paralelo de manera sencilla y portable. OpenMP no es un lenguaje de programación, sino, consiste en una serie de directivas que son añadidas a los códigos fuentes de un programa secuencial, escrito en C/C++ o Fortran, de manera tal que describan cómo el trabajo es debe ser compartido entre los diferentes hilos de procesamiento que serán ejecutados en diferentes procesadores o núcleos y para ordenar el acceso a la memoria compartida por éstos hilos. Mayor información puede encontrada en [18] o en:

`http://www.openmp.org`

### A.3. Scilab

Su nombre resume su versatilidad: en español, “Laboratorio Científico”. Es un software libre de código abierto (Free Open Source Software) para Computación Numérica. Provee un ambiente de cómputo para aplicaciones en ingeniería y ciencia. Es un lenguaje de programación de alto nivel, con cientos de funciones matemáticas, permite por ejemplo, el acceso a estructuras de datos complejas, generación de gráficos en 2-D y 3-D, entre otras capacidades. **Scilab** es distribuido bajo licencia CeCILL, compatible con GPL. En el presente trabajo se hizo uso de la versión 5.3.3 por su estabilidad, fácil acceso a la ayuda y mejorada interfase. Puede encontrarse mayor información y realizar la descarga de esta poderosa herramienta en:

`http://www.scilab.org`

### A.4. Dia

Programa de desarrollo de diagramas, basado en gtk+. Fue utilizado para la realización de las figuras 1 y 2. Es distribuido bajo licencia GNU. Puede descargarse, y encontrarse documentación acerca de este software en:

`http://projects.gnome.org/dia/`

### A.5. Kile

Excelente entorno de desarrollo de  $\text{\LaTeX}$ , integrado en el entorno de escritorio KDE. Es distribuido bajo licencia GNU. Puede descargarse, y encontrarse documentación acerca de este software en:

`http://kile.sourceforge.net/`