

# Método iterativo en sistemas moleculares interactuando con campos eléctricos dependientes del tiempo

*José Luis Paz\* y Inés Urdaneta*

*Departamento de Química, Universidad Simón Bolívar, Apartado 89000,  
Caracas 1080<sup>a</sup>, Venezuela*

Recibido: 26-07-05 Aceptado: 13-10-06

## Resumen

Haciendo uso de la metodología propuesta por Récamier y Jáuregui basada en la combinación de técnicas algebraicas con aplicaciones sucesivas de las transformaciones de Bogoliubov, y utilizando las propiedades ópticas de los estados coherentes de dos fotones del campo de radiación, se encontró una expresión analítica para el operador de evolución temporal, a partir de la cual se pudo evaluar la probabilidad de transición entre los estados del oscilador armónico. En este trabajo son incluidos los términos de orden superior a los bi-lineales y cuadráticos de los operadores bosónicos, con la finalidad de incorporar dentro del álgebra la información proveniente de la parte anarmónica de la interacción. El operador de evolución determinado permite concentrar toda la información de los pasos iterativos en una única expresión simple, a partir de la cual los cálculos de la probabilidad de transición entre los estados de Fock y entre los estados coherentes, es directa.

**Palabras clave:** Algebra de Lie; Anarmonicidad.

## Iterative method in molecular systems interacting with time dependents electric fields

### Abstract

Making use of the methodology propose by Récamier and Jauregui based in algebraic techniques with sucesive applications of the iterative Bogoliubov transformations and employ the optical properties of the two-photon coherent states, an analytical expresion for the evolution operator and transition probabilities between the harmonic oscillator states, is derived. In this work, are incorporated the high-order terms in the boson operators associated to the anharmonic components of the mater-radiation interaction. The evolution operator content all the information relative to the iterative steps in an unique expression, for the evaluation of the transition probabilities between the coherent states.

**Key words:** Anharmonicity; Lie Álgebra.

\* Autor para la correspondencia. E-mail: jlpaz@usb.ve

## Introducción

Es considerable el esfuerzo que se ha dedicado a la resolución de la ecuación de Schrödinger concerniente a osciladores anarmónicos (1-3). El uso de potenciales como el Potencial de Morse para la descripción y determinación de los niveles de energía vibracionales de moléculas diatómicas, ha permitido perfeccionar el estudio, al introducir términos que no sólo describan a la molécula aislada, sino que además incluyan sus interacciones con el medio, como por ejemplo, con otra molécula, o con un campo electromagnético. En la mayoría de estos cálculos la molécula es descrita a través de un potencial anarmónico, donde generalmente sólo se incluyen los términos de orden cuártico en el potencial oscilatorio, despreciándose frecuentemente el término cúbico. Por otra parte, resulta natural abordar tales problemas con herramientas algebraicas, pues constituyen la forma de resolución alternativa más conveniente. A grandes rasgos la segunda cuantización permite construir un Hamiltoniano independiente del número de partículas del sistema, a partir de los operadores de aniquilación y creación que conforman un álgebra y encontrar tanto las funciones de onda como al espectro de energía, muchas veces sin necesidad de resolver explícitamente la ecuación diferencial.

De gran utilidad han sido los métodos algebraicos de Lie en este tipo de problemas, los cuales han sido aplicados satisfactoriamente al estudio de scattering atómico, molecular, y en física nuclear (4-6). Cabe mencionar por ejemplo, el estudio de la transferencia de energía vibro-rotacional en colisiones entre átomo y molécula (7), que incluye el cálculo de las probabilidades de transición entre estados vibracionales de una molécula diatómica como función de la energía total de colisión y como función de la intensidad de la anarmonicidad (7). Recientemente Récamier y Berrondo (8) han evaluado los elementos de matriz de un potencial exponencial entre los autoestados del oscilador de Morse utilizando ciertas aproximaciones algebraicas desarrolladas por Berrondo y Palma (9). La aplicación iterada de transformaciones de Bogoliubov sobre los operadores de creación y aniquilación, em-

pleadas por Récamier y Jáuregui, permite mejorar los resultados obtenidos por otros métodos perturbativos (3). En este trabajo se realiza un estudio similar a los mencionados anteriormente, para el caso de un sistema molecular que interactúa con un campo electromagnético dependiente del tiempo. Este trabajo está motivado, entre otros, por el artículo de Mundarain y colaboradores (1), en el cual se hace uso de las propiedades de los estados de la óptica cuántica, para encontrar una expresión analítica para el operador evolución y para la probabilidad de transición de un sistema descrito por un oscilador anarmónico cuártico acoplado a un campo eléctrico de baja intensidad en la aproximación dipolar-eléctrica. En este último trabajo, el Hamiltoniano del sistema fue algebrizado, despreciando las contribuciones de orden mayor a dos en los operadores de creación y aniquilación. En el presente trabajo, se extendió este tratamiento incluyendo los términos antes despreciados, bajo la verificación de que todo el conjunto de operadores genera un álgebra de Lie. Luego de haber confirmado que el álgebra no cierra, se buscó una forma de resolución que si bien ya no es exacta, pues comprende la aplicación de técnicas perturbativas e iterativas. Esta metodología iterativa-perturbativa es presentada en este trabajo de forma esquemática, para ilustrar de forma sencilla la construcción tanto del Hamiltoniano perturbativo correspondiente, como el operador de evolución asociado.

Una vez aplicada la metodología propuesta por Récamier y Jáuregui (3), la cual consiste en aplicar de manera recursiva transformaciones de Bogoliubov sobre los operadores de creación y aniquilación, se encontró que el esquema converge luego de la tercera iteración. Dada la complejidad de los coeficientes que acompañan a los generadores del álgebra, las iteraciones debieron evaluarse simbólicamente, empleándose el programa Mathematica versión 3.0 para este fin. Finalmente, se derivó una expresión analítica para el operador evolución global del sistema, que resulta ser el producto de un operador de desplazamiento por un operador de compresión, de forma tal que el operador evolución es capaz de generar los estados coherentes de dos fotones, mencionados anteriormente.

### Osciladores Anarmónicos

El potencial oscilatorio anarmónico unidimensional ha sido utilizado extensamente en física nuclear, física de partículas y del estado sólido, física atómica y molecular (1, 3). Su característica mas importante radica en que aún siendo tan simple, este modelo puede ser implementado para ilustrar y abordar aspectos nada triviales que son esenciales para la comprensión de sistemas más complejos, en los cuales el modelo armónico ya no se adecua a la realidad. Tal es el caso por ejemplo, de las colisiones entre moléculas diatómicas heteronucleares, en donde el oscilador armónico es inadecuado para describir los procesos de rearrreglo debidos a la presencia de un número muy grande de estados vibracionales ligados. Los osciladores anarmónicos exhiben propiedades algebraicas simples pero muy interesantes, que permiten varios niveles de aproximación al problema. Por consiguiente, es mucho el esfuerzo invertido en la evaluación certera de los niveles de energía de los osciladores anarmónicos cuánticos, entre los cuales podemos citar a los métodos variacionales optimizados, a los de diagonalización matricial y a teorías de perturbación modificadas. Una consecuencia interesante de tales estudios es el haber reconocido que al tomar el oscilador armónico que resulta de cancelar a los términos anarmónicos como aproximación a primer orden, no es la mejor opción. Resulta preferible seleccionar una frecuencia alternativa (escalamiento) y una posición alternativa para centrar al oscilador armónico (desplazamiento). En este sentido son muchos los trabajos que proponen y describen como hacer la selección de estos parámetros y así poder estudiar las anarmonicidades cúbicas y cuárticas. Las técnicas más comunes que se emplean con este fin, son las denominadas *transformaciones iterativas de Bogoliubov ITB* (3).

Para este caso, se consideró un Hamiltoniano del tipo  $H = H_0 + V(t)$ , donde  $H_0$  representa el Hamiltoniano sin perturbar, el cual está dado en términos de las coordenadas de momento y posición  $H_0 = P^2 / 2m + m\Omega^2 X^2 / 2$ , y donde  $V(t)$  corresponde al término de perturbación dependiente del tiempo, expresado por

$V(t) = \lambda X^3 + \gamma X^4 - eXE_x(t)$ , donde  $\lambda$  y  $\gamma$  son constantes arbitrarias. En este modelo, el campo eléctrico es dado por  $E_x(t) = E_0 \cos(\omega t)$  en la aproximación semiclásica, mientras la interacción entre el oscilador armónico y el campo electromagnético es de tipo dipolar. Las frecuencias  $\Omega$  y  $\omega$  representan las frecuencias del oscilador y el campo eléctrico, respectivamente. Expresando las coordenadas de desplazamiento  $X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\Omega}}(a+a^\dagger)$  y momento  $p = i\sqrt{\frac{m\hbar\Omega}{2}}(a^\dagger - a)$  en términos de los operadores bosónicos (1), encontramos:

$$H = H_0 + V_0(t) + V_1(t) \tag{1}$$

donde  $H_0 = \hbar\Omega(a^\dagger a + 1/2)$

$$V_0(t) = \lambda \left(\frac{\hbar}{2m\Omega}\right)^{3/2} (3a + 3a^\dagger) + \gamma \left(\frac{\hbar}{2m\Omega}\right)^2 (6a^{\dagger 2} + 6a^2 + 12a^\dagger a + 3) - e \left(\frac{\hbar}{2m\Omega}\right)^{1/2} (a + a^\dagger) E_0 \cos(\omega t)$$

$$V_1(t) = \lambda \left(\frac{\hbar}{2m\Omega}\right)^{3/2} (a^{\dagger 3} + a^3 + 3a^{\dagger 2} a + 3a^\dagger a^2) + \gamma \left(\frac{\hbar}{2m\Omega}\right)^2 (a^{\dagger 4} + a^4 + 4a^{\dagger 3} a + 4a^\dagger a^3 + 6a^{\dagger 2} a^2)$$

