

Trabajo de fin de Grado. Departamento de Física teórica

4º grado en Física

Universidad de Zaragoza



**Universidad**  
Zaragoza



# Aplicaciones de la formulación geométrica de la Mecánica Cuántica

---

Evolución Markoviana en sistemas cuánticos abiertos

Desarrollado bajo la dirección de:

Dr. Jesús Clemente Gallardo, Dr. José Fernando Cariñena Marzo

Néstor González Gracia

# Agradecimientos

Este trabajo ha sido desarrollado bajo la tutela de los doctores Jesús Clemente Gallardo y José Fernando Cariñena. Por su temática, era preciso dedicar tiempo y esfuerzo a aprender y trabajar sobre cuestiones de geometría diferencial y sistemas cuánticos abiertos. En estos temas, la ayuda y voluntad de docente de ambos han sido inestimables. También, he contado con la ayuda indirecta de quienes trataron antes temas similares; a este respecto, queda escrito mi profundo agradecimiento a Jorge Jover y Adrián Franco, cuyos trabajos han sido de gran utilidad. Finalmente, la ciencia no es una actividad individual, sino que reposa sobre el esfuerzo colectivo, y el mejor ejemplo de ello que puede dar el autor de este trabajo han sido las incontables puestas en común con Óscar Pérez y Arturo Sánchez, las cuales siempre me han resultado muy ilustrativas y me han permitido avanzar sobre más de un escollo.

# Índice general

Agradecimientos	II
Índice general	III
<b>1. Sistemas cuánticos markovianos</b>	<b>1</b>
1.1. Sistemas cuánticos cerrados . . . . .	1
1.1.1. Definición. . . . .	1
1.1.2. Estados mixtos: el formalismo de la matriz densidad. . . . .	2
1.2. Sistemas cuánticos abiertos . . . . .	5
1.2.1. Breve presentación. . . . .	5
1.2.2. Estados. . . . .	6
1.2.3. Evolución: Dinámica y medida. . . . .	7
1.3. Aplicaciones dinámicas . . . . .	7
1.3.1. Aplicaciones dinámicas universales. . . . .	8
1.3.2. Propiedades de los UDM. . . . .	9
1.3.3. Markovianidad. . . . .	10
1.4. Dinámica Markoviana: ecuación maestra . . . . .	11
<b>2. El sistema de 3 niveles y su enfriamiento por láser</b>	<b>15</b>
2.1. El sistema . . . . .	15
2.1.1. Presentación. . . . .	15
2.1.2. Tratamiento. . . . .	16
2.2. La dinámica . . . . .	17
2.2.1. Condiciones iniciales . . . . .	17
2.2.2. Evoluciones individuales y evolución total . . . . .	17
2.3. Control cuántico: enfriamiento por láser . . . . .	20
2.3.1. Construyendo el problema. . . . .	20
2.3.2. Enfriamiento por láser. . . . .	21
2.4. Lo que se ha hecho . . . . .	24
2.5. Lo que queda por hacer . . . . .	24
<b>Bibliografía</b>	<b>25</b>

<b>A. La formulación geométrica de la Mecánica Cuántica</b>	<b>2</b>
A.1. Introducción. Conceptos básicos de geometría diferencial . . . . .	2
A.2. La estructura algebraica del espacio de observables . . . . .	5
A.2.1. La estructura de $\mathbb{C}^*$ -álgebra en $\text{End}(\mathcal{H})$ . . . . .	6
A.2.2. La estructura de LJB álgebra en $\mathcal{O}$ . . . . .	7
A.2.3. Los espacios $\mathcal{O}^*$ y $\mathcal{O}^{**}$ . . . . .	9
A.3. Formulación geométrica del espacio de observables . . . . .	10
A.3.1. Los tensores $\Lambda$ y $\mathcal{R}$ . . . . .	11
A.3.2. Ejemplo: versión geométrica de la dinámica de la matriz densidad. . . . .	12
<b>B. Algoritmo de resolución del sistema de 3 niveles</b>	<b>14</b>

# Capítulo 1

## Sistemas cuánticos markovianos

En este trabajo, vamos a desarrollar un caso de dinámica perteneciente a lo que se conoce como *sistemas cuánticos Markovianos*. Tales sistemas son el resultado de aplicar una cierta hipótesis de simplificación sobre otro tipo de sistemas, los *sistemas cuánticos abiertos*. Nuestro objetivo en este capítulo será introducir la teoría general que gobierna estos sistemas abiertos, para lo cual comenzaremos recordando en la primera sección algunos de los resultados más importantes acerca de los bien conocidos *sistemas cerrados*. En la segunda sección introduciremos la definición de sistema cuántico abierto y generalizaremos a ellos tales resultados. Por último, en las dos últimas secciones introduciremos la idea de *aplicación dinámica universal* y la aproximación Markoviana.

### 1.1. Sistemas cuánticos cerrados

**1.1.1 Definición.** Consideremos un cierto sistema  $S$ . Diremos que  $S$  es un *sistema cerrado* si no existe ningún otro sistema con el que presente una interacción<sup>1</sup>. En estos sistemas, los postulados de la Mecánica Cuántica son de aplicación directa, lo que lleva los siguientes resultados bien conocidos.

Primero, los postulados establecen que los estados en los que un sistema  $S$  puede encontrarse se representan mediante los elementos de un espacio de Hilbert,  $\mathcal{H}_S$ , de la forma  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_S$ . Para ser rigurosos, hemos de puntualizar:

1. De todos los elementos del espacio  $\mathcal{H}_S$ , la interpretación probabilística de la Mecánica Cuántica nos lleva incluir en el modelo sólo aquellos que satisfacen<sup>2</sup>  $\|\psi\| = 1$ . Dicho espacio es conocido como *espacio proyectivo*  $\mathcal{P}$ , y, debido a la condición de norma unidad, carece de estructura de espacio lineal. Representaremos los puntos del proyectivo como  $[\psi] \in \mathcal{P}$ .
2. Los elementos  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_S$  representan lo que se conoce como *estados puros*. Dado el carácter introductorio de este primer apartado, dejamos la definición rigurosa para más adelante.

---

<sup>1</sup>El lector encontrará explicada la importancia tanto de mencionar que no existe interacción con otro sistema como de los resultados que se recogen cuando generalicemos la noción a sistemas cuánticos abiertos; por el momento le pedimos paciencia.

<sup>2</sup>Aquí, la norma en  $\mathcal{H}_S$  es la inducida por el producto escalar  $\|\psi\| = (\langle\psi|\psi\rangle)^{1/2}$ .

Los postulados también establecen que la dinámica de estos estados viene dada por la ecuación de Schrödinger:

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

donde  $H(t)|\psi(t)\rangle$  representa la acción del operador Hamiltoniano sobre el estado  $|\psi(t)\rangle$ . Como consecuencia de la ecuación de Schrödinger, la evolución de un estado puede ser entendida como la acción sobre el estado de un cierto operador unitario  $U(t, t_0) : \mathcal{H}_S \mapsto \mathcal{H}_S$ , que llamamos *operador de evolución temporal*:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle,$$

donde  $U(t, t_0) \in U(n)$ , con  $n = \dim(\mathcal{H}_S)$ , y donde la condición inicial que permite resolver la ecuación de Schrödinger es  $U(t_0, t_0) = \mathbb{I}$ . Por ejemplo, en el caso particular en que el Hamiltoniano no depende del tiempo<sup>3</sup>, se tiene:

$$\frac{d}{dt}U(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar}HU(t, t_0) \implies U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}.$$

Matemáticamente la aplicación  $\Phi_S : U(N) \times \mathcal{H}_S \mapsto \mathcal{H}_S$  definida por  $(U, |\psi\rangle) \mapsto U|\psi\rangle$  se corresponde con la acción<sup>4</sup> del grupo unitario  $U(N)$  sobre el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_S$ . Finalmente, dado que los observables que codifican las magnitudes físicas son operadores hermíticos sobre  $\mathcal{H}_S$ , el proceso de medida está definido mediante el emparejamiento  $\text{Herm}(\mathcal{H}_S) : \mathcal{H}_S \mapsto \mathbb{R}$ :

$$(A, |\psi\rangle) \mapsto \frac{\langle\psi|A|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

**1.1.2 Estados mixtos: el formalismo de la matriz densidad.** Cuando desconocemos el estado en que se encuentra un sistema pero conocemos que está restringido a una cierta familia de estados, el procedimiento habitual es introducir la matriz densidad. Si  $\{|\chi_k\rangle\}$  es la tal familia de estados del sistema  $S$ , entonces la matriz densidad de dicho sistema es:

$$\rho_S = \sum_k r_k |\chi_k\rangle\langle\chi_k|, \quad (1.1)$$

donde  $r_k \geq 0 \forall k \in \mathbb{N}$  y  $\sum_i r_i^2 = 1$ . Una forma más rigurosa de introducir este objeto es considerar el ya introducido valor esperado de un observable con respecto a un estado y percibir:

$$\frac{\langle\psi|A|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \text{tr} \left( \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle} A \right)$$

---

<sup>3</sup>En el resto de casos, la solución se obtiene por la integración temporal de  $H(t)$ :  $U(t, t_0) = \mathcal{T}_\leftarrow \left[ e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(\tau) d\tau} \right]$ , donde  $\mathcal{T}_\leftarrow$  es llamado comúnmente *operador de ordenación temporal* y cuya función es ordenar en el sentido que indica la flecha los argumentos temporales de los operadores que dependen del tiempo ([4], cap. 3.1).

<sup>4</sup>Por **acción de un grupo  $G$  sobre una variedad  $M$**  entendemos la aplicación  $\Phi : G \times M \mapsto M$  que cumple las propiedades  $\Phi(e, p) = p$  y  $\Phi(fg, p) = \Phi(f, \Phi(g, p))$ , donde  $e$  es el elemento neutro del grupo. En el caso en que  $M$  sea un espacio vectorial, si  $\Phi$  es lineal recibe el nombre de **representación del grupo**, ya que entonces su acción sobre los elementos de  $M$  queda caracterizada por los elementos del grupo general lineal  $GL(N)$  (matrices invertibles de dimensión  $N \times N$ ).

Vemos así que cada punto del espacio proyectivo  $[\psi] \in \mathcal{P}$  define un proyector de rango uno (es decir, proyecta sobre espacios de dimensión uno) que permite recuperar adecuadamente las magnitudes físicas del sistema. Dado que toda combinación convexa de proyectores de este tipo codifica también un estado físico admisible, definimos:

$$D(\mathcal{H}_S) = \left\{ \rho_S = \sum_k p_k \rho_{\psi_k} \mid p_k \geq 0, \sum_j p_j = 1 \right\}$$

Así definido,  $D(\mathcal{H}_S)$  es el espacio más general de estados en los que puede encontrarse un sistema cuántico definido en  $\mathcal{H}_S$ . Puede comprobarse que, de cualquier manera que se lo construya, las matrices densidad cumplen las propiedades de **hermiticidad**, **definición positiva** y **traza unidad**:

$$1. \rho_S^\dagger = \rho_S \quad 2. \langle \psi | \rho_S | \psi \rangle \geq 0 \quad 3. \text{tr}(\rho_S) = 1$$

Debido a que la matriz densidad  $\rho$  codifica toda la familia de estados  $\{|\chi_i\rangle\}$ , suele ser referida como *estado mixto*. Por contraposición, cada uno de los estados  $|\chi_i\rangle \in \mathcal{H}_S$  son llamados *estados puros*. Es sencillo ver que la matriz densidad codifica un estado puro  $|\chi_j\rangle$  cuando  $r_i = 0 \forall i \neq j$ . Más formalmente, para medir el grado de pureza de un sistema, suele definirse la cantidad:

$$P = \text{tr}(\rho_S^2).$$

Bajo esta definición,  $0 \leq P \leq 1$ , mientras que  $P = 1$  sólo para estados puros. Otra medida útil es la *entropía de Von-Neumann*,  $S_{\text{VN}} = -k \text{tr}(\rho_S \ln(\rho_S))$ . La entropía de Von-Neumann es una medida de la impurificación del sistema:  $S_{\text{VN}} = 0$  para un estado puro y aumenta su valor para estados mixtos.