Es de notar que se ha escrito la contribución proveniente del término cúbico y cuártico como la suma de los términos lineales y bi-lineales, incluidos en  $H_0$  y  $V_0$  y los términos de orden superior incluidos en  $V_1$ . Según Alhassid y Levine (10), siempre es conveniente utilizar un Hamiltoniano interno que sea al menos bi-lineal en algunos de los operadores cuando los niveles de energía internos son anarmónicos. Los primeros dos términos  $H_0 + V_0(t)$  pueden ser considerados como la aproximación de primer orden para el hamiltoniano  $H$ , mientras que  $V_1(t)$  es considerada como una pequeña perturbación. En trabajos anteriores se ha resuelto el Hamiltoniano del sistema prescindiendo de este último término (1). La parte restante, que contiene los seis generadores  $\{1, a^\dagger, a, a^{\dagger 2}, a^2, a^\dagger a\}$ , forman un grupo cerrado bajo conmutación y genera un álgebra de Lie. El presente trabajo tiene como objetivo encontrar soluciones al problema de este tipo de interacción radiación-materia, sin necesidad de

despreciar el término  $V_1(t)$ . La resolución del problema se efectúa siguiendo la metodología propuesta por Récamier y Jáuregui (3), consistente en combinar procedimientos algebraicas con aplicaciones sucesivas de técnicas ITB.

### Transformaciones Generalizadas de Bogoliubov

Haciendo uso de los operadores de creación y aniquilación producto de la factorización del oscilador armónico, es posible algebrizar los términos anarmónicos que se incluyen en el potencial de tipo oscilatorio. La algebrización del Hamiltoniano permite hacer transformaciones algebraicas relativamente sencillas que hacen del potencial anarmónico una herramienta útil para modelar sistemas más complejos. La transformación algebraica más común una vez algebrizado al Hamiltoniano anarmónico es la Transformación de Bogoliubov BT, que consiste en expresar a unos nuevos operadores  $b$  y  $b^\dagger$  en función de los operadores  $a$  y  $a^\dagger$ , tal que en esta nueva base el Hamiltoniano resultante sea diagonal. Cuando tal transformación es equivalente a la expresión  $b = \mu a + \nu a^\dagger$ , (los números complejos  $\mu$  y  $\nu$  obedecen la relación  $|\mu|^2 - |\nu|^2 = 1$  con lo cual se cumple que  $[b, b^\dagger] = 1$ ), esta pertenece a un caso particular de BT, asociada a Hamiltonianos que no contienen el término cúbico  $X^3$ . Cuando éste aparece, la transformación que surge es la llamada *Transformación Generalizada de Bogoliubov GTB*, pues como su nombre lo indica, es una transformación mas general del tipo, dada por  $b = t_1 a + t_2 a^\dagger + t_3 I$  y  $b^\dagger = t_2^* a + t_1^* a^\dagger + t_3^* I$ , siendo la identidad. El método radica entonces en encontrar los coeficientes  $t_1$ ,  $t_2$  y  $t_3$ , donde  $t_1$  y  $t_2$  están asociados a rotaciones en el espacio de fase (P,Q), mientras que  $t_3$  representa una traslación en el mismo espacio. Por consiguiente, se puede reinterpretar la BT como un re-escalamiento de los operadores  $a$  y  $a^\dagger$ .

### Transformaciones Iterativas de Bogoliubov IBT

De acuerdo al Teorema de Von Neumann (11), que señala que toda transformación canónica, puede representarse por una transformación

unitaria  $b(a, a^\dagger) = U a U^\dagger$ , es posible incorporar aquella parte de la interacción asociada con términos de mayor orden en los operadores bosónicos. Este operador de evolución se encuentra despreciando el término  $V_1(t)$ , ecuación [1], que contiene toda la información relacionada con los operadores bosónicos superiores al cuadrático o al bi-lineal. El estudio detallado es realizado en la referencia (1). En ese caso, y en vista que la parte del Hamiltoniano considerada  $H_0 + V_0(t)$  en la representación de interacción está expresado como una combinación lineal de operadores que generan un álgebra de Lie finita, entonces de acuerdo a Gilmore y Yuan (12), ello permite escribir el operador de evolución temporal como el producto de exponenciales. Más aún, se ha demostrado que si el Hamiltoniano  $H_0 + V_0(t)$  es hermítico, entonces esta forma de representación para la evolución temporal es global (13). El operador de evolución  $U_{I_0}^{(I)}$  asociado a la "iteración cero", dado por

$$U_{I_0}(t) = e^{-\alpha_1 a^{\dagger 2}} e^{-\alpha_2 a^\dagger} e^{-\alpha_3 a^\dagger a} e^{-\alpha_4 a} e^{-\alpha_5 a^2} e^{-\alpha_6} \quad [2]$$

dependiente de las funciones  $\alpha_k(t)$  complejas, es utilizado como punto de partida para un análisis iterativo superior. Estas funciones ya fueron calculadas en referencia (1) empleando una metodología propuesta por Yuen [2], basada en el hecho que el Hamiltoniano cuadrático  $H_0 + V_0(t)$  es capaz de generar los ya conocidos Estados Coherentes de dos fotones. Mas adelante haremos uso de los resultados de Mundaraín y colaboradores (1), para estimar estas funciones y con ellas el operador de evolución. Esto será necesario para la implementación del método iterativo cuando se incluya el término  $V_1(t)$ .

El Hamiltoniano en la representación de interacción, puede ser descompuesto como una parte que forma un álgebra de Lie finita y una que contiene operadores bosónicos de mayor orden a los bi-lineales y cuadráticos, dado por  $H_{I_0} = H_{I_0}^{(I)} + H_{I_0}^{(II)}$ . El operador de evolución temporal en la representación de interacción tiene la forma  $U_{I_0} = U_{I_0}^{(I)} U_{I_0}^{(II)}$ , donde la evolución de  $U_{I_0}^{(I)}$  está gobernada por  $H_{I_0}^{(I)}$  y  $U_{I_0}^{(II)}$ , de acuerdo al Hamiltoniano transformado

$$H_{I_1} = U_{I_1}^{(I)\dagger} H_{I_0}^{(II)} U_{I_1}^{(I)} = H_{I_1}^{(I)} + H_{I_1}^{(II)} \quad [3]$$

Utilizando los resultados mostrados en la referencia (1),  $U_{I_1}^{(I)}$  puede ser expresado como el producto de exponenciales con coeficientes complejos dependientes del tiempo  $\alpha_k(t)$  obtenidos a través de la metodología de Yuen (2). El Hamiltoniano transformado  $H_{I_1}$  de la ecuación (3) puede ser evaluado fácilmente, dado que el efecto de la transformación sobre los operadores de creación y aniquilación corresponde a la GTB ( $b = t_1 a + t_2 a^\dagger + t_3 I$  y  $b^\dagger = t_2^* a + t_1^* a^\dagger + t_3^* I$ ). Al hacer esto, el Hamiltoniano consiste nuevamente de una parte que genera un álgebra de Lie y una parte que no cierra el álgebra. Repitiendo el procedimiento separamos a  $H_{I_1}$  en estas dos partes, con su correspondiente operador de evolución como el producto  $U_{I_1}^{(II)} = U_{I_2}^{(I)} U_{I_2}^{(II)}$ , donde  $U_{I_2}^{(I)}$  contiene a los operadores que forman un álgebra de Lie y por lo tanto es expresada de nuevo como el producto de exponenciales. El operador de evolución luego de  $k$  transformaciones resulta en:

$$U_1 = U_{I_0}^{(I)} U_{I_1}^{(II)} U_{I_2}^{(I)} U_{I_3}^{(II)} \dots U_{I_k}^{(I)} U_{I_k}^{(II)} \approx U_{I_0}^{(I)} U_{I_1}^{(II)} U_{I_2}^{(I)} U_{I_3}^{(II)} \dots U_{I_k}^{(I)} \quad [4]$$

donde un primer nivel de aproximación al problema consiste en considerar la evolución del sistema, despreciando a  $U_{I_k}^{(II)}$ . Se puede intentar evaluar a  $U_{I_k}^{(II)}$  por otro método tal como teoría de perturbaciones de primer orden, pero entonces el operador evolución que resulta no necesariamente es unitario. Aunque el prescindir de esta parte del operador genera resultados menos exactos, se ha demostrado que las probabilidades de transición obtenidas a partir del cálculo iterativo, da mejoras significativas con respecto a aquellas obtenidas sin iteraciones cuando se estudian, por ejemplo, las colisiones moleculares (3).