En el formalismo de la matriz densidad, la dinámica seguida por el sistema es descrita por la ecuación de Liouville-von Neumann:

$$\frac{d}{dt} \rho_S = -\frac{i}{\hbar} [H(t), \rho_S]. \quad (1.2)$$

Esta ecuación representa el análogo de la ecuación de Schrödinger en el formalismo de la matriz densidad. De forma análoga a lo que ocurría para estados, la ecuación implica que la matriz densidad en un tiempo  $t \geq t_0$  es:

$$\rho_S(t) = U(t, t_0) \rho_S(t_0) U^\dagger(t, t_0), \quad (1.3)$$

donde  $U(t, t_0)$  es el mismo operador que en el caso de estados puros, y  $U^\dagger(t, t_0)$  es su Hermítico conjugado. En este caso, la aplicación  $\Phi_D : U(N) \times D(\mathcal{H}_S) \rightarrow D(\mathcal{H}_S)$  definida como en 1.3 se corresponde con la acción del grupo unitario sobre  $D(\mathcal{H}_S)$ .

El caso del espacio de matrices densidad  $D(\mathcal{H}_S)$  es, atendiendo a su dinámica unitaria, el caso de una *variedad estratificada*. Dado que la evolución unitaria preserva el espectro de  $\rho_S$ ,  $D(\mathcal{H}_S)$  puede dividirse en estratos de rango constante, desde 1 para estados puros hasta  $N$  para estados completamente mezclados<sup>5</sup>. Podemos ilustrar el formalismo de la matriz densidad con el

<sup>5</sup>Hacemos notar al lector que un estado completamente mezclado es aquel en que si  $\rho_S = \sum_i r_i |\chi_i\rangle\langle\chi_i|$  entonces

siguiente ejemplo.

### Ejemplo: El sistema de 2 niveles

En el caso del sistema de dos niveles, llamado *qubit*, el espacio de matrices densidad es un espacio vectorial real de dimensión  $2^2 = 4$ , siendo una base adecuada la formada por la identidad y las matrices de Pauli:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Cualquier matriz densidad del sistema se escribe entonces como:

$$\rho_S^{(2)} = \frac{1}{2}(\mathbb{I}_2 + x_1\sigma_1 + x_2\sigma_2 + x_3\sigma_3) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + x_3 & x_1 - ix_2 - i \\ x_1 + x_2 & 1 - x_3 \end{pmatrix}.$$

No es difícil comprobar<sup>6</sup> que así la pureza  $P$  es:  $P = \frac{1}{2}(1 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)$ .

Dado que debe cumplirse  $0 \leq P \leq 1$ , el conjunto de posibles matrices densidad queda determinado con la condición  $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq 1$ , la cual representa la esfera de radio unidad. Esta esfera es llamada *esfera de Bloch*. Los estados puros ( $P = 1$ ) se encuentran en su superficie, que coincide con el estrato de rango unidad. El interior de la esfera codifica los estados mixtos ( $P < 1$ ), y constituye el estrato de rango 2.

Las curvas  $\rho_S(t)$  son tales que su pendiente  $\frac{d}{dt}\rho_S$  para cada valor del tiempo (considerado ahora como el parámetro de la curva) es siempre tangente al estrato que la contiene. La siguiente figura resume esquemáticamente estos hechos:

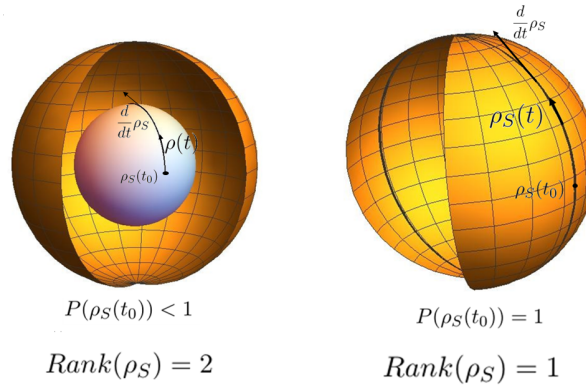


Figura 1.1: Estratificación del espacio de matrices densidad  $D(\mathcal{H}_S)$  para el sistema de 2 niveles o *qubit*. El interior de la esfera de Bloch (izquierda) conforma el estrato de rango 2 y su superficie (derecha) el estrato de rango 1. Se muestran también dos curvas ejemplo de una dinámica unitaria: la curva en el interior de la esfera corresponde a la dinámica unitaria que parte de un estado mixto y la curva sobre la superficie de la esfera corresponde con la dinámica unitaria que parte de un estado puro. Ambas conservan la pureza de su estado inicial (radio de la esfera).

$r_i \neq 0 \forall i = 1, \dots, N$ . No debe confundirse con un estado *máximamente mezclado*, el cual cumple tanto  $r_i \neq 0 \forall i = 1, \dots, N$  como  $P = 1/N$ .

<sup>6</sup>Se sigue inmediatamente del hecho de que la base  $\{\mathbb{I}_2, \{\sigma_i\}\}$  es una base ortonormal, en el sentido en que  $(\sigma_i, \sigma_j) = \text{tr}(\sigma_i \sigma_j) = 2\delta_{ij}$ .



La dinámica Hamiltoniana (unitaria) preserva el espectro de la matriz densidad, y por tanto también su traza, rango y pureza. En general, esto significa que la evolución  $\dot{\rho}_S(t)$  es tangente a los estratos, permaneciendo por tanto  $\rho_S$  siempre en el mismo estrato. En el caso del sistema de dos niveles, esto significa además que las curvas ocurrirán siempre sobre la superficie de una esfera de radio  $r = P_0$ , donde  $P_0$  es la pureza inicial del sistema.

Finalmente, si hemos de medir una cierta magnitud física asociada al observable  $A \in \text{Herm}(\mathcal{H}_S)$ , de lo dicho se comprende que el valor que adoptará tal magnitud en nuestro sistema  $S$  será:

$$\langle A \rangle = \text{tr}(A\rho_S). \quad (1.4)$$

## 1.2. Sistemas cuánticos abiertos

**1.2.1 Breve presentación.** De forma general, un *sistema abierto* es un sistema cuántico que está en interacción con otro sistema cuántico, que llamamos *entorno*. La idea surge para tratar aquellas situaciones en las que un sistema interactúa con y es afectado por otro sistema (entorno), cuyo elevado número de grados de libertad nos impide tener un conocimiento completo sobre él. Ejemplos físicos de estos sistemas serían el proceso de medida cuántico, en el que sobre el sistema actúa un aparato de medida externo, o el movimiento Browniano, en el que el fluido ejerce sobre el sistema una fuerza estocástica. En realidad la construcción de sistemas cerrados es una idealización, dado que siempre tendremos un entorno que influenciará, en mayor o menor medida, nuestro sistema. Los sistemas abiertos suponen una construcción menos aproximada, viniendo por tanto a generalizar la idea de sistemas cerrados introducida en la sección anterior, para los que, hablando en términos cuánticos, no existe intercambio de información con un sistema externo, de forma que su dinámica completa se reduce a la dinámica unitaria interna.

Para poner esta idea en términos más formales, consideremos un cierto sistema  $S$ , el cual viene descrito por los elementos del espacio de Hilbert que denotaremos como  $\mathcal{H}_S$ . Consideremos también otro sistema,  $E$ , que de manera análoga vendrá descrito por los elementos del espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_E$ . Introduciendo la nueva terminología, diremos que  $S$  es el *sistema cuántico abierto* y  $E$  el *sistema cuántico entorno* con el que  $S$  intercambia información. El espacio total, al que llamaremos  $\mathcal{H}$ , vendrá dado por el producto tensorial de los espacios de Hilbert individuales,  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ .

Éste es el tipo de sistemas con los que vamos a tratar. Es sencillo ver que van a presentar algunas complicaciones, como la dificultad de modelar el entorno o la imposibilidad de tratar la evolución de los estados de  $\mathcal{H}_S$  como unitaria, debido precisamente a que  $S$  es abierto y por tanto los estados de  $\mathcal{H}$  no serán en general separables, i.e., no podrán ponerse en la forma  $|\psi\rangle = |\psi_S\rangle \otimes |\psi_E\rangle$ , sino que presentarán entrelazamiento. Esto trae algunas consecuencias a las que tendremos que hacer frente, como por ejemplo que, si estamos tratando con estados mixtos en  $S$ , existe la posibilidad de que el rango de la matriz densidad de nuestro sistema abierto,  $\rho_S$ , crezca en el tiempo, así como que la pureza del estado decrezca (lo que constituye el llamado fenómeno de decoherencia). Para salvar estas dificultades y poder abordar estas situaciones, conviene tener en cuenta:

1. El sistema total, entendido como el sistema modelizado por los elementos del espacio total  $\mathcal{H}$ , es un sistema cuántico cerrado, por lo que en él sí es de aplicación el resultado de evolución unitaria de los estados.

2. Dado que nuestro interés se centra primordialmente en las características del sistema  $S$ , centraremos nuestros esfuerzos en conocer no la dinámica de los estados de  $\mathcal{H}$  sino exclusivamente la de los estados de  $\mathcal{H}_S$ .

Veremos a continuación cómo podemos usar estas dos nociones para lograr la descripción que perseguimos.

**1.2.2 Estados.** En virtud de que  $\mathcal{H}$  es un sistema cerrado es claro que para caracterizar nuestros estados podemos definir matrices densidad  $\rho \in D(\mathcal{H})$ , donde por  $D(\mathcal{H})$  denotamos el espacio de matrices densidad sobre  $\mathcal{H}$ . Sin embargo, dado que estamos interesados en describir el sistema  $S$ , los objetos que codifican la información que buscamos son las matrices densidad sobre  $\mathcal{H}_S$ ,  $\rho_S \in D(\mathcal{H}_S)$ . Estas matrices son llamadas comúnmente *matrices densidad reducidas*, puesto que se obtienen a partir de la matriz densidad total tomando la traza parcial sobre los grados de libertad del entorno, i.e.:

$$\rho_S = \text{tr}_E(\rho). \quad (1.5)$$

Para comprender mejor por qué el objeto  $\rho_S$  (definido como se ha definido) contiene la información física del sistema de interés  $S$ , reproducimos el argumento empleado por A. Rivas y S. Huelga, cuya discusión detallada se encuentra en [5].