### Procedimiento Iterativo y Transformaciones de Bogoliubov

El problema a resolver consiste en describir la evolución del sistema representado por el Hamiltoniano:

$$H = \hat{P}^2 / 2m + m\Omega^2 \hat{X}^2 / 2 + \lambda \hat{X}^3 + \gamma \hat{X}^4 - \mu \cdot E \quad [5]$$

considerando el campo eléctrico  $E = E_0 / 2[\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t + \phi) + \exp[-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t + \phi)]]$ , y donde  $\mu$  es el momento dipolar molecular. Podemos expresar el Hamiltoniano en la forma:

$$H = \hbar\Omega(2a^\dagger a + 1) / 2 + \bar{\lambda}(a^\dagger + a)^3 \bar{\gamma}(a^\dagger + a) - \eta_0 \cos(\omega t)(a^\dagger + a) \quad [6]$$

que luego de desarrollar las potencias, podemos expresarlo de la forma compacta:

$$H = H_{HO} + H_{I_0}^{(I)} + H_{I_0}^{(II)} \quad [7]$$

donde

$$H_{I_0}^{(I)} = \bar{\lambda}(3a^\dagger + 3a) + \bar{\gamma}(6a^{\dagger 2} + 6a^2 + 12a^\dagger a + 3) - \eta_0 \cos(\omega t)(a^\dagger + a) \quad [7.a]$$

$$H_{I_0}^{(II)} = \bar{\lambda}(a^3 + a^{\dagger 3} + 3a^\dagger a^2 + 3a^{\dagger 2} a) + \bar{\gamma}(a^4 + a^{\dagger 4} + 4a^\dagger a^3 + 6a^{\dagger 2} a^2 + 4a^{\dagger 3} a) \quad [7.b]$$

definiendo  $\gamma = \gamma(\hbar / 2m\Omega)^2$ ,  $\bar{\lambda} = \lambda(\hbar / 2m\Omega)^{3/2}$ ,  $\eta_0 = eE_0(\hbar / 2m\Omega)^{1/2}$ . Considerando la ecuación [7], el procedimiento iterativo para el cálculo del Hamiltoniano de interacción y el correspondiente propagador (Figura 1).

Como se observa, es fundamental para el proceso iterativo invocar soluciones analíticas al problema cuando el Hamiltoniano es sólo descrito en término de operadores bosónicos cuadráticos y bi-lineales. Sólo en este caso, sin necesidad de introducir transformaciones generalizadas, los generadores constituyen un álgebra cerrada y por ende una solución analítica para el operador de evolución temporal.

### Procedimiento de cálculo: Iteración cero

De acuerdo a los resultados obtenidos en referencia b (1),  $U = U_{HO} U_{I_0}$ , mientras que el Hamiltoniano de interacción se expresa como  $H_{I_0} = \sum_{0 \leq k+j \leq 2} f_{kj} e^{i\Omega(k-j)t} a^{\dagger k} a^j = \sum_{0 \leq k+j \leq 2} g_{kj}(t) a^{\dagger k} a^j$  donde los coeficientes  $f_{kj}$  contienen los términos de

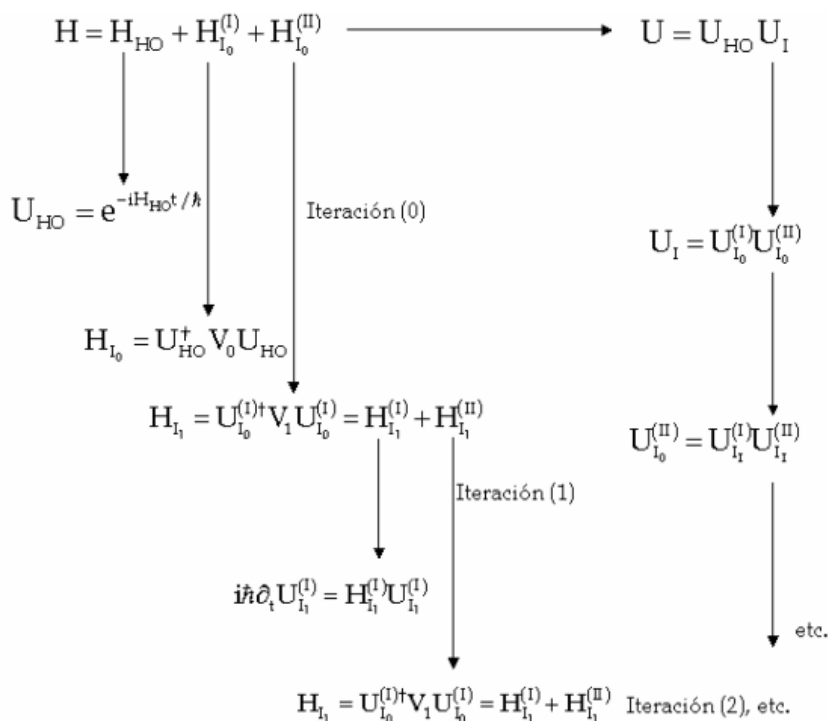


Figura 1. Procedimiento iterativo para el cálculo del hamiltoniano de iteración y el correspondiente propagador.

anarmonicidad  $\bar{\lambda}$  y  $\bar{\gamma}$ , los cuales fueron ya obtenidos en nuestros cálculos anteriores, por desarrollo de los exponenciales en el potencial de Morse [4],  $\lambda = -\hbar\omega\sqrt{X_e/2}$ ,  $\gamma = 7\hbar\omega X_e/12$ . En nuestros casos xx representa un parámetro molecular calculado a través de un potencial de Morse. Dependiendo de los valores de  $X_e$ , el modelo representa el potencial efectivo para una molécula particular. En el caso de moléculas diatómicas del tipo H-X, es común  $X_e = 10^{-5}$ . Usando la ecuación de Schrödinger en la representación de interacción, es posible encontrar el conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas para los coeficientes  $\alpha_k(t)$ . El sistema de 6 ecuaciones diferenciales ha sido resuelto en trabajos anteriores (1), por lo que en principio no es necesario recurrir a nuevos cambios de variables para expresar al operador de evolución en términos de sus propiedades como operador de compresión y desplazamiento. En vista de la complejidad de la proyección del operador escrito de acuerdo al producto de exponenciales sobre los estados de número luego de la primera iteración, en este tra-

bajo se demostrará que es considerablemente más conveniente la realización de tal cambio de variable (1). En este caso, se logra obtener el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas:

$$\partial_t \mu = (i/\hbar)(g_{11}\mu - 2g_{02}\nu)$$

$$\partial_t \varepsilon = (i/\hbar)(-g_{10}\mu + 2g_{01}\nu)$$

$$\partial_t \nu = (i/\hbar)(-g_{11}\nu + 2g_{20}\mu)$$

$$\partial_t \theta = (1/2\hbar)g_{11} + (i/2)(\varepsilon \partial_t \varepsilon^* - \varepsilon^* \partial_t \varepsilon)$$

En la referencia (1) se demuestra la relación de las funciones  $\alpha_k(t)$  ( $k=1,\dots,6$ ) con estas nuevas variables  $\mu, \nu, \varepsilon, \theta$ . En esta aproximación de iteración "cero" (0) la probabilidad de transición  $P_{0 \rightarrow 1}^{(0)}$  está gobernada por la ecuación siguiente:

$$P_{0 \rightarrow 1}^{(0)} = \frac{|\varepsilon|^2}{|\mu|^3} \exp\left(\operatorname{Re}\left(\frac{\nu^* \varepsilon^2}{\mu}\right) - |\varepsilon|^2\right) \quad [8]$$

Las funciones  $\mu(t)$ ,  $\nu(t)$  y  $\varepsilon(t)$  dependen implícitamente de los parámetros de anarmonicidad

dad, en los cuales  $X_e$  es 0.00001. Estas expresiones para las anarmonicidades fueron extraídas de la expansión en serie de los exponenciales del oscilador de Morse (4).

La Figura 2 muestra la probabilidad de transición según los resultados numéricos obtenidos para el caso  $\eta_0 = 10\lambda$ . La primera conclusión importante, es que el cálculo analítico que corresponde a estos parámetros de anarmonicidad, es correcto.

### Procedimiento de cálculo: Primera Iteración

Escribiendo la ecuación [7.b] en términos de los coeficientes genéricos:

$$H_{I_0}^{(II)} = g_{03}^{(0)}a^3 + g_{12}^{(0)}a^\dagger a^2 + g_{21}^{(0)}a^{\dagger 2} a + g_{30}^{(0)}a^{\dagger 3} + g_{04}^{(0)}a^4 + g_{13}^{(0)}a^{\dagger 3} a + g_{22}^{(0)}a^{\dagger 2} a^2 + g_{31}^{(0)}a^\dagger a^3 + g_{40}^{(0)}a^{\dagger 4} \quad [9]$$

De la iteración 0, se sabe que en la representación de interacción:

$$H_{I_0} = U_{HO}^\dagger H U_{HO} = H_{I_0}^{(I)} + H_{I_0}^{(II)} \quad [10]$$