Consideremos que deseamos medir la magnitud física asociada a un cierto observable sobre  $S$   $A \in \text{Herm}(\mathcal{H}_S)$ . Podemos construir en el sistema total el operador  $A \otimes \mathbb{I}_E \in \text{Herm}(\mathcal{H})$ , donde por  $\mathbb{I}_E$  denotamos la identidad del espacio entorno. Podemos computar el valor de la magnitud física asociada este último observable a partir de  $\rho$  mediante:

$$\langle A \otimes \mathbb{I}_E \rangle = \text{tr}((A \otimes \mathbb{I}_E)\rho).$$

Si tomamos  $\{|\psi_i^S\rangle\}$  como base de  $\mathcal{H}_S$  y  $\{|\psi_j^E\rangle\}$  como base de  $\mathcal{H}_E$  podemos construir la base del espacio total  $\mathcal{H}$  como:

$$\{|\psi_i^S\rangle \otimes |\psi_j^E\rangle\} := \{|\psi_i^S\rangle |\psi_j^E\rangle\}.$$

El valor medio  $\langle A \otimes \mathbb{I}_E \rangle$  puede desarrollarse entonces hasta encontrar:

$$\langle A \otimes \mathbb{I}_E \rangle = \sum_{i,j} \langle \psi_i^S | A | \psi_j^E \rangle \langle \rho | \psi_j^E \rangle | \psi_i^S \rangle.$$

De forma que denotando

$$\rho_S := \sum_j \langle \psi_j^E | \rho | \psi_j^E \rangle := \text{tr}_E(\rho), \quad (1.6)$$

acabamos encontrando que la magnitud de interés  $A$  posee el valor:

$$\langle A \otimes \mathbb{I}_E \rangle = \sum_i \langle \psi_i^S | A \rho_S | \psi_i^S \rangle = \text{tr}_S(A \rho_S).$$

Esta expresión recupera el conocido resultado de sistemas dinámicos cerrados presentado en la sección anterior en la ecuación (1.4). Podemos ver también la necesidad de introducir estados mixtos: en general, la traza parcial de  $\rho$  dará lugar, aunque  $\rho$  sea un estado puro en  $\mathcal{H}$  a un estado mixto en  $\mathcal{H}_S$ . Sólo podríamos recuperar un estado puro en el sistema S cuando  $\rho$  fuese separable, pero en general no será el caso.

**1.2.3 Evolución: Dinámica y medida.** En cuanto a la dinámica, es claro que en general tanto la matriz densidad del espacio total como la matriz densidad reducida dependerán del tiempo:  $\rho = \rho(t)$  y  $\rho_S = \rho_S(t)$ . Dado que  $\rho(t)$  evoluciona de forma unitaria, y dada la relación entre las dos matrices, podemos encontrar a partir de  $\rho(t_0)$  la matriz densidad reducida en cualquier tiempo  $t \geq t_0$ , simplemente evolucionando  $\rho(t_0)$  con el operador  $U(t, t_0)$  y tomando la traza parcial sobre el resultado:

$$\rho_S(t) = \text{tr}_E(U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0)), \quad (1.7)$$

donde recalcamos que  $U(t, t_0)$  es el operador unitario de avance temporal sobre sistema total  $\mathcal{H}$ .

Con respecto a la medida en  $\mathcal{H}$ , podemos pensar en observables  $A : \mathcal{H} \mapsto \mathcal{H}$  cuyos valores esperados vendrán dados por  $\langle A \rangle = \text{tr}(A\rho)$ , donde  $\rho$  es la matriz densidad del sistema total. Los observables de interés, no obstante, serán como se ha dicho aquellos que codifiquen la información de las magnitudes físicas de los estados de  $S$ , i.e., aquellos de la forma  $B \otimes \mathbb{I}_E$ . El valor esperado de un observable de este tipo se obtiene entonces a partir del resultado ya visto:

$$\langle B \otimes \mathbb{I}_E \rangle = \text{tr}_S(B\rho_S) = \sum_i \langle \psi_i^S | B \rho_S | \psi_i^S \rangle, \quad (1.8)$$

Para cerrar esta sección hacemos notar al lector el paralelismo en los resultados referidos a sistemas cuánticos cerrados y su extensión a sistemas abiertos. En efecto, la ecuación (1.1) de definición de la matriz densidad en un sistema cerrado encuentra su análogo en las ecuaciones (1.5) y (1.6) para sistemas abiertos, así como las ecuaciones (1.3) y (1.4) de dinámica y medida en sistemas cerrados se traducen en los resultados (1.7) y (1.8).

### 1.3. Aplicaciones dinámicas

Consideremos la expresión (1.7). Podemos ver esta evolución como el paso  $\rho_S(t_0) \mapsto \rho_S(t)$ , y pensar en  $\rho_S(t)$  como el resultado de la acción de una cierta aplicación:

$$\mathcal{E}_{t,t_0} : D(\mathcal{H}_S) \mapsto D(\mathcal{H}_S), \quad \mathcal{E}_{t,t_0}(\rho_S(t_0)) := \rho_S(t),$$

donde por  $D(\mathcal{H}_S)$  denotamos el espacio de matrices densidad sobre  $\mathcal{H}_S$ . En adelante, para simplificar notación escribiremos la acción de  $\mathcal{E}_{t,t_0}$  simplemente por yuxtaposición,  $\mathcal{E}_{t,t_0}(\rho(t_0)) := \mathcal{E}_{t,t_0}\rho_S(t_0)$ . Esta aplicación recibe el nombre de *aplicación dinámica*<sup>7</sup>. En esta sección derivaremos la forma que, bajo algunas aproximaciones que comentaremos, presentan las aplicaciones dinámicas, y analizaremos tanto las propiedades que poseen por construcción como las que debemos exigir para lograr que codifiquen evoluciones físicamente aceptables. La figura siguiente resume la dinámica en sistemas cuánticos abiertos:

$$\begin{array}{ccc}
 \rho(t_0) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_E(t_0) & \xrightarrow{U(t, t_0)} & \rho(t) \\
 \text{\scriptsize } tr_E \downarrow & & \downarrow \text{\scriptsize } tr_E \\
 \rho_S(t_0) & \xrightarrow{\mathcal{E}_{t, t_0}} & \rho_S(t)
 \end{array}$$

Figura 1.2: Diagrama conmutativo de la dinámica en sistemas abiertos

**1.3.1 Aplicaciones dinámicas universales.** Asumamos que en un tiempo  $t_0$  podemos preparar el sistema de forma que su estado sea separable<sup>8</sup>, i.e., que venga dado por  $\rho(t_0) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_E(t_0)$ . En ese caso, la matriz densidad reducida en cualquier tiempo posterior  $\rho_S(t)$  vendrá dada por:

$$\rho_S(t) = \text{tr}_E(U(t, t_0)[\rho_S(t_0) \otimes \rho_E(t_0)]U^\dagger(t, t_0)) = \mathcal{E}_{t, t_0}\rho_S(t_0).$$

La propiedad que queremos hacer notar consiste en que, en este caso, es posible escribir esta evolución de forma compacta en términos de la matriz  $\rho_S$  y de una base ortonormal de  $\mathcal{H}_E$ . En efecto, si escogemos una base ortonormal  $\{|\psi_i^E\rangle\}$  de  $\mathcal{H}_E$ , podemos escribir la matriz densidad del entorno por medio del teorema espectral como:

$$\rho_E = \sum_i \lambda_i |\psi_i^E\rangle\langle\psi_i^E|.$$

Empleando esta descomposición obtenemos:

$$\mathcal{E}_{t, t_0}\rho_S(t_0) = \sum_{i, j} \lambda_j \text{tr}_E(U(t, t_0)[\rho_S(t_0) \otimes |\psi_i^E\rangle\langle\psi_i^E|]U^\dagger(t, t_0)).$$

De esta forma, si definimos  $W_{ij}(t, t_0) = \sqrt{\lambda_j}\langle\psi_i^E|U(t, t_0)|\psi_j^E\rangle$  podemos escribir finalmente<sup>9</sup>

<sup>7</sup>La terminología inglesa original es *dynamical map*.

<sup>8</sup>Tal suposición es efectivamente razonable, dado que, a pesar de que no podemos evitar la presencia de un entorno influyente en nuestro sistema, podemos preparar un estado conocido, antes de dejarlo evolucionar bajo contacto con ese entorno.

<sup>9</sup>Para verificar la igualdad el lector encontrará suficiente tener en cuenta que la familia  $\{|\psi_i^E\rangle\}$  es base de  $\mathcal{H}_E$  y aplicar la propiedad del producto tensorial  $\langle\phi_\alpha|A \otimes B|\phi_\beta\rangle = \langle\phi_\alpha|A|\phi_\beta\rangle\langle\phi_\alpha|B|\phi_\beta\rangle$

([4], [5]):

$$\mathcal{E}_{t,t_0}\rho_S(t_0) = \rho_S(t) = \sum_{i,j} W_{ij}(t, t_0)\rho_S W_{ij}^\dagger(t, t_0). \quad (1.9)$$

Continuando con el paralelismo con sistemas cerrados, el lector podrá notar la analogía entre las ecuaciones (1.3) y (1.9), donde los operadores  $W_{ij}(t, t_0)$  hacen, en suma, el papel del operador evolución  $U(t, t_0)$ . Hacemos notar que no hemos considerado en ellos dependencia con el estado sobre el que actúan,  $W(t, t_0, \rho_S)$ . Al hacerlo, hemos restringido el resultado desde el conjunto de aplicaciones dinámicas al de *dinámicas universales* (UDM<sup>10</sup>), las cuales reciben este calificativo precisamente por ser independientes de  $\rho_S$ . Como veremos, el uso de UDM nos permitirá cubrir todos los propósitos de nuestro análisis<sup>11</sup>.

**1.3.2 Propiedades de los UDM.** Cerramos el análisis de los UDM con un análisis de sus propiedades. Este análisis será abordado en dos bloques: primero caracterizaremos las propiedades que poseen *de facto*, y después añadiremos una última propiedad simplficadora, la aproximación Markoviana, la cual podremos interpretar físicamente.

Primero, es sencillo ver que la aplicación  $\mathcal{E}_{t,t_0}$  transforma matrices densidad en matrices densidad. Con ello queremos decir que puede demostrarse que si  $\rho_S(t_0)$  es una matriz densidad,  $\rho_S(t) = \mathcal{E}_{t,t_0}\rho(t_0)$  cumplirá también las propiedades de matriz densidad. Por ejemplo, desde (1.9) puede verificarse que la matriz es Hermítica, dado que el lado derecho de la igualdad es invariante bajo conjugación Hermítica, así como también es de traza unidad puesto que se verifica la propiedad:

$$\sum_{i,j} W_{ij}(t, t_0)W_{ij}^\dagger(t, t_0) = \mathbb{I}.$$

Por otro lado, podríamos pensar que para cada UDM de la forma  $\mathcal{E}_{t_2,t_1}$ , con  $t_2 > t_1$ , existiese una cierta aplicación inverso,  $(\mathcal{E}_{t_2,t_1})^{-1} = \mathcal{E}_{t_1,t_2}$ . Sin embargo, en sistemas cuánticos abiertos esto no es cierto:

**Teorema 1.1** *Un UDM es invertible si y sólo si es unitario*<sup>12</sup>.

Las aplicaciones que codifican la dinámica de un sistema abierto, como hemos visto, no son unitarias, por lo que este resultado previene a todo  $\mathcal{E}_{t,t_0}$  de tener inversa.