A partir del primer término se obtuvo en la iteración cero al operador evolución  $U_{I_0}^{(I)}$  con el cual se procede a calcular  $H_{I_1}$  según  $H_{I_1} = U_{I_0}^{(I)\dagger} H_{I_0}^{(II)} U_{I_0}^{(I)} = H_{I_1}^{(I)} + H_{I_1}^{(II)}$ . Cada término en  $H_{I_1}$  se calcula de la siguiente manera, por ejemplo:

$$U_{I_0}^{(I)\dagger} a^3 U_{I_0}^{(I)} = U_{I_0}^{(I)\dagger} a U_{I_0}^{(I)} U_{I_0}^{(I)\dagger} a U_{I_0}^{(I)} U_{I_0}^{(I)\dagger} a U_{I_0}^{(I)} = b^3 = (f_1 a + f_2 a^\dagger + f_3)^3 = (f_1 a + f_2 a^\dagger + f_3)^2 (f_1 a + f_2 a^\dagger + f_3) \quad [11]$$

los términos  $b^2, b^3, b^4, b^{\dagger 2}, b^{\dagger 3}, b^{\dagger 4}$ , así como los términos combinados  $b^\dagger b^2, b^{\dagger 2} b, b^\dagger b^3, b^{\dagger 3} b$  y  $b^{\dagger 2} b^2$  son calculados de manera equivalente. En estas ecuaciones, las funciones  $f_j$  están dadas por:  $f_1 = e^{-\alpha_3} 4\alpha_1 \alpha_5 e^{\alpha_3}$ ;  $f_2 = -2\alpha_1 e^{\alpha_3}$ ;  $f_3 = -2\alpha_1 \alpha_4 e^{\alpha_3} - \alpha_2$ . Una vez calculados estos términos, se agrupan los lineales, bilineales y cuadráticos en  $H_{I_1}^{(II)}$  tal que:

$$H_{I_1}^{(II)} = g_{00}^{(1)}1 + g_{01}^{(1)}a + g_{10}^{(1)}a^\dagger + g_{11}^{(1)}a^\dagger a + g_{02}^{(1)}a^2 + g_{20}^{(1)}a^{\dagger 2} \quad [12]$$

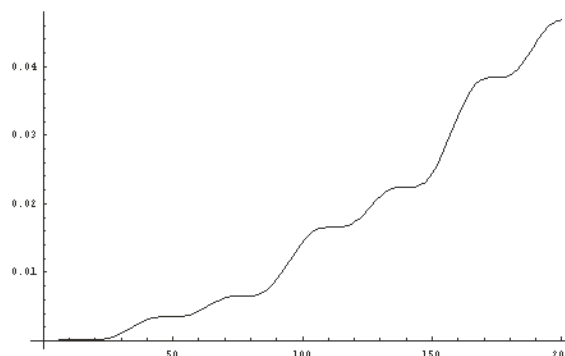


Figura 2. Probabilidad de Transición en función del tiempo para un  $X_e = 0,00001$  y  $\eta_0 = 10\lambda$ .

verificando que este Hamiltoniano sea Hermitico. Para ello debe cumplirse que:

$$g_{00}^{(1)} = g_{00}^{(1)\dagger}; g_{11}^{(1)} = g_{11}^{(1)\dagger}; g_{10}^{(1)} = g_{01}^{(1)\dagger}; g_{20}^{(1)}; g_{02}^{(1)\dagger} \quad [13]$$

Es decir, que los coeficientes diagonales sean reales, y los que están fuera de la diagonal sean uno el complejo conjugado del otro. Ello se verifica fácilmente con las expresiones derivadas, por lo que a continuación sólo se presentan los siguientes coeficientes:

$$g_{20}^{(1)} = [\bar{\lambda}(3f_2^2 f_3 + 3(f_2^2 f_3^* + 2f_1^* f_2 f_3) + 3(f_1^{\dagger 2} f_3 + 2f_1^\dagger f_2 f_3^*) + 3f_1^{\dagger 2} f_3^*) + \bar{\gamma}(6(f_2^2 f_3^* + f_2^3 f_1) + 4(3(f_2^2(|f_2|^2 + |f_3|^2) + f_1^*(f_2^2 f_1 + f_3^2 f_2))) + 6(f_1^* f_2(|f_1|^2 + 5|f_2|^2 + 4|f_3|^2) + f_1^{\dagger 2} f_3^* + f_3^{\dagger 2} f_2^2) + 4(3(f_1^{\dagger 2}(|f_2|^2 + |f_3|^2) + f_2(f_2^2 f_1 + f_3^2 f_2)^*)) + 6(f_2^2 f_3^* + f_2^3 f_1^*)) \quad [14.a]$$

$$g_{10}^{(1)} = [\bar{\lambda}(3(f_1 f_2^2 + f_2 f_3^2) + 3(f_2(|f_1|^2 + 2|f_2|^2 + 2|f_3|^2) + f_1^* f_3^2) + 3(f_2(|f_1|^2 + 2|f_2|^2 + 2|f_3|^2) + f_1^* f_3^2 + 3(f_1^{\dagger 2} f_2^* + f_1^\dagger f_3^2)) + \gamma(4(3(f_1 f_2^2 f_3 + f_2 f_3^2) + 4(3f_2 f_3(|f_1|^2 + 2|f_2|^2) + f_1^* f_3^2 + 3f_3^*(f_1 f_2^2 + f_2 f_3^2)) + 6(2f_2 f_3^*(|f_1|^2 + 2|f_2|^2 + |f_3|^2) + f_1^* f_3(3|f_2|^2 + |f_3|^2))) + 4(9f_1^* |f_2|^2 f_3^* + f_2 f_3^3 + 3f_3(f_1 f_2^2 + f_2 f_3^2)^*) + 4(3f_1 f_2^2 f_3 + f_2 f_3^2)^*) \quad [14.b]$$

$$\begin{aligned}
g_{11}^{(1)} = & [\bar{\lambda}(6(f_1 f_2 f_3 + 3(2f_3(|f_1|^2 + |f_2|^2) + f_1 f_2 f_3^*)) + 3 \\
& (2f_3^*(|f_1|^2 + |f_2|^2) + f_1^* f_2^* f_3)) + 6f_1^* f_2^* f_3^* + \\
& \bar{\gamma}(1(2f_1^2 f_2^2 + f_1 f_2 f_3^2) + 4(3(f_1 f_2 (2|f_2|^2 + 2|f_3|^2) + \\
& f_2^*(f_1 f_2^2 + f_2 f_3^2) + f_1^*(f_2 f_1^2 + f_1 f_3^2))) + 6(4|f_2|^4 + \\
& 2|f_2|^2 |f_1|^2 + |f_3|^2 (|f_1|^2 + |f_2|^2) + 2f_1 f_2 f_3^* + cc)) + \\
& 4(3(f_1^* f_2^* (2|f_2|^2 + 2|f_3|^2) + f_2 (f_1 f_2^2 + f_2 f_3^2)^* + \\
& f_1 (f_2 f_1^2 + f_1 f_3^2)^*)) + 12(f_1^2 f_2^2 + f_1 f_2 f_3^2)^*] \quad [14.c]
\end{aligned}$$

Dada la extensión y complejidad de los coeficientes, éstos sólo pueden ser calculados simbólicamente. Por otra parte, debemos recordar que dependen de las funciones  $f_i(t)$ , que son los coeficientes de la transformación de Bogoliubov sobre el operador de creación de la iteración cero. Se plantea nuevamente el sistema de ecuaciones diferenciales para la determinación de  $U_{I_1}^{(1)}$  a partir de las siguientes expresiones:

$$i\hbar \dot{U}_{I_1}^{(1)} = H_{I_1}^{(1)} U_{I_1}^{(1)} \quad [15]$$

y

$$U_{I_1}^{(1)}(t) = e^{-\alpha_1^{(1)} a^\dagger} e^{-\alpha_2^{(1)} a} e^{-\alpha_3^{(1)} a^\dagger a} e^{-\alpha_4^{(1)} a} e^{-\alpha_5^{(1)} a^2} e^{-\alpha_6^{(1)} a^2} \quad [16]$$

con lo cual:

$$\begin{aligned}
\partial_t \alpha_1^{(1)} &= \frac{i}{\hbar} (g_{20}^{(1)} - 2\alpha_1^{(1)} g_{11}^{(1)} + 4\alpha_1^{(1)2} g_{02}^{(1)}); \\
\partial_t \alpha_2^{(1)} &= \frac{i}{\hbar} (g_{10}^{(1)} - \alpha_2^{(1)} g_{11}^{(1)} + 4\alpha_1^{(1)} g_{02}^{(1)} - 2\alpha_1^{(1)} g_{01}^{(1)}); \\
\partial_t \alpha_3^{(1)} &= \frac{i}{\hbar} (g_{11}^{(1)} - 4\alpha_1^{(1)} g_{02}^{(1)}); \\
\partial_t \alpha_4^{(1)} &= \frac{i}{\hbar} (g_{01}^{(1)} - 2\alpha_2^{(1)} g_{02}^{(1)}); \\
\partial_t \alpha_5^{(1)} &= \frac{i}{\hbar} g_{02}^{(1)} e^{-2\alpha_3}; \\
\partial_t \alpha_6^{(1)} &= \frac{i}{\hbar} (g_{00}^{(1)} - \alpha_2^{(1)} g_{01}^{(1)} + g_{02}^{(1)} (\alpha_2^{(1)2} - 2\alpha_1^{(1)})); \quad [17]
\end{aligned}$$