Otro teorema de la misma fuente ([5]) nos permite ver que los UDM son también contractivos:

**Teorema 1.2** *Una aplicación sobre el espacio de matrices densidad  $D(\mathcal{H}_S)$  deja dicho espacio invariante si y solo si preserva la traza y es contractivo*<sup>13</sup>.

Podemos utilizar este resultado para entender que, dado que ya sabemos que un UDM transforma matrices densidad en matrices densidad y por tanto preserva la traza, los UDM deben ser

<sup>10</sup> *Universal Dynamical Map*, por sus siglas en inglés.

<sup>11</sup> Está mostrado en [5] que no restringirse a UDM modifica el resultado (1.9) simplemente incluyendo la dependencia en  $\rho_S$ ,  $\mathcal{E}_{t,t_0}\rho(t_0) = \rho(t) = \sum_{i,j} W_{ij}(t, t_0, \rho_S)\rho_S W_{ij}^\dagger(t, t_0, \rho_S)$

<sup>12</sup> Teorema 4.5 de [5], cap. 4.4

<sup>13</sup> Teorema 4.4 de [5], cap. 4.4

por consiguiente contractivos. Esto quiere decir que se cumple<sup>14</sup>:

$$\|\mathcal{E}_{t,t_0}\| \leq 1, \quad \forall t \in \mathbb{R}^+.$$

Finalmente, puede ser demostrado que los UDM satisfacen, además de la propiedad de positividad, la de *positividad completa*:

**Definición 1.1** *Una aplicación  $F : V \mapsto V$ , donde  $V$  es un cierto espacio vectorial, es **completamente positiva** si la aplicación*

$$F \otimes \mathbb{I}_W : V \otimes W \mapsto V \otimes W$$

*es positiva para todo espacio vectorial  $W$ .*

La demostración completa de que los UDM satisfacen esta propiedad puede ser encontrada en [5]. La positividad completa es una condición más restrictiva que la positividad, pues implica que ésta ha de mantenerse aunque extendamos el sistema mediante el producto tensorial con otro espacio, cualquiera que sea éste. Físicamente, podemos entender el haber encontrado que los UDM son completamente positivos: nunca podemos evitar el contacto del sistema con un entorno  $W$ , pero la dinámica tiene que estar dada por operadores que nos mantengan dentro del espacio de estados posibles, sea cual sea la influencia de ese entorno.

A modo de resumen, podemos establecer que todo UDM  $\mathcal{E}_{t,t_0}$  cumple:

- Conserva la traza, la hermiticidad y la positividad de  $\rho_S(t_0)$ .
- Es contractivo.
- Es completamente positivo.
- No es invertible.

**1.3.3 Markovianidad.** Tal y como hemos mostrado, la dinámica sobre el espacio de matrices densidad viene dada por el conjunto de los UDM. Para este conjunto, consideremos ahora la siguiente ley de composición:

$$\mathcal{E}_{t_2,t_1} \mathcal{E}_{t_1,t_0} = \mathcal{E}_{t_2,t_0}, \quad t_2 \geq t_1 \geq t_0$$

Tal ley es interna en el conjunto de UDM, e induce en él la estructura de semigrupo<sup>15</sup>. Dedicemos unas palabras a analizar el significado de esta expresión. A la representación de Kraus de un UDM hemos llegado bajo la suposición de que el estado inicial, en  $t_0$ , era separable  $\rho(t_0) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_E(t_0)$ . Si aceptamos lo anterior, aceptamos que todo UDM  $\mathcal{E}_{t_2,t_0}$  puede expresarse como la composición de dos aplicaciones coincidentes en un tiempo intermedio,  $t_1$ ,  $\mathcal{E}_{t_2,t_1} \mathcal{E}_{t_1,t_0} = \mathcal{E}_{t_2,t_0}$ . Como el estado en  $t_0$  es separable, podemos estar seguros de que  $\mathcal{E}_{t_1,t_0}$  es efectivamente un UDM. Sin embargo, no ocurre lo mismo con el factor  $\mathcal{E}_{t_2,t_1}$ , debido

<sup>14</sup>La norma de un elemento  $\mathcal{E}_{t,t_0}$  viene inducida por la norma en el espacio de objetos sobre los que actúa, en este caso el de matrices densidad:  $\|\mathcal{E}_{t,t_0}\| = \sup_{\rho_S \in D(\mathcal{H}_S)} \left\{ \frac{\|\mathcal{E}_{t,t_0} \rho_S(t_0)\|}{\|\rho_S\|} \right\}$

<sup>15</sup>En efecto, la estructura presentada por el conjunto de UDM más la ley de composición es de semigrupo, puesto que tal conjunto no cuenta con elemento inverso.

que las correlaciones que surgen entre sistema y entorno entran en el producto tensorial como  $\rho(t_1) = \rho_S(t_1) \otimes \rho_E(t_1) + \rho_{\text{corr}}$ , con  $\rho_{\text{corr}} \in D(\mathcal{H})$ . La siguiente figura ilustra estos hechos:

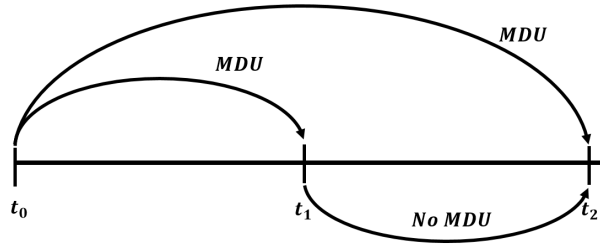


Figura 1.3: La evolución bajo UDM requiere del inicio en un instante en que el estado sea separable (figura inspirada en los esquemas de [5]).

Para poder aceptar la ley de composición, por tanto, el término de correlación debe tener un peso suficientemente pequeño sobre la dinámica del sistema. Asumir esto es lo que se conoce como *aproximación Markoviana*, y físicamente equivale a despreciar efectos de memoria, es decir, que la evolución del sistema viene dada sólo por el momento presente, y no por toda la evolución anterior a él.

Encontramos así que, al generalizar a sistemas cuánticos abiertos, la dinámica del sistema de interés  $S$  pasa de estar regida por un grupo uniparamétrico de transformaciones unitarias (dinámica Hamiltoniana) a estar regida por un semigrupo no unitario de transformaciones completamente positivas. Físicamente, en el paso del grupo al semigrupo perdemos la reversibilidad temporal. Los UDM serán adecuados por tanto para representar procesos irreversibles como la medida cuántica o el decaimiento de partículas inestables.

## 1.4. Dinámica Markoviana: ecuación maestra

Todo lo dicho ha servido para caracterizar la dinámica en sistemas cuánticos abiertos mediante la acción de una aplicación UDM. Presentamos ahora la ecuación diferencial a la que da lugar esta caracterización. Para hallarla, escribimos:

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\rho_S(t+h) - \rho_S(t)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \left( \frac{\mathcal{E}_{t+h,t} - \mathbb{I}_S}{h} \right) \rho_S(t).$$

Aplicando la hipótesis Markoviana y tras un breve cálculo encontramos:

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \mathcal{L}(t)\rho_S(t), \quad \mathcal{L}(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathcal{E}_{t+h,t} - \mathbb{I}_S}{h}. \quad (1.10)$$

El operador  $\mathcal{L}$  recibe el nombre de *operador de Lindblad-Kossakowski* o, informalmente, *Lindbladiano*. Por su parte, si calculamos la derivada temporal de la aplicación  $\mathcal{E}_{t,t_0}$  encontramos:

$$\frac{d}{dt}\mathcal{E}_{t,t_0} = \mathcal{L}(t)\mathcal{E}_{t,t_0}. \quad (1.11)$$

Dependiendo de la fuente, el operador  $\mathcal{L}$  es referido a veces como *superoperador*, dado que actúa sobre las matrices densidad  $\rho_S \in D(\mathcal{H}_S)$ . En el caso en el que no dependa del tiempo, tenemos:

$$\mathcal{E}_{t,t_0} = e^{\mathcal{L}t}$$

De modo que el operador de Lindblad constituye el *generador infinitesimal* del semigrupo de aplicaciones dinámicas universales. Debido a ello, este operador es de gran importancia.

En 1976, Gorini, Kossakowski y Surdashaan desarrollaron la forma general del generador del semigrupo de UDM completamente positivos para el sistema de  $N$  niveles [7]. Simultánea e independientemente, Lindblad obtuvo el resultado para el caso de generadores acotados en sistemas infinitos en [8]. El resultado para  $N$  niveles es de la forma (véase [7])<sup>16</sup>:

$$\mathcal{L}\rho_S = -i[H, \rho_S] + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} c_{ij} ([F_i \rho_S, F_j^\dagger] + [F_i, \rho_S F_j^\dagger]). \quad (1.12)$$

Aquí,  $H$  es un operador Hermítico,  $[\cdot, \cdot]$  es el conmutador de matrices  $[A, B] = AB - BA$ , y  $\{F_i\}_{i=1}^{N^2-1}$  es un conjunto de  $N^2 - 1$  operadores de traza nula y ortonormales según el producto impuesto por la traza, es decir,  $tr(F_i^\dagger F_j) = \delta_{ij}$ ,  $\forall i, j = 1, 2, \dots, N^2 - 1$ . Los coeficientes  $\{c_{ij}\}_{i,j=1}^{N^2-1}$  forman a su vez una matriz compleja definida positiva. Respecto a esta ecuación, hacemos dos precisiones:

- La ecuación se comprende cuando es vista en el espacio de matrices complejas de dimensión  $N \times N$ ,  $M(\mathbb{C}, N)$ . En este espacio, los  $N^2 - 1$  operadores  $F_i$  forman junto con la identidad una base. Ante la elección de  $\{F_i\}_{i=1}^{N^2-1}$ , la matriz  $c_{ij}$  queda fijada.
- Para  $\mathcal{L}$  fijo, el operador  $H$  queda determinado por la condición  $tr(H) = 0$ .

En lugar de trabajar con el resultado directo de los trabajos de Gorini, Kosakowski y Surdashaan, vamos a modificar ligeramente la ecuación 1.12 llevándola a su forma diagonal. La matriz  $c_{ij}$  puede ser en efecto diagonalizada mediante una transformación unitaria:

$$U c U^\dagger = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \gamma_{N^2-1} \end{pmatrix}.$$

Esto se consigue introduciendo la nueva base  $\{A_k\}_{k=1}^{N^2-1}$ , que cumple  $F_i = \sum_{k=1}^{N^2-1} u_{ki} A_k$ . Llegamos entonces a la *forma diagonal* del generador:

$$\mathcal{L}\rho_S = -i[H, \rho_S] + \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} [K_\alpha \rho_S K_\alpha^\dagger - \frac{1}{2} K_\alpha^\dagger K_\alpha \rho_S - \frac{1}{2} \rho_S K_\alpha^\dagger K_\alpha]. \quad (1.13)$$

<sup>16</sup>En las fuentes citadas se halla la demostración de este resultado.



Los operadores  $\{K_\alpha\}_{\alpha=1}^{N^2-1}$  engloban la matriz de coeficientes diagonal  $\gamma$ , es decir,  $K_\alpha = \sqrt{\gamma_\alpha}A_\alpha$ . Son llamados *operadores de Kraus*. Con respecto a esta nueva forma de la ecuación, volvemos a hacer algunas precisiones:

- Dado que la matriz  $c_{ij}$  era definida positiva, los elementos  $\{\gamma_\alpha\}_{\alpha=1}^{N^2-1}$  de su forma diagonal serán positivos.
- Dado que  $\mathcal{L}\rho_S = \frac{d}{dt}\rho_S$ , las dimensiones de todo  $\gamma_\alpha$  deben ser de la inversa del tiempo.

Como puede verse, la evolución temporal de la matriz densidad del sistema  $S$  tiene una parte  $\dot{\rho}_H = -i[H, \rho_S]$  que suele llamarse Hamiltoniana, dado que posee la forma de la evolución usual en sistemas cerrados. Los demás sumandos son englobados en algunas fuentes bajo la siguiente notación:

$$\mathcal{D}\rho = \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} [K_\alpha \rho_S K_\alpha^\dagger - \frac{1}{2} K_\alpha^\dagger K_\alpha \rho_S - \frac{1}{2} \rho_S K_\alpha^\dagger K_\alpha],$$

siendo referida como *parte disipativa*. Esta expresión puede ser reescrita de manera sencilla como:

$$\mathcal{D}(\rho) = \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} K_\alpha \rho_S K_\alpha^\dagger - \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} [K_\alpha^\dagger K_\alpha \rho_S + \rho_S K_\alpha^\dagger K_\alpha] = \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} K_\alpha \rho_S K_\alpha^\dagger - [J, \rho_S]_+,$$

donde  $J = \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} K_\alpha^\dagger K_\alpha$  y el símbolo  $[\cdot, \cdot]_+$  representa la parte simétrica del producto de matrices:

$$[A, B]_+ = \frac{1}{2}(AB + BA).$$

Recalcamos que las operaciones  $[\cdot, \cdot]_+$  y  $i[\cdot, \cdot] = [\cdot, \cdot]_-$  dotan al espacio de observables  $\text{Herm}(H_S)$  de las estructuras de álgebra de Lie y de Jordan. Junto con la norma inducida por la traza, las tres operaciones forman en  $\text{Herm}(H_S)$  una estructura de **álgebra de Lie-Jordan-Banach** (ver A.2 para más detalles). Bajo estas consideraciones, la evolución temporal de  $\rho_S$  queda:

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \mathcal{L}(t)\rho_S(t) = -i[H, \rho_S] - [J, \rho_S]_+ + \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} K_\alpha \rho_S K_\alpha^\dagger. \quad (1.14)$$

De modo que, como hemos dicho, la evolución temporal de  $\rho_S$  posee una contribución Hamiltoniana y una contribución disipativa, componiéndose a su vez ésta última de dos componentes. Para entender con qué clase de evolución estamos tratando, nos serviremos de la formulación geométrica.

Atendiendo a lo desarrollado en la sección A.3 del apéndice A, podemos dar la versión geométrica de 1.14. Esto significa decir que la evolución temporal de  $\rho_S$  viene dada por las curvas integrales de un cierto campo, al que llamaremos campo de Linblad  $X_{\mathcal{L}}$ . Este campo estará compuesto por los campos que derivan de cada uno de los tres sumandos de la ecuación 1.14. Como se muestra en A.3, las operaciones  $-i[\cdot, \cdot]$  y  $[\cdot, \cdot]_+$  pueden ser reescritas en términos de los

tensores  $\Lambda$  y  $\mathcal{R}$ , de forma obtenemos:

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = X_{\mathcal{L}} = X_H + X_J + X_K = \Lambda(d\hat{H}, \cdot) - \mathcal{R}(d\hat{J}, \cdot) + X_K \quad (1.15)$$

Como se mencionó para el caso de sistemas cerrados, podemos dividir el espacio de matrices densidad en estratos de rango constante. En el caso de sistemas cuánticos abiertos, sin embargo, la dinámica está compuesta por la superposición de tres evoluciones de carácter distinto, siendo sólo una de ellas unitaria. Bajo la parte Hamiltoniana  $X_H = (d\hat{H}, \cdot)$ , el espectro de  $\rho_S$  se conserva, y por tanto lo harán también su traza, su rango (número de autovalores nulos), y su pureza  $P = \text{tr}(\rho_S \rho_S)$ . El campo  $X_J = -\mathcal{R}(d\hat{J}, \cdot)$  que deriva del tensor de Riemann suele ser denominado *campo gradiente*, y conserva el rango pero no la traza ni la pureza. Estos dos campos vectoriales, juntos, definen los estratos, y por ello son tangentes a ellos. El campo  $X_K = \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} K_{\alpha} \rho_S K_{\alpha}^{\dagger}$ , por contrario, no lo es en general, no preservando rango, traza ni pureza.

El campo suma  $X_{\mathcal{L}}$ , sin embargo, sí preserva la traza de  $\rho_S$ , pues las variaciones impuestas por  $X_J$  y  $X_K$  se anulan. No obstante, el rango no queda preservado, y la pureza disminuye, produciéndose el fenómeno de *decoherencia*<sup>17</sup>. En el siguiente capítulo mostraremos y analizaremos todos estos resultados para el sistema de 3 niveles, explicitando tanto la evolución a la que da lugar cada uno de los componentes como la evolución total. Veremos también cómo es posible aprovechar el fenómeno de decoherencia para desarrollar una técnica que permitirá *purificar* estados mixtos, es decir, que permitirá maximizar la pureza.

---

<sup>17</sup>Recordando el ejemplo de la esfera de Bloch, podemos imaginar a modo de ayuda que el campo  $X_{\mathcal{L}}$  apunta hacia el interior de dicha esfera. No obstante, incidimos en que en general para el sistema de  $N$  niveles, los estratos no presentan la forma de esferas embebidas en  $\mathbb{R}^3$ .

## Capítulo 2

# El sistema de 3 niveles y su enfriamiento por láser

El control de sistemas cuánticos ha sido aplicado durante los últimos años a procesos en el marco de la condensación Bose-Einstein o la computación cuántica, cuya dinámica rige la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Mas recientemente, el interés se ha enfocado en sistemas gobernados por la ecuación de Liouville-von Neumann, la cual permite incluir procesos en los que hay una disipación presente, como es caso de algunas reacciones químicas (ver [9] y [10] para más aplicaciones). Como aplicación de la teoría de sistemas cuánticos abiertos desarrollada en el capítulo anterior y de su versión geométrica, fundamentada en el apéndice, presentamos un estudio del comportamiento del sistema de 3 niveles, así como una discusión acerca del problema de control correspondiente a maximizar la pureza de dicho sistema.

### 2.1. El sistema

**2.1.1 Presentación.** Consideremos un sistema con por 3 niveles energéticos a cuyos estados (estados propios del Hamiltoniano) denotaremos como  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$ ,  $|3\rangle$ . Tal sistema se encuentra en contacto con un entorno cuya disipación se produce a través de emisión espontánea. En concreto, trataremos el caso en el que el estado  $|2\rangle$  es capaz de emitir a los estados  $|1\rangle$  y  $|3\rangle$ , con ratios  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  respectivamente. Debido a ello, los dos únicos operadores de Kraus serán:

$$K_1 = \sqrt{\gamma_1}|1\rangle\langle 2| = \sqrt{\gamma_1} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad K_2 = \sqrt{\gamma_2}|3\rangle\langle 2| = \sqrt{\gamma_2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

De acuerdo con la ecuación (1.14), los operadores de Kraus, junto con el operador Hermítico  $H$  que concretaremos en cada caso de estudio, determinan la dinámica del sistema. En efecto, si  $\rho$  denota la matriz densidad del sistema de 3 niveles, entonces:

$$\dot{\rho} = L\rho = -i[H, \rho] - [J, \rho]_+ + K_1\rho K_1^\dagger + K_2\rho K_2^\dagger,$$

donde  $J$ , por la definición dada en la sección 1.4, adopta la forma  $J = K_1 K_1^\dagger + K_2 K_2^\dagger$ . Geométricamente, la dinámica viene dada por la ecuación 1.15, donde

$$X_H = -i[H, \rho], \quad X_J = -[J, \rho]_+ = \frac{1}{2}(K_1 K_1^\dagger \rho + K_2 K_2^\dagger \rho) \quad \text{y} \quad X_K = K_1 \rho K_1^\dagger + K_2 \rho K_2^\dagger.$$

De este modo, el problema consiste en hallar las curvas  $\rho(t)$  en el espacio de matrices densidad  $D(\mathcal{H}) \simeq D(\mathbb{C}^3)$  que tienen la propiedad de ser curvas integrales de  $X_{\mathcal{L}}$ .

**2.1.2 Tratamiento.** En el sistema de tres niveles, la matriz densidad  $\rho$  es una matriz Hermítica de dimensión  $3 \times 3$ , por lo que puede ser escrita en función de una base del espacio de operadores Hermíticos de dicha dimensión. Escogemos para ello la base formada por las matrices de Gell-Mann:

$$G_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad G_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad G_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad G_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$G_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad G_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad G_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad G_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix},$$

y  $G_9 = \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbb{I}_3$ . Desde esta perspectiva,  $\rho$  será un vector en un espacio vectorial de dimensión 9. Cada una de las partes de la ecuación 1.14 será por tanto una transformación sobre  $\rho$ , las cuales pueden ser representadas por matrices  $9 \times 9$  multiplicando las coordenadas de  $\rho$ . A partir de este hecho, y enlazando con los resultados en A.3.2, proponemos el siguiente método para resolver el problema de 3 niveles:

- Sea  $F$  una transformación independiente del tiempo sobre el espacio de matrices densidad tal que  $\dot{\rho} = F(\rho)$ . Queremos reescribir la acción de  $F$  en términos de una cierta  $M_F$ , de la forma  $\dot{\rho} = M_F \rho$ . Esta forma matricial es sin duda una ventaja, pues bajo ella la evolución queda resuelta como  $\rho(t) = e^{M_F t} \rho_0$ , donde  $\rho_0 = \rho(t_0)$  es estado inicial desde el que se evoluciona.
- Comenzamos por escribir  $\rho = \sum_{i=1}^9 \alpha_i G_i$ . Vista como vector,  $\rho = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \alpha_6, \alpha_7, \alpha_8, \alpha_9)$ .
- Consideramos que  $F(\rho)$  es conocida como matriz  $3 \times 3$  (notar que este es precisamente el caso, dado que los operadores  $H$  y de Kraus son conocidos). Podemos escribirla entonces en la base de Gell-Mann simplemente como  $F(\rho) = \sum_{i=1}^9 \alpha'_i G_i$ , con  $\alpha'_i = \frac{1}{2} \text{tr}(G_i F(\rho))$ , donde el factor  $1/2$  se ha colocado por el hecho de que  $\text{tr}(G_i G_i) = 2$ . Lo que logramos así es el paso, en el espacio de operadores Hermíticos, de  $\rho$  a  $\dot{\rho}$ .
- El carácter lineal de la evolución se traduce en coordenadas como  $\alpha'_i = \sum_{j=1}^9 c_{ij} \alpha_j$ . Es decir, las coordenadas de  $\dot{\rho}$  dependen linealmente de las coordenadas de  $\rho$ .
- Así, el estudio del vector  $\{\alpha'_i\}$  nos permitirá obtener los coeficientes<sup>1</sup>  $c_{ij}$ , los cuales forman la matriz  $M_F$ . De esta manera, la curva  $\rho(t)$  que buscamos, que será la curva integral de

<sup>1</sup>Una forma operativa de obtener los coeficientes es aprovechar la relación lineal para derivar con respecto a las coordenadas:  $c_{ij} = \frac{\partial}{\partial \alpha_j} \alpha'_i$

un cierto campo  $X_{M_F}$ , se obtiene simplemente como  $\rho(t) = e^{M_F t} \rho_0$ .