A este nivel se presentan dos inconvenientes; el primero está relacionado con la resolución numérica del sistema [17] en cuanto al esfuerzo computacional. De hecho, no es posible resolver tal conjunto de ecuaciones insertando directamente las funciones de los coeficientes para los  $g_{ij}$ . Es necesario buscar una forma alternativa que

será explicada en detalle, más adelante. El segundo inconveniente surge una vez resuelto el sistema, cuando se calcula la probabilidad de transición  $\langle 1 | U_{I_0}^{(1)} U_{I_1}^{(1)} | 0 \rangle$  y las dispersiones en momento y posición, pues dependen de términos del tipo:  $(U_{I_0}^{(1)} U_{I_1}^{(1)})^\dagger a U_{I_0}^{(1)} U_{I_1}^{(1)}$ . Veamos por ejemplo el cálculo de la amplitud de la probabilidad de transición  $\langle 1 | U_{I_0}^{(1)} U_{I_1}^{(1)} | 0 \rangle$  con el operador evolución para cada iteración escrito como el producto de exponenciales:

$$\begin{aligned}
\langle 1 | e^{-\alpha_1 a^\dagger} e^{-\alpha_2 a} e^{-\alpha_3 a^\dagger a} e^{-\alpha_4 a} e^{-\alpha_5 a^2} e^{-\alpha_6 a} e^{-\alpha_1^{(1)} a^\dagger} \\
e^{\alpha_2^{(1)} a^\dagger} e^{-\alpha_3^{(1)} a^\dagger a} e^{-\alpha_4^{(1)} a} e^{-\alpha_5^{(1)} a^2} e^{-\alpha_6^{(1)} a} | 0 \rangle \quad [18]
\end{aligned}$$

Esta proyección es engorrosa y demasiado larga, sobretodo considerando futuras iteraciones. Se decide entonces representar al operador evolución en términos de sus propiedades como operador compuesto por un operador de desplazamiento y otro de compresión, lo que permite expresar al operador evolución para cada iteración como:

$$U_{I_j} | 0 \rangle = e^{i\phi_j} U_{(z_j)} D_{(\epsilon_j)} | 0 \rangle = e^{i\phi_j} | \beta_j + \epsilon_j \rangle_g \quad [19]$$

donde el subíndice  $j$  indica la iteración.

### Composición de un operador evolución global

La idea es encontrar una composición de operadores adecuada para la proyección sobre los estados de Fock. Según la ecuación [19], la amplitud de probabilidad hasta la primera iteración es:

$$\begin{aligned}
\langle 1 | U_{I_0}^{(1)} U_{I_1}^{(1)} | 0 \rangle &= \langle 1 | e^{i\phi_0} U_{(z_0)} D_{(\epsilon_0)} e^{i\phi_1} U_{(z_1)} D_{(\epsilon_1)} | 0 \rangle \\
&= e^{i(\phi_0 + \phi_1)} \langle 1 | U_{(z_0)} D_{(\epsilon_0)} U_{(z_1)} D_{(\epsilon_1)} | 0 \rangle \quad [20]
\end{aligned}$$

donde  $D(\epsilon) = e^{\epsilon a^\dagger - \epsilon^* a}$  es el operador de desplazamiento, mientras que  $U(z) = e^{\frac{1}{2} z^* a^2 - \frac{1}{2} z a^{\dagger 2}}$  es el operador de compresión.



sión, tal que  $U^\dagger(z) a U(z) = \mu a + \nu a^\dagger$ . Para resolver [20], lo primero que se observa es que  $D(\varepsilon_0) U(z_1)$  puede representarse como  $U(z_1) D(\beta)$ , recordando que los estados coherentes de dos fotones son el resultado de la acción del operador desplazamiento y luego compresión sobre el estado vacío:  $U(z) D(\beta) |0\rangle = |\beta\rangle_b$ . Por otro lado, cuando los operadores se invierten, lo que resulta son los estados coherentes comprimidos:

$$D(\varepsilon) U(z) |0\rangle = |\varepsilon; \mu, \nu\rangle \tag{21}$$

Ambos estados son equivalentes si se cumple una relación que básicamente lo que refleja es la conmutabilidad de ambos operadores para un caso en particular:

$$\varepsilon = \mu\beta - \nu\beta^* \tag{22}$$

con lo cual:

$$|\beta\rangle_b = U(z) D(\beta) |0\rangle = D(\varepsilon) U(z) |0\rangle = |\beta + \varepsilon\rangle_b \tag{23}$$

En nuestro caso, se quiere que  $D(\varepsilon_0) U(z_1) |0\rangle = U(z_1) D(\beta_0) |0\rangle$ , para lo cual se debe saber cuanto vale  $\beta$  en función de  $\mu$  y de  $\nu$ :

$$\text{Sean: } \varepsilon = \mu\beta - \nu\beta^* \text{ y } \varepsilon^* = \mu^*\beta^* - \nu^*\beta \tag{24}$$

Entonces, al multiplicar por  $\mu^*$  (la primera) y por  $\nu$  (la segunda ecuación) y sumando, nos queda finalmente  $\mu^*\varepsilon + \nu\varepsilon^* = (|\mu|^2 - |\nu|^2)\beta - \mu^*\nu\beta^* + \nu\mu^*\beta^*$ , y dado que  $|\mu|^2 - |\nu|^2 = 1$ , entonces:

$$\beta = \mu^*\varepsilon + \nu\varepsilon^* \rightarrow \beta_0 = \mu_1^*\varepsilon_0 + \nu_1\varepsilon_0^* \tag{25}$$

Ahora la ecuación [20] queda como:

$$\begin{aligned} \langle 1|U_{I_0}^{(U)}U_{I_1}^{(I)}|0\rangle &= e^{i(\phi_0+\phi_1)} \langle 1|U_{(z_0)}D_{(\varepsilon_0)}U_{(z_1)}D_{(\varepsilon_1)}|0\rangle \\ &= e^{i(\phi_0+\phi_1)} \langle 1|U_{(z_0)}U_{(z_1)}D_{(\beta_0)}D_{(\varepsilon_1)}|0\rangle \end{aligned} \tag{26}$$

Se procede entonces a componer un operador de desplazamiento global. Para ello empleamos la regla de BCH, dada por la relación  $e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,B]}$ . Considerando  $A = \beta_0 a^\dagger - \beta_0^* a$

y  $B = \varepsilon_1 a^\dagger - \varepsilon_1^* a$ , entonces  $[A, B] = \beta_0 \varepsilon_1^* - \beta_0^* \varepsilon_1$ , por lo

$$D(\beta_0) D(\varepsilon_1) = D(\beta_0 + \varepsilon_1) e^{\frac{1}{2}(\beta_0 \varepsilon_1^* - \beta_0^* \varepsilon_1)} \tag{27}$$

y por tanto

$$\begin{aligned} \langle 1|U_{I_0}^{(U)}U_{I_1}^{(I)}|0\rangle &= e^{i(\phi_0+\phi_1)} \langle 1|U_{(z_0)}U_{(z_1)}D_{(\beta_0)}D_{(\varepsilon_1)}|0\rangle \\ &= e^{i(\phi_0+\phi_1)} e^{\frac{1}{2}(\beta_0 \varepsilon_1^* - \beta_0^* \varepsilon_1)} \langle 1|U_{(z_0)}U_{(z_1)}D(\beta_0 + \varepsilon_1)|0\rangle \end{aligned} \tag{28}$$

$$\text{donde } D(\beta_0 + \varepsilon_1) = e^{(\beta_0 + \varepsilon_1)a^\dagger - (\beta_0 + \varepsilon_1)^* a} \tag{29}$$

tal que su acción sobre el estado vacío es:

$$D(\beta_0 + \varepsilon_1) |0\rangle = |\beta_0 + \varepsilon_1\rangle \tag{30}$$

Igualmente, la composición de  $U_{(z_0)} U_{(z_1)}$  se efectuó de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} U^\dagger(z_0) a U(z_0) &= \mu_0 a + \nu_0 a^\dagger \text{ y } U^\dagger(z_1) a U(z_1) = \mu_1 a + \nu_1 a^\dagger \\ U^\dagger(z_0) a^\dagger U(z_0) &= \mu_0^* a^\dagger + \nu_0^* a \text{ y } U^\dagger(z_1) a^\dagger U(z_1) = \mu_1^* a^\dagger + \nu_1^* a \end{aligned} \tag{31}$$

tal que se compone un operador de compresión global del tipo:

$$\begin{aligned} U(\tilde{z}) &= U(z_0) U(z_1) \\ U^*(\tilde{z}) &= (U(z_0) U(z_1))^* = U(z_1)^* U(z_0)^* \end{aligned} \tag{32}$$

a partir del cual se tiene que:

$$U^*(\tilde{z}) a U(\tilde{z}) = \tilde{\mu} a + \tilde{\nu} a^\dagger \tag{33}$$

y verificando que esta transformación sea unitaria, es decir  $|\tilde{\mu}|^2 - |\tilde{\nu}|^2 = 1$ . Al cumplirse la condición de unitariedad, es válido hacer la composición para el operador de compresión global:

$$U(\tilde{z}) = U(z_0) U(z_1) = e^{\frac{1}{2}\tilde{z}^* a^2 - \frac{1}{2}\tilde{z} a^{\dagger 2}} \tag{34}$$

donde el nuevo parámetro de compresión esta dado por  $\tilde{z} = \tilde{z} e^{\tilde{\psi}}$  tal que los nuevos coeficientes de transformación dependen del nuevo parámetro de compresión según la conocida relación:

$$\tilde{\mu} = \cosh \tilde{r} \text{ y } \tilde{\nu} = e^{i\tilde{\psi}} \sinh \tilde{r} \tag{35}$$

Con este resultado para la expresión del operador de compresión, la ecuación [20] se modifica para dar:

$$\begin{aligned} \langle 1|U_{I_0}^{(1)}U_{I_1}^{(1)}|0\rangle &= e^{i(\phi_0 + \phi_1)} e^{\frac{1}{2}(\beta_0^* \varepsilon_1^* - \beta_0^* \varepsilon_1)} \langle 1|U_{(z_0)}U_{(z_1)}D(\beta_0 + \varepsilon_1)|0\rangle \\ &= e^{i(\phi_0 + \phi_1)} e^{\frac{1}{2}(\beta_0^* \varepsilon_1^* \beta_0^* \varepsilon_1)} \langle 1|U(\tilde{z})D(\beta_0 + \varepsilon_1)|0\rangle \end{aligned} \quad [36]$$

Por los resultados previos, sabemos que

$$\theta = \phi - \frac{i}{2}(\beta^* \varepsilon - \varepsilon^* \beta) \quad [37]$$

En nuestro caso:

$$\tilde{\theta} = i(\phi_0 + \phi_1) - \frac{1}{2}(\beta_0^* \varepsilon_1 - \varepsilon_1^* \beta_0) \quad [38]$$

Finalmente, la expresión para la amplitud de probabilidad hasta la primera iteración es la siguiente:

$$\begin{aligned} \langle 1|U_{I_0}^{(1)}U_{I_1}^{(1)}|0\rangle &= e^{\tilde{\theta}} \langle 1|U(\tilde{z})D(\beta_0 + \varepsilon_1)|0\rangle \\ &= \frac{e^{\tilde{\theta}}}{\sqrt{\tilde{\mu}}} \frac{\varepsilon}{\tilde{\mu}} \exp\left[\frac{\tilde{\nu}^* \tilde{\varepsilon}^2}{2\tilde{\mu}} - \frac{|\tilde{\varepsilon}|^2}{2}\right] \end{aligned} \quad [39]$$

donde:  $\left. \begin{aligned} \tilde{\mu} &= \mu_0 \mu_1 + \nu_0 \nu_1^* \\ \tilde{\nu} &= \mu_0 \nu_1 + \nu_0 \mu_1^* \end{aligned} \right\}$  son los nuevos coeficientes de transformación, mientras que el nuevo parámetro de desplazamiento está dado por

$\tilde{\varepsilon} = \beta_0 + \varepsilon_1 = \mu_1^* \varepsilon_0 + \nu_1 \varepsilon_0^* + \varepsilon_1$ ,

$$\tilde{\theta} = \tilde{\phi} + \frac{i}{2}(\beta_0^* \varepsilon_1 - \varepsilon_1^* \beta_0) = (\phi_0 + \phi_1) + \frac{i}{2}(\beta_0^* \varepsilon_1 - \varepsilon_1^* \beta_0) \left. \vphantom{\tilde{\theta}} \right\}$$

es la nueva fase.

Al insertar estos parámetros en la ecuación [36] se obtiene la expresión completa para la amplitud de probabilidad hasta la primera iteración:

$$\begin{aligned} U_{I_{01}} &= e^{i(\phi_0 + \phi_1)} e^{\frac{1}{2}[\varepsilon_1^* (\mu_1^* \varepsilon_0 + \nu_1 \varepsilon_0^*) - \varepsilon_1 (\mu_1^* \varepsilon_0 + \nu_1 \varepsilon_0^*)^*]} \\ &\quad \frac{(\mu_1^* \varepsilon_0 + \nu_1 \varepsilon_0^* \varepsilon_1)}{(\mu_0 \mu_1 + \nu_0 \nu_1^*)^{3/2}} \\ &\quad e^{\frac{1}{2} \left( \frac{(\mu_0 \nu_1 + \nu_0 \mu_1^*)^* (\mu_1^* \varepsilon_0 + \nu_1 \varepsilon_0^* + \varepsilon_1)^2}{\mu_0 \mu_1 + \nu_0 \nu_1^*} + |\mu_1^* \varepsilon_0 + \nu_1 \varepsilon_0^* + \varepsilon_1|^2 \right)} \end{aligned} \quad [40]$$

y la probabilidad de transición a iteración [1], que no depende de la fase, está dada por:

$$P_{0 \rightarrow 1}^{(0)} = \frac{|\tilde{\varepsilon}|^2}{|\tilde{\mu}|^3} \exp \left[ \operatorname{Re} \left( \frac{\tilde{\nu}^* \tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{\mu}} \right) - |\tilde{\varepsilon}|^2 \right] \quad [41]$$

Según la Figura 3, la probabilidad de transición hasta la primera iteración  $P_{0 \rightarrow 1}^{(1)}$  presenta el mismo comportamiento de la iteración 0. Para poder apreciar el orden de magnitud de los cambios de la probabilidad de transición entre los dos casos es preferible representar la diferencia porcentual  $100(P_{0 \rightarrow 1}^{(0)} - P_{0 \rightarrow 1}^{(1)}) / P_{0 \rightarrow 1}^{(0)}$  (Figura 4).

Con este gráfico se verifica que el cambio o mejoría en los resultados con la primera iteración llega a superar el 0.1%.

La ecuación [41] revela tres características importantes del operador evolución:

a) La amplitud de probabilidad considerando ambas iteraciones es completamente equivalente a la amplitud de la iteración 0. Basta con reemplazar los parámetros anteriores por los nuevos parámetros de compresión, desplazamiento y fase.

b) Las iteraciones, que en principio corresponden a operadores evolución diferentes, tal que cada uno de ellos es capaz por separado de generar estados coherentes de dos fotones según la definición [20], están en realidad muy relacionadas entre si, puesto que el tratamiento algebraico descrito las pudo agrupar en una sola.

c) El proceso iterativo puede resumirse en la acción de un operador de desplazamiento global y un operador de compresión global. Por ende, el operador de evolución total es capaz de generar los ya mencionados estados coherentes de dos fotones:

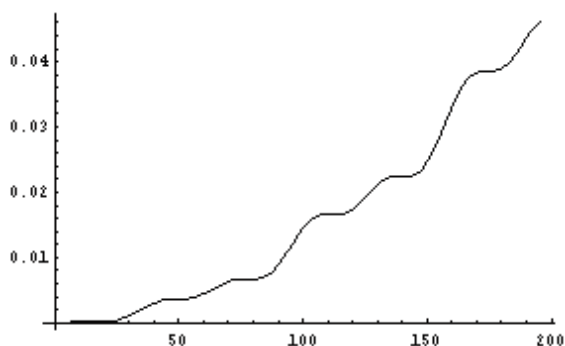


Figura 3. Probabilidad de transición en función del tiempo hasta la primera iteración para un  $X_c=0,00001$  y  $\eta_0=10\lambda$ .

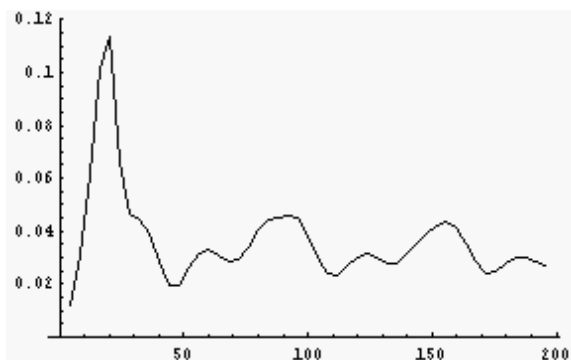


Figura 4. Diferencia relativa  $100(P_{0 \rightarrow 1}^{(0)} - P_{0 \rightarrow 1}^{(1)}) / P_{0 \rightarrow 1}^{(0)}$  entre la probabilidad de transición de la iteración cero  $P_{0 \rightarrow 1}^{(0)}$  y la probabilidad de transición hasta la primera iteración  $P_{0 \rightarrow 1}^{(1)}$  como función del tiempo para un  $X_c=0,00001$  y  $\eta_0=10\lambda$ .

$$U_{I_0}^{(1)} U_{I_1}^{(1)} |\alpha\rangle = e^{\tilde{\theta}} U(\tilde{z}) D(\beta_0 + \varepsilon_1) |\alpha\rangle = e^{i\tilde{\theta}} |\alpha + \beta_0 + \varepsilon_1\rangle_b \quad [42]$$

d) El operador evolución global es unitario, ya que puede ser expresado como el producto de un operador de desplazamiento global y un operador de compresión global, los cuales son operadores unitarios.

e) La operación seguida de dos operadores de compresión  $U_{(z_0)} U_{(z_1)}$  es equivalente a una compresión global, la cual genera una transformación de Bogoliubov tal que los nuevos coeficientes de transformación son:

$$U^*(\tilde{z}) a U(\tilde{z}) = (\mu_0 \mu_1 + \nu_0 \nu_1^*) a + (\mu_0 \nu_1 + \nu_0 \mu_1^*) a^\dagger = \tilde{\mu} a + \tilde{\nu} a^\dagger \quad [43]$$

donde se verifica fácilmente que  $|\tilde{\mu}|^2 - |\tilde{\nu}|^2 = 1$ .