Podemos recuperar la forma matricial  $3 \times 3$  sin más que calcular  $\rho(t) = \sum_{i=1}^9 \beta_i G_i$ , donde  $\{\beta_i\}$  son las nueve coordenadas de  $\rho(t)$ . Este método puede ser aplicado directamente sobre la transformación total  $\mathcal{L}\rho$ , pero también sobre cada uno de los componentes Hamiltoniano, gradiente y de Kraus. Fijamos ahora los objetivos de (1) estudiar la evolución que impone individualmente cada uno de los campos  $X_H$ ,  $X_J$ , y  $X_K$ , y (2) estudiar la evolución total impuesta por el campo de Linblad,  $X_{\mathcal{L}}$ . En ambos casos, no será posible dar las curvas  $\rho(t)$  mediante una representación gráfica, puesto que, como hemos dicho, se desarrollan en un espacio vectorial de dimensión 9. Sí es posible, por supuesto, ofrecerlas como expresión analítica, es decir, ofrecer las 9 funciones temporales  $\{\beta_i(t)\}$  tales que  $\rho(t) = \sum_{i=1}^9 \beta_i G_i$ . Esta información se halla en el apéndice B.

## 2.2. La dinámica

**2.2.1 Condiciones iniciales** Pasamos a aplicar este método descrito a las evoluciones Hamiltoniana, gradiente y de Kraus, pudiendo estudiar así la evolución impuesta por cada uno de los campos. Para poder hacer un estudio comparativo realizaremos todas las evoluciones desde el mismo estado inicial  $\rho_0 = \text{diag}(1/2, 1/3, 1/6)$ . Este estado es mixto, con una pureza inicial de  $P = (\frac{1}{2})^2 + (\frac{1}{3})^2 + (\frac{1}{6})^2 \approx 0.39$ . Además, para llevar a cabo la simulación del sistema, necesitamos fijar los ratios  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  y el operador Hermítico  $H$ . Con respecto a los ratios, fijamos por simplicidad  $\gamma_1 = 1$  y entonces elegimos  $\gamma_2 = 0.5$ . Lo que estamos haciendo con ello es imponer que el nivel excitado  $|2\rangle$  decae al nivel  $|1\rangle$  el doble de rápido que al nivel  $|3\rangle$  (recordamos que  $[\gamma_1] = [\gamma_2] = T^{-1}$ ). Por otro lado, el operador  $H$  lo construimos como  $H = \text{diag}(1, 2, 1)$ .

**2.2.2 Evoluciones individuales y evolución total** Estamos ya preparados para calcular la evolución impuesta por cada campo:

- En la *evolución Hamiltoniana*, tenemos  $\dot{\rho} = F_H(\rho) = -i[H, \rho] = -i(H\rho - \rho H)$ . Si los operadores  $H$  y  $\rho$  conmutan, entonces la transformación  $F_H$  será la transformación nula y tendremos  $\dot{\rho} = 0$ , por lo que  $\rho$  será una constante del movimiento.
- En la *evolución gradiente*,  $\dot{\rho} = F_J(\rho) = -[J, \rho]_+ = -\frac{1}{2}(J\rho + \rho J)$ . Esta evolución previene a  $\rho$  de ser constante del movimiento, ya que  $\dot{\rho} = 0 \iff J = 0$ .
- En la *evolución de Kraus*,  $\dot{\rho} = F_K(\rho) = \sum_{\alpha=1}^2 K_\alpha \rho K_\alpha^\dagger$ .
- En la *evolución total de Linblad*,  $\dot{\rho} = F_{\mathcal{L}}(\rho) = \rho$ . Esta evolución ha de preservar la condición de traza unidad, dado que debe transformar matrices densidad en matrices densidad. Es la suma de las anteriores, por lo que los efectos sobre la traza de cada una de ellas deben combinarse del modo apropiado para que ésta se conserve. Con el rango y la pureza no ocurre lo mismo, pudiendo variar en el tiempo.

El software *Wolfram Mathematica 10* nos permite desarrollar de manera sencilla el método propuesto, encontrando para cada uno de los campos sus curvas integrales. Analizamos ahora las propiedades de cada evolución, a partir de las propiedades de la matriz  $\rho(t)$  a la que da lugar. En primer lugar, observamos su traza y su pureza:

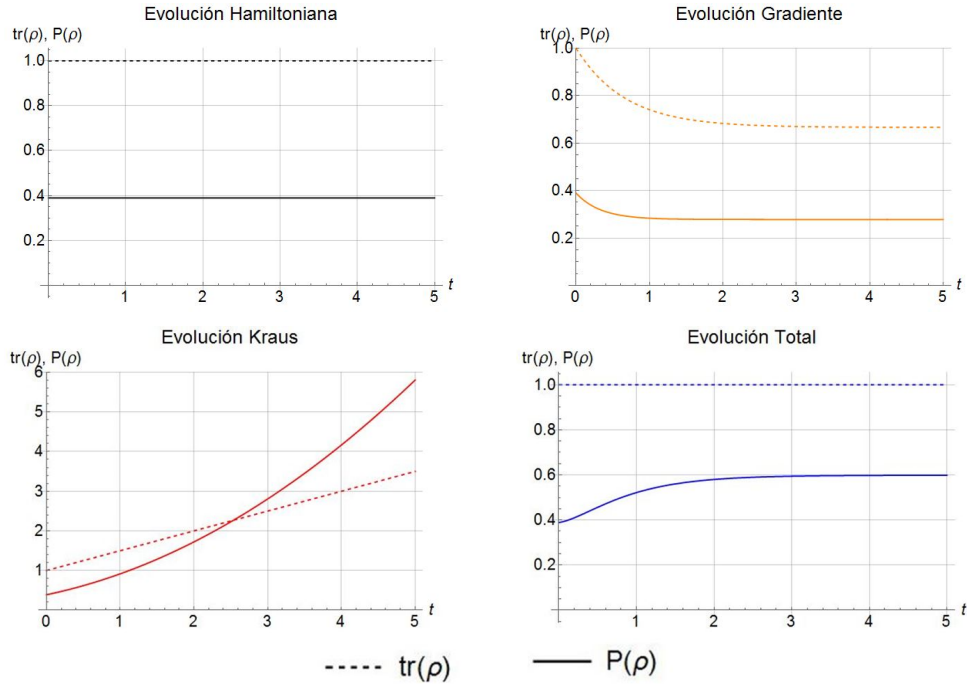


Figura 2.1: Evolución temporal de la traza y la pureza impuesta por los campos  $X_H$ ,  $X_J$ , y  $X_K$  individualmente y por todos ellos simultáneamente, mediante el campo total  $X_{\mathcal{L}}$ .

Podemos observar que la traza es preservada en la evolución Hamiltoniana, y no así en las evoluciones debidas a los campos gradiente y de Kraus. El primero de estos incrementa la traza, y el segundo la disminuye. Vemos cómo el efecto neto de las tres evoluciones es el de mantener constante e igual a la unidad la traza de la matriz densidad. Para entender mejor cómo se combinan los efectos de las evoluciones gradiente y de Kraus, hemos elaborado la gráfica 2.2:

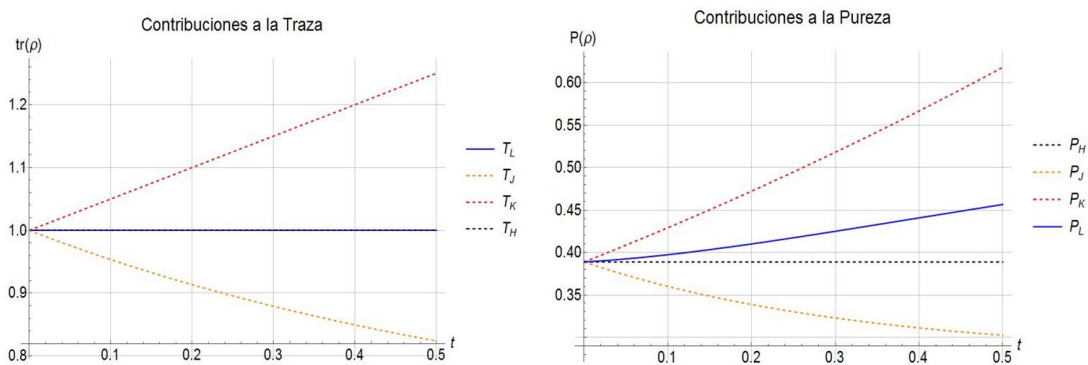


Figura 2.2: Evolución temporal de la traza (izquierda) y de la pureza (derecha) de la matriz densidad desglosada en las contribuciones de cada campo.

Podemos observar un hecho interesante al cual da pie de forma natural la formulación geométrica. Cuando decimos que una cierta curva es curva integral de un campo vectorial, nos

referimos a que tal campo, evaluado sobre cada uno de los puntos de la curva, coincide con el vector tangente a la curva en dicho punto. En este caso, la curvas de traza y pureza totales la estamos entendiendo como curva integral de un campo que es resultado de la superposición de otros tres campos, debido a lo cual, el vector tangente en cada punto de la curva será la suma de los tales tres campos vectoriales en ese punto. Estamos observando además que la variación debida a la parte Hamiltoniana es nula, y con respecto a las otras partes dos tenemos:

$$\frac{d}{dt}T_J = -\frac{1}{2}e^{-3t/2}, \quad \frac{d}{dt}T_K = \frac{1}{2},$$

$$\frac{d}{dt}P_J = -\frac{1}{3}e^{-3t}, \quad \frac{d}{dt}P_K = \frac{5}{18}t + \frac{7}{18},$$

donde  $T_J$ ,  $T_K$ ,  $P_J$ ,  $P_K$  representan, respectivamente, al igual que en la gráfica 2.2, la traza y la pureza de la matriz bajo el campo gradiente y bajo el campo de Kraus. Podemos obtener la evolución infinitesimal de cada campo sobre el estado inicial evaluando estas expresiones en  $t = 0$ . Al hacerlo, puede comprobarse efectivamente que en la evolución infinitesimal dada por  $e^{\mathcal{L}t}$  los campos gradiente y de Kraus tienen contribuciones sobre la traza de igual valor absoluto y signo opuesto, resultando en que ésta permanece constante. Con la pureza, sin embargo, ano ocurre lo mismo: la evolución Hamiltoniana no altera la pureza del sistema, mientras que la evolución gradiente tiende a impurificarlo y la evolución de Kraus a purificarlo. El resultado sobre la pureza total del sistema es una ligera purificación desde el valor inicial de 0.39 hasta el valor asintótico de 0.60.