### Procedimiento de cálculo: Segunda Iteración

Para la segunda iteración calculamos:

$$H_{I_2} = U_{I_1}^{(1)\dagger} H_{I_1}^{(1)} U_{I_1}^{(1)} = H_{I_2}^{(1)} + H_{I_2}^{(11)} \quad [44]$$

donde

$$i\hbar \dot{U}_{I_1}^{(1)} = H_{I_1}^{(1)} U_{I_1}^{(1)} \text{ y } H_{I_1} = U_{I_0}^{(1)\dagger} V_1 U_{I_0}^{(1)} = H_{I_1}^{(1)} + H_{I_1}^{(11)}$$

fueron hallados en la primera iteración. Es necesaria la expresión para  $H_{I_1}^{(11)}$  que se obtuvo en la primera iteración. Este término depende de los operadores bosónicos de orden mayor a dos a través de los coeficientes de transformación, según la relación:

$$H_{I_1}^{(11)} = g_{03}^{(11)} a^3 + g_{12}^{(11)} a^\dagger a^2 + g_{21}^{(11)} a^{\dagger 2} a + g_{30}^{(11)} a^{\dagger 3} + g_{04}^{(11)} a^4 + g_{13}^{(11)} a^{\dagger 3} a + g_{22}^{(11)} a^{\dagger 2} a^2 + g_{31}^{(11)} a^\dagger a^3 + g_{40}^{(11)} a^{\dagger 4} \quad [45]$$

Se verifica que este Hamiltoniano es Hermitico dado que se cumple que:

$$g_{03}^{(11)} = g_{30}^{(11)\dagger}; g_{12}^{(11)} = g_{21}^{(11)\dagger}; g_{04}^{(11)} = g_{40}^{(11)\dagger}; g_{13}^{(11)} = g_{31}^{(11)\dagger}; g_{22}^{(11)} = g_{22}^{(11)\dagger} \quad [46]$$

Con lo cual sólo es necesario calcular cinco de los diez coeficientes:

$$g_{03}^{(11)} = \bar{\lambda}(f_1^3 + 3f_1^2 + 3(f_1 f_3^{*2} + f_2^{*3}) + \bar{\gamma}(4f_1^3 f_3 + 4(f_1^2 f_3^* + 3f_1^2 f_2^* f_3) + 6(2f_1^2 f_2^* f_3^* + f_1 f_2^{*2} f_3) + 4(f_2^{*2} f_3 + 3f_1 f_2^{*2} f_3^*) + 4f_2^{*3} f_3^*) \quad [47]$$

$$g_{12}^{(1)} = \bar{\lambda}(3f_1^2 f_2 + 3f_1(|f_1|^2 + 2|f_2|^2) + 3f_2^*(2|f_1|^2 + |f_2|^2) + 3f_2^* f_1) + \bar{\gamma}(12f_1^2 f_2 f_3 + 4 + (3(f_1 f_3(|f_1|^2 + 2|f_2|^2) + f_1^* f_2 f_3^*)) + 6(2f_2^* f_3(2|f_1|^2 + |f_2|^2)) + 4(3(f_2^* f_3^*(2|f_2|^2 + |f_3|^2) + f_1^* f_2^* f_3)) + 12f_2^* f_1^* f_3^* \quad [48]$$

$$g_{04}^{(1)} = \bar{\gamma}(f_1^4 + 4f_2^* f_1^3 + 6f_1^2 f_2^* + 4f_2^* f_1 + f_2^* f_1^4) \quad [49]$$

$$g_{13}^{(1)} = \bar{\gamma}(4f_1^3 f_3 + 4f_1^2(|f_1|^2 + 3|f_2|^2) + 6(2f_1 f_2^*(|f_1|^2 + |f_2|^2)) + 4f_1^* f_2^*(|f_1|^2 + 3|f_2|^2) + 4f_1^* f_3^*) \quad [50]$$

$$g_{22}^{(1)} = \bar{\gamma}(6f_1^2 f_2^2 + 4(3(f_1 f_2(|f_1|^2 + |f_2|^2)) + 6(|f_1|^4 + |f_2|^4 + 4|f_1|^2 |f_2|^2) + 4(3f_1^* f_2^*(|f_1|^2 + |f_2|^2)) + 6f_1^* f_2^*) \quad [51]$$

Al efectuar el cálculo de la ecuación [44], se obtuvo nuevamente un Hamiltoniano que fue separado en dos partes:  $H_{I_2} = U_{I_1}^{(1)\dagger} H_{I_1}^{(II)} U_{I_1}^{(I)} = H_{I_2}^{(I)} + H_{I_2}^{(II)}$ , donde  $H_{I_2}^{(I)}$  está conformado por los operadores bosónicos que generan un álgebra de Lie:

$$\hat{H}_{I_2}^{(I)} = \sum_{0 \leq i+j \leq 2} g_{ij}^{(2)} a^{\dagger i} a^j \quad [52]$$

donde los coeficientes  $g_{i+j \leq 2}^{(2)}$  que acompañan a los operadores lineales, bi-lineales y cuadráticos dependen de los coeficientes de mayor orden  $g_{i+j > 2}^{(1)}$  de la iteración anterior, los cuales a su vez dependen de los  $g_{i+j \leq 2}^{(0)}$  (así como los  $g_{i+j \leq 2}^{(1)}$  dependían de los  $g_{i+j > 2}^{(0)}$ ):

$$g_{20}^{(2)} = g_{03}^{(1)}(3f_2^2 f_3) + g_{12}^{(1)}(f_2^2 f_3^* + 2f_1^* f_2 f_3) + g_{21}^{(1)}(f_1^* f_3 + 2f_1^* f_2 f_3^*) + g_{30}^{(1)}(3f_1^* f_3^*) + g_{04}^{(1)}(6f_2^2 f_3^2 + f_2^2 f_1) + g_{13}^{(1)}(3f_2^2(|f_2|^2 + |f_3|^2) + f_1^*(f_2^2 f_1 + f_3^2 f_2)) + g_{22}^{(1)}(f_1^* f_2(|f_1|^2 + 5|f_3|^2 + 4|f_3|^2) + f_1^* f_3^2 + f_3^* f_2^2) + g_{31}^{(1)}(3f_1^* f_2^*(|f_2|^2 |f_3|^2) + f_2(f_2^2 f_1 + f_3^2 f_2^*)) + g_{40}^{(1)}(6(f_2^2 f_3^2 + f_2^3 f_1^*)) \quad [53]$$

$$g_{10}^{(2)} = g_{03}^{(1)}(3f_1 f_2^2 + f_2 f_3^2) + g_{12}^{(1)}(f_2 |f_1|^2 + 2|f_2|^2 + 2|f_3|^2) + f_1^* f_3^2 + g_{21}^{(1)}(f_2(|f_1|^2 + 2|f_2|^2 + 2|f_3|^2) + f_1^* f_3^2) + g_{30}^{(1)}(3f_1^* f_2^* + f_1^* f_3^2) + g_{04}^{(1)}(4(3f_1 f_2^2 f_3 + f_2 f_3^2)) + g_{13}^{(1)}(3f_2 f_3(|f_1|^2 + 2|f_2|^2) + f_1^* f_3^3 + 3f_3^*(f_1 f_2^2 + f_2 f_3^2)) + g_{22}^{(1)}(2f_2 f_3^*(|f_1|^2 + 2|f_3|^2 + |f_3|^2) + f_1^* f_3(3|f_2|^2 + |f_3|^2)) + g_{31}^{(1)}(9f_1^* |f_2|^2 f_3^* + f_2 f_3^* + 3f_3(f_1 f_2^2 + f_2 f_3^2)^*) + g_{40}^{(1)}(4(3f_1 f_2^2 f_3 + f_2 f_3^2)^*) \quad [54]$$

$$g_{11}^{(2)} = g_{03}^{(1)}(6f_1 f_2 f_3) + g_{12}^{(1)}(2(f_3 |f_1|^2 + |f_2|^2 + f_1 f_2 f_3^*)) + g_{21}^{(1)}(2(f_3^*(|f_1|^2 + |f_2|^2) + f_1^* f_2^* f_3)) + g_{21}^{(1)}(2(f_3^*(|f_1|^2 + |f_2|^2) + f_1^* f_2^* f_3)) + g_{30}^{(1)}(6f_1^* f_2^* f_3^*) + g_{04}^{(1)}(12(f_1^2 f_2^2 + f_1 f_2 f_3^2)) + g_{13}^{(1)}(3(f_1 f_2(2|f_2|^2 + 2|f_3|^2) + f_2^*(f_1 f_2^2 + f_2 f_3^2) + f_1^*(f_2 f_1^2 + f_1 f_3^2))) + g_{22}^{(1)}(4(|f_2|^4 + 2|f_2|^2 |f_1|^2 + |f_3|^2(|f_1|^2 + |f_2|^2) + 2(f_1 f_2 f_3^* + f_1^* f_2^* f_3))) + g_{31}^{(1)}(3(f_1^* f_2^*(2|f_2|^2 + 2|f_3|^2) + f_2(f_1 f_2^2 + f_2 f_3^2)^* + f_1(f_2 f_1^2 + f_1 f_3^2)^*)) + g_{40}^{(1)}(12(f_1^2 f_2^2 + f_1 f_2 f_3^2)^*) \quad [55]$$

En resumen, todos los coeficientes  $g_{ij}^{(n)}$  son función de los parámetros de anarmonicidad  $\bar{\lambda}, \bar{\gamma}$  y de los  $f_i(t)$  solución del sistema de ecuaciones del paso denominado iteración cero. Los coeficientes  $g_{ij}^{(2)}$  en cambio, dependen de  $g_{ij}^{(1)}$  y de los  $f_i(t)$  que son solución del sistema de ecuaciones de la primera iteración. A partir de este punto se repite el procedimiento de la iteración [1]. Con estos nuevos coeficientes de iteración se establece el sistema de ecuaciones diferenciales para la segunda iteración:

$$\begin{aligned} \dot{\mu}_2 &= \frac{i}{\hbar} (g_{11}^{(2)} \mu_2 - 2g_{02}^{(2)} \nu_2) \\ \dot{\nu}_2 &= \frac{i}{\hbar} (-g_{11}^{(2)} \nu_2 + 2g_{20}^{(2)} \mu_2) \\ \dot{\epsilon}_2 &= \frac{i}{\hbar} (-g_{10}^{(2)} \mu_2 + 2g_{01}^{(2)} \nu_2) \end{aligned} \quad [56]$$

que fueron resueltas de forma análoga al caso anterior para obtener  $\mu_2, \nu_2$  y  $\varepsilon_2$ . La convergencia debe manifestarse tanto en el cálculo de la probabilidad de transición, como en las dispersiones. Para la probabilidad de transición hasta la segunda iteración, la expresión está dada por:

$$P_{0 \rightarrow 1}^{(2)} = \frac{|\varepsilon^{(2)}|^2}{|\mu^{(2)}|^3} \text{Exp} \left[ \text{Re} \left( \frac{\nu^{(2)*} * \varepsilon^{(2)^2}}{\mu^{(2)}} \right) - |\varepsilon^{(2)}|^2 \right] \quad [57]$$

donde ahora:

$$\begin{aligned} \varepsilon^{(2)} &= \mu_2^* \tilde{\varepsilon} + \nu_2 \tilde{\varepsilon}^* + \varepsilon_2 \\ \nu^{(2)} &= \tilde{\mu} \nu_2 + \tilde{\nu} \mu_2^* \\ \mu^{(2)} &= \tilde{\mu} \mu_2 + \tilde{\nu} \nu_2^* \end{aligned} \quad [58]$$

Para ilustrar mejor la convergencia, es preferible mostrar directamente la diferencia relativa  $100(P_{0 \rightarrow 1}^{(2)} - P_{0 \rightarrow 1}^{(1)}) / P_{0 \rightarrow 1}^{(1)}$ :

Como puede observarse a partir de la Figura 5, el cambio en la probabilidad de transición incluyendo la segunda iteración es considerablemente inferior al 0,06% que se obtuvo hasta la iteración anterior. Es necesario asegurar que se ha logrado la convergencia, realizando la tercera iteración.

### Procedimiento de cálculo: Tercera Iteración

Para este caso tenemos:

$$H_{I_3} = U_{I_2}^{(I)*} H_{I_2}^{(II)} U_{I_2}^{(I)} = H_{I_3}^{(I)} + H_{I_3}^{(II)} \quad [59]$$

donde  $U_{I_2}^{(I)}$  fue hallado en la iteración 2, y la expresión para  $H_{I_3}^{(II)}$  esta dada por la misma ecuación para  $H_{I_1}^{(II)}$  que ahora depende de los coeficientes de la primera iteración:

$$\begin{aligned} g_{03}^{(1)} &= g_{03}^{(1)}(f_1^3 + g_{12}^{(1)} f_1^2 f_2^* + g_{21}^{(1)} f_1 f_2^{*2} + g_{30}^{(1)} f_2^{*3} + \\ &g_{04}^{(1)}(4 f_1^3 f_3) + g_{13}^{(1)}(f_1^2 f_3^* + 3 f_1^2 f_2^* f_3) + \\ &g_{22}^{(1)}(2 f_1^2 f_2^* f_3^* + f_1 f_2^{*2} f_3) + \\ &g_{31}^{(1)}(f_2^* f_3 + 3 f_1 f_2^{*2} f_3^*) + g_{40}^{(1)}(4 f_2^{*3} f_3^*) \end{aligned} \quad [60]$$

$$\begin{aligned} g_{12}^{(2)} &= g_{03}^{(1)}(3 f_1^2 f_2) + g_{12}^{(1)} f_1 (|f_1|^2 + 2 |f_2|^2) + \\ &g_{30}^{(1)}(3 f_2^{*2} f_1) + g_{04}^{(1)}(12 f_1^2 f_2 f_3) + \end{aligned}$$

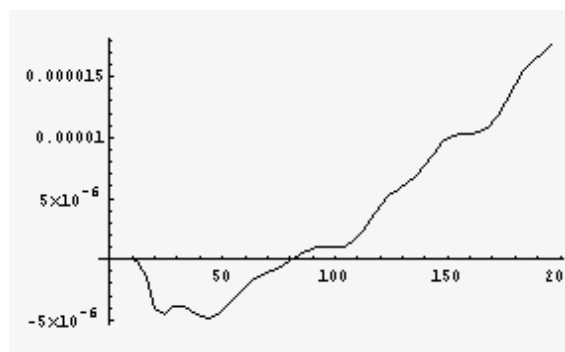


Figura 5. Diferencia relativa  $100(P_{0 \rightarrow 1}^{(2)} - P_{0 \rightarrow 1}^{(1)}) / P_{0 \rightarrow 1}^{(1)}$  entre la probabilidad de transición hasta la interacción 1  $P_{0 \rightarrow 1}^{(1)}$  y la probabilidad de transición hasta la segunda iteración  $P_{0 \rightarrow 1}^{(2)}$  como función del tiempo para un  $X_e=0,00001$  y  $\eta_0=10\lambda$ .

$$\begin{aligned} &g_{13}^{(1)}(3(f_1 f_3 (|f_1|^2 + 2 |f_2|^2) + f_1^2 f_2 f_3^*)) + \\ &g_{22}^{(1)}(2 f_2^* f_3)(2 |f_1|^2 + |f_2|^2) + \\ &g_{31}^{(1)}(3(f_2^* f_3^* (2 |f_1|^2 + |f_2|^2) + f_1^* f_2^{*2} f_3)) + \\ &g_{40}^{(1)}(12 f_2^{*2} f_1^* f_3^*) \end{aligned} \quad [61]$$

$$g_{04}^{(2)} = g_{04}^{(1)} f_1^4 + g_{13}^{(1)} f_2^* f_1^3 + g_{22}^{(1)} f_1^2 f_2^{*2} + g_{31}^{(1)} f_2^{*3} f_1 + g_{40}^{(1)} f_2^{*4} \quad [62]$$

$$\begin{aligned} g_{13}^{(2)} &= g_{04}^{(1)}(4 f_1^3 f_3) + g_{13}^{(1)}(f_1^2 (|f_1|^2 + 3 |f_2|^2)) + \\ &g_{22}^{(1)}(2 f_1 f_2^* (|f_1|^2 + |f_2|^2)) + \\ &g_{31}^{(1)}(f_1^{*2} (|f_1|^2 + 3 |f_2|^2)) + g_{40}^{(1)}(4 f_1^{*3} f_3^*) \end{aligned} \quad [63]$$

$$\begin{aligned} g_{22}^{(2)} &= g_{04}^{(1)}(6 f_1^2 f_2^2) + g_{13}^{(1)}(3 f_1 f_2 (|f_1|^2 + |f_2|^2)) + \\ &g_{22}^{(1)}(|f_1|^4 + |f_2|^4 + 4 |f_1|^2 |f_2|^2) + \\ &g_{31}^{(1)}(3 f_1^* f_2^* (|f_1|^2 + |f_2|^2)) + g_{40}^{(1)}(6 f_1^{*2} f_2^{*2}) \end{aligned} \quad [64]$$

y

$$\begin{aligned} H_{I_2}^{(I)} &= g_{03}^{(2)} a^3 + g_{12}^{(2)} a^+ a^2 + g_{21}^{(2)} a^+ a^2 + g_{30}^{(2)} a^+ a^3 + g_{04}^{(2)} a^+ a^4 \\ &+ g_{13}^{(2)} a^+ a^3 + g_{22}^{(2)} a^+ a^2 + g_{31}^{(2)} a^+ a^3 + g_{40}^{(2)} a^+ a^4 \end{aligned} \quad [65]$$

Al transformar este Hamiltoniano con  $U_{I_2}^{(I)}$ , se tiene nuevamente la expresión:

$$\hat{H}_{I_3}^{(1)} = \sum_{0 \leq i+j \leq 2} g_{ij}^{(3)} a^{+i} a^j \quad [66]$$

donde simplemente se reemplazaron los coeficientes  $g_{i+j>2}^{(1)}$  por los  $g_{i+j>2}^{(1)}$  en las expresiones para los  $g_{i+j \leq 2}^{(2)}$  de la iteración anterior para obtener los  $g_{i+j \leq 2}^{(3)}$ . Las ecuaciones diferenciales en esta tercera iteración se corresponden con:

$$\begin{aligned} \partial_t \mu_3 &= \frac{i}{\hbar} (g_{11}^{(3)} \mu_3 - 2g_{02}^{(2)} \nu_3) \\ \partial_t \nu_3 &= \frac{i}{\hbar} (-g_{11}^{(3)} \nu_3 + 2g_{20}^{(3)} \mu_3) \\ \partial_t \varepsilon_3 &= \frac{i}{\hbar} (-g_{10}^{(2)} \mu_3 + 2g_{01}^{(3)} \