Finalmente, ofrecemos la evolución del espectro de  $\rho$ , el cual, recordamos, comenzaba desde el estado inicial  $(1/2, 1/3, 1/6)$ . Podemos entender el espectro de  $\rho$  como la ocupación, normalizada a la unidad, de los niveles  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$ ,  $|3\rangle$ . Lo que obtenemos es:

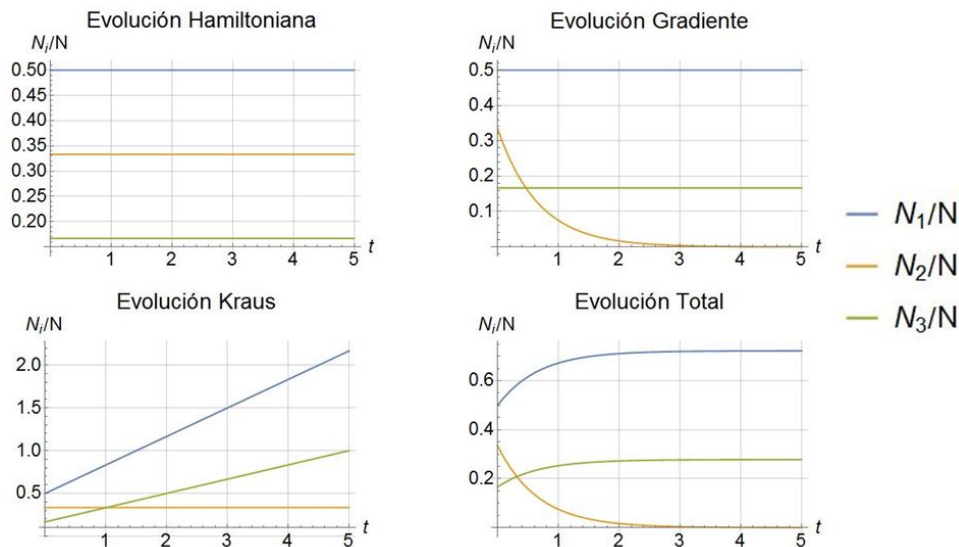


Figura 2.3: Evolución temporal de las ocupaciones de los niveles  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$ ,  $|3\rangle$ .

Podemos ver cómo el espectro es preservado por la parte Hamiltoniana, y modificado tanto por la parte gradiente como por la de Kraus, resultando en el decaimiento exponencial que se percibe en la última figura. Este es un claro ejemplo de decoherencia: al permitir la interacción

del sistema con un entorno, a la evolución Hamiltoniana se le añade una parte cuyo efecto sobre el espectro es, en el caso presente, reducir hasta anular la componente del nivel  $|2\rangle$ . Esta última figura es en realidad el comportamiento que esperaríamos para un nivel excitado ( $|2\rangle$ ) que decae con ratios  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  a otros dos niveles ( $|1\rangle$  y  $|3\rangle$ ). En efecto, si analizamos las ecuaciones a las que da lugar método de resolución aplicado, encontramos:

$$\frac{N_1}{N}(t) = \frac{13}{18} - \frac{2}{9}e^{-3t/2}, \quad \frac{N_2}{N}(t) = \frac{1}{3}e^{-3t/2}, \quad \frac{N_3}{N}(t) = \frac{5}{18} - \frac{1}{9}e^{-3t/2}.$$

Estas ecuaciones se corresponden exactamente con los ratios  $\gamma_1 = 1$  y  $\gamma_2 = 1/2$  y ocupaciones iniciales. Hemos logrado por tanto reproducir el decaimiento exponencial presentado, de acuerdo con la Física Nuclear, por un nivel excitado con dos caminos de desexcitación a niveles fundamentales o estables.

## 2.3. Control cuántico: enfriamiento por láser

**2.3.1 Construyendo el problema.** Finalmente, concluimos el trabajo mostrando que es posible aprovechar el fenómeno de decoherencia que ocurre en el sistema de 3 niveles para lograr la purificación de dicho sistema, es decir, para lograr maximizar la pureza. Para ello, seleccionaremos como antes  $\gamma_1 = 1$ ,  $\gamma_2 = 1/2$  y  $H = \text{diag}(1, 2, 1)$ , y el estado inicial  $\rho_0 = \text{diag}(0, 1, 0)$ . Este estado es puro en el nivel  $|2\rangle$ . De la misma forma que hicimos en la sección anterior, podemos calcular la evolución  $\rho(t)$  a partir de este estado, impuesta por el campo total de Linblad,  $X_{\mathcal{L}}$ :

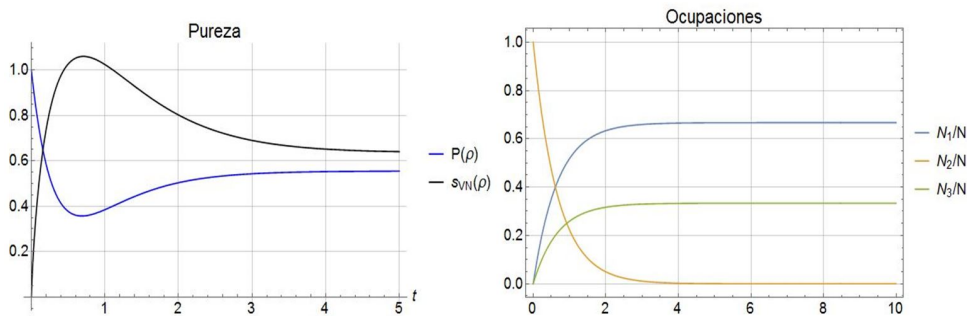


Figura 2.4: Evolución temporal de la pureza y la entropía de von Neumann (izquierda) y las ocupaciones de los niveles  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$ ,  $|3\rangle$  (derecha).

Si lo permitimos evolucionar libremente, nuestro estado inicial pierde su pureza e incluso su rango, dado que los niveles fundamentales  $|1\rangle$  y  $|3\rangle$  presentan ocupaciones no nulas para todo instante  $t > t_0$ , y dado que nivel  $|2\rangle$  termina desocupándose completamente en  $t \mapsto \infty$ . Esta pérdida es debida a la parte disipativa de la ecuación de Linblad, puesto que, como hemos visto, la parte Hamiltoniana preserva el espectro. El sistema tiende al equilibrio, en el sentido en que las ocupaciones de cada nivel, la pureza y la entropía resultan estacionarias. Nuestro objetivo es desarrollar un método que permita maximizar la pureza del sistema, o, equivalentemente, disminuir su entropía. Si nuestro sistema fuese cerrado, no seríamos capaces de tal cosa, pues toda evolución ocurriría mediante transformaciones unitarias. La purificación de un sistema, por



tanto, sólo es plausible en sistemas abiertos, en los que podemos usar la parte disipativa en nuestro favor. Veamos cómo.

**2.3.2 Enfriamiento por láser.** Asumamos que poseemos un láser cuyo efecto sobre el sistema de 3 niveles viene dado por un Hamiltoniano  $H_C$  al que denotaremos *Hamiltoniano de control*. Mientras mantengamos encendido este láser, el operador Hermítico que entra en la ecuación de Linblad 1.13 no será solo  $H = \text{diag}(1, 2, 1)$  sino  $H_T = \text{diag}(1, 2, 1) + H_C$ . La idea principal es que el Hamiltoniano de control depende de un cierto campo láser  $E(t)$  que nosotros podemos fijar a voluntad. De esta manera, uno de los términos de la dinámica es controlado por nosotros, abriendo la puerta de lo que se conoce como *control cuántico*, del cual el enfriamiento por láser es un ejemplo particular.

Siguiendo los trabajos de Khaneja, Sklarz y Tannor en [9], vamos a asumir dos hipótesis simplificadoras. Primero, asumimos que el Hamiltoniano de control produce su efecto sobre el sistema en un tiempo muy pequeño comparado con el tiempo característico de la emisión espontánea. Dado que existen ya láseres de control cuya acción se realiza en femptosegundos y dado que los tiempos típicos de emisión espontánea son del orden de nanosegundos, tal asunción está en efecto justificada. Segundo, asumimos también que el Hamiltoniano de control puede producir cualquier transformación unitaria  $U \in SU(3)$  en el sistema de 3 niveles. Con ello, bajo el Hamiltoniano de control, el sistema será llevado por la órbita:

$$\phi(\rho) = \{U\rho U^\dagger | U \in SU(3)\}.$$

Si denotamos por  $\lambda(\rho)$  el espectro de la matriz densidad, es claro que  $\lambda(U\rho U^\dagger) = \lambda(\rho)$  y por tanto  $P(U\rho U^\dagger) = P(\rho)$  es constante a lo largo de la órbita  $\phi(\rho)$ . Sin embargo, como ya hemos visto en la sección anterior, la variación  $\frac{d}{dt}P$  depende de la región del espacio  $D(\mathcal{H})$  en que  $\rho$  se encuentra. Así, la acción del dirigirá a la matriz densidad a lo largo de la órbita de forma que  $\frac{d}{dt}P$  cambie de forma controlada.

Es importante notar además que las dos hipótesis simplificadoras dan lugar a otra simplificación muy importante. Como la diagonalización de una matriz es una transformación unitaria, el Hamiltoniano de control nos permitirá siempre llevar  $\rho$  a su forma diagonal<sup>2</sup>. Además, como tal control lo suponemos instantáneo, podemos considerar que el control destinado a maximizar la pureza será aplicado sobre una matriz densidad diagonal<sup>3</sup>.

Con todo esto estamos preparados para desarrollar el método de enfriamiento por láser. Si nos fijamos en la figura 2.5, podemos ver que, tras un cierto tiempo  $\tau$ , la ocupación del estado  $|2\rangle$  disminuye por debajo de la ocupación del estado  $|3\rangle$ , es decir  $N_2 > N_3, \forall t < \tau$  y  $N_2 < N_3, \forall t > \tau$ .

Consideramos ahora la siguiente transformación unitaria de control  $U_c = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ .

<sup>2</sup>Note el lector que, dado que  $\rho$  es una matriz Hermítica por definición de matriz densidad, siempre existirá una transformación  $T \in SU(3)$  tal que  $T\rho T^\dagger = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ , con  $\lambda_i \in \mathbb{R}, i = 1, 2, 3$ .

<sup>3</sup>En efecto, debido a la hipótesis, somos libres de diagonalizar de forma instantánea  $\rho$  y luego sobre tal forma diagonal cualquier otro tipo de control unitario

Sobre una matriz densidad diagonal, la transformación  $U \in SU(3)$  produce el intercambio de las dos últimas filas:  $U_c \text{diag}(a, b, c) U_c^\dagger = \text{diag}(a, c, b)$ . En términos del espectro, la transformación  $U_c$  intercambia las componentes segunda y tercera; en términos físicos, excita el nivel  $|3\rangle$  y su población al nivel  $|2\rangle$ , y relaja este último al nivel fundamental  $|3\rangle$ . Lo que provocamos en el sistema es, por tanto, que la población que antes estaba en el nivel fundamental  $|3\rangle$  comience a emitir espontáneamente, lo que hace que su población se reparta entre los dos niveles fundamentales. En suma, tenemos la siguiente evolución:

El nivel  $|2\rangle$  comienza disminuyendo su ocupación por emisión espontánea hasta el momento del control. Tras éste, pasa a ser un nivel fundamental, recibiendo población del nivel excitado. El nivel  $|3\rangle$  comienza aumentando su ocupación hasta el momento del control. Tras éste, pasa a ser el nivel excitado del sistema, por lo que su ocupación disminuye por emisión espontánea a los otros dos niveles. El nivel  $|1\rangle$  también comienza aumentando su ocupación hasta el momento del control. Como dicho control lo deja invariante, permanece como fundamental, recibiendo población del nivel excitado.

De esta forma encontramos que la transformación  $U$  tiene el resultado buscado: la población del nivel  $|1\rangle$  crece continuamente, por lo que el sistema se va purificando. Por supuesto, como se ve en la figura 2.5, la evolución del sistema tiende a una estabilización de las ocupaciones de cada nivel, por lo que será necesario aplicar el control en más de una ocasión. Cada vez que lo hagamos lograremos un aumento de la población del primer nivel fundamental, y con ello un aumento de la pureza del sistema (los otros dos niveles continúan mezclándose, pero tras cada control cuentan con menos población, por lo que el peso del mezclado en la pureza resulta cada vez menor). Formalmente, el control propuesto puede escribirse como:

$$\exp(\mathcal{L}t_n)Y\exp(\mathcal{L}t_{n-1})\dots Y\exp(\mathcal{L}t_1)\rho_0 \approx (0, 0, 1/2, 0, 0, 0, 0, 1/(2\sqrt{3}), 1/\sqrt{6}).$$

En esta expresión,  $\rho_0$  es el estado inicial como vector de 9 coordenadas,  $Y$  es la transformación lineal en  $SU(3)$  correspondiente a la operación  $U\rho U_c^\dagger$ , y el vector  $(0, 0, 1/2, 0, 0, 0, 0, 1/(2\sqrt{3}), 1/\sqrt{6})$  es el vector de coordenadas en la base de Gell-Mann correspondiente a  $\rho = \text{diag}(1, 0, 0)$ .

La siguiente figura muestra los resultados de aplicar este proceso de control en tiempos  $t_1 = 6\text{ s}$  y  $t_2 = 12\text{ s}$ . Hacemos notar que tales tiempos han sido elegidos de forma que la ocupación del nivel  $|2\rangle$  haya caído por debajo de la del nivel  $|3\rangle$ .

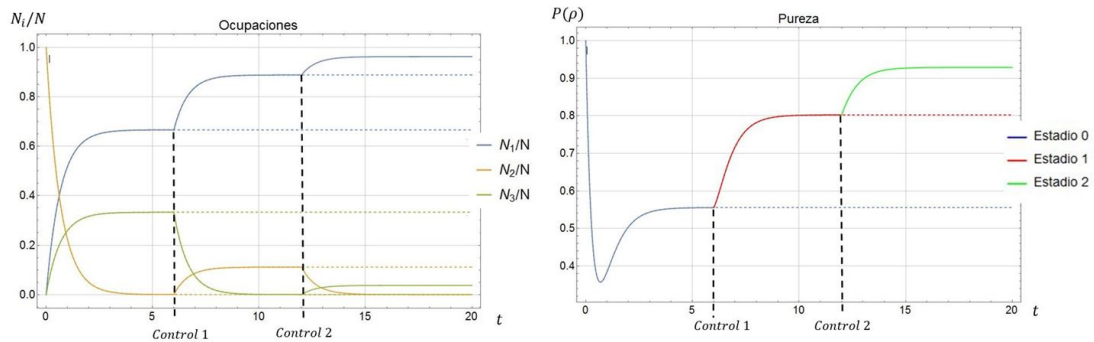


Figura 2.5: Purificación del sistema de 3 niveles controlado por la transformación  $U_C$  en tiempos  $t_1 = 6\text{ s}$  y  $t_2 = 12\text{ s}$ : efecto sobre las ocupaciones (izquierda) y de la pureza (derecha).

Como puede verse, el efecto del control es la purificación del sistema, a través de la inversión de poblaciones, que resulta en un poblamiento continuo del nivel no afectado por el control, en este caso el  $|1\rangle$ . Tras dos controles en los tiempos indicados, observamos como la pureza del sistema es estacionaria en un valor cercano a 0.9, y la ocupación del nivel  $|1\rangle$  es casi total. La línea punteada indica el valor estacionario de la pureza o las ocupaciones caso de no ejercer los controles. Finalmente, concluimos con un breve estudio acerca del efecto de los tiempos en que se realiza el control:

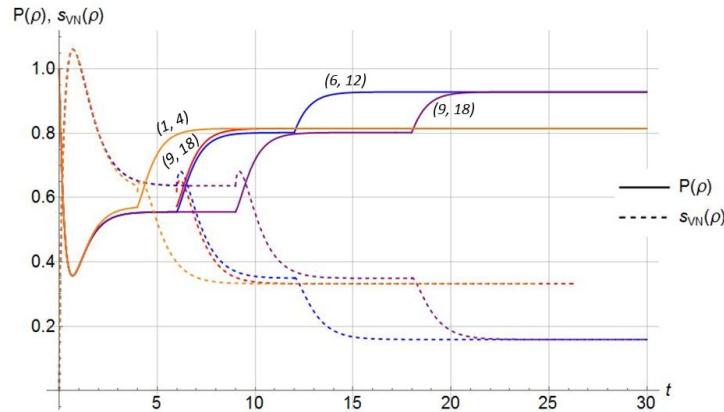


Figura 2.6: Efecto de los tiempos de control en el proceso de purificación del sistema de 3 niveles.

En este caso, la línea sólida se corresponde con la evolución de la pureza y la línea punteada con la evolución de la entropía  $s_{VN} = -\text{tr}(\rho \ln(\rho))$ . Las parejas que etiquetan cada curva indican los tiempos, en segundos, en los que se ejercen los controles. Encontramos que si dichos controles se producen cuando el sistema ha alcanzado el equilibrio y se comporta de forma estacionaria, entonces la pureza alcanzada tras dichos controles es la misma para todos los casos (curvas (3, 6), (6, 12) y (9, 18)). Si el control es realizado mientras el sistema se comporta de forma no estacionaria, los controles también incrementan la pureza, pero no se alcanzan valores tan altos como en el caso anterior (curva (1, 3)). Concluimos entonces que **la pureza final tras los controles resulta mayor cuanto mayor es la pureza en el momento de ejercerlos**, siendo preciso hallar un equilibrio entre el tiempo de control, las iteraciones del proceso de control, y la pureza final alcanzada.

# Conclusiones

## 2.4. Lo que se ha hecho

En este trabajo, hemos estudiado la noción de *sistema cuántico abierto*, poniendo el énfasis en los aspectos más importantes de su dinámica. Hemos visto que tal dinámica queda caracterizada por un semigrupo uniparamétrico de aplicaciones completamente positivas, cuyo generador infinitesimal es el operador de Lindblad-Kossakowski, el cual da una forma general de la ecuación de Liouville von-Neuman. Análogamente, hemos desarrollado en el apéndice la formulación geométrica de la imagen de Heisenberg, viendo que las estructuras de Lie y Jordan del espacio de observables pueden codificarse en dos campos tensoriales sobre su espacio dual. Esta formulación geométrica nos ha permitido reescribir las soluciones de la ecuación de Lindblad como las curvas integrales de los campos hamiltoniano, gradiente y de Kraus. Por último, hemos aplicado todos estos resultados al estudio del sistema de 3 niveles, aprovechando la formulación geométrica con el doble propósito de construir un método que permita resolver la ecuación de Lindblad y de entender y mostrar el efecto de cada uno de los campos en la evolución de dicho sistema abierto. Por último, hemos desarrollado un método para lograr la purificación del sistema, lo que corresponde a resolver el problema de control cuántico conocido como enfriamiento por láser.

## 2.5. Lo que queda por hacer

Geometrizar toda la mecánica cuántica es un proceso que desde luego escapaba a los límites de este trabajo. Hemos hablado acerca de la geometrización de la imagen de Heisenberg, pero existen otras construcciones como la imagen de Schrödinger, en la que el papel central lo juega el espacio de estados en lugar del espacio de observables. Además, el campo de sistemas cuánticos abiertos es en efecto muy amplio (ver [4] como ejemplo). Conjuguar la geometría diferencial y la física de sistemas cuánticos abiertos es sin duda la extensión directa de este trabajo.

Por lo demás, hemos hecho una incursión al campo de los problemas de control cuántico a través del enfriamiento por láser del sistema de 3 niveles. Hemos ofrecido un método para purificar dicho sistema, pero quedaría por realizar un estudio acerca del método óptimo para llevar a cabo tal purificación. En [9] las ecuaciones de Hamilton-Jacobi-Bellman son usadas para maximizar un cierto funcional del que depende la pureza. El resultado implica ejercer el control para mantener las poblaciones iguales de los niveles  $|2\rangle$  y  $|3\rangle$ , después de que éstas se crucen por primera vez.

# Bibliografía

- [1] Jesús Clemente-Gallardo. *The Geometrical Formulation of Quantum Mechanics*. Real Academia de Ciencias. Zaragoza. **67**: 51–103, (2012).
- [2] José Fernando Cariñena, J. Clemente-Gallardo, y G. Marmo. *Geometrization of Quantum Mechanics*. Theoretical and Mathematical Physics, **152(1)**: 894–903 (2007).
- [3] José Fernando Cariñena. *Introducción a la geometría diferencial*. Notas del curso impartido en la Universidad de Zaragoza, 2010.
- [4] Heinz Peter Breuer y Francesco Petruccione. *The theory of open quantum systems*. Oxford university press, 2002.
- [5] Ángel Rivas y Susana Huelga. *Open quantum systems. An introduction*. arXiv:1104.5242v2, (2012).
- [6] Karl Kraus. *States, Effects and Operations Fundamental Notions of Quantum Theory*. Springer, Berlin, 1983.
- [7] Vittorio. Gorini, Andrzej Kossakowski, E. C. George Sudarshan. *Completely positive dynamical semigroups of  $n$ -level systems*. J. Math. Phys. **Vol. 17, No.5**, (1976).
- [8] Goran Lindblad *On the Generators of Quantum Dynamical Semigroups*. Commun. math. Phys. **48**: 119-130 (1976).
- [9] Sholmo E. Sklarz, David J. Tannor and Navin Khaneja. *Optimal control of quantum dissipative dynamics: Analytic solution for cooling the three-level  $\Lambda$  system*. Pys. Rev. A. **69**, (2004).
- [10] Navin Khaneja. *On some model problems in quantum control*. Communications in information and systems, **Vol 9, No. 1**: 1-40, (2009).
- [11] Irvin Segal. *Irreducible representations of operator algebras*. Bulletin of the American Mathematical Society, **53(2)**:73-88, (1947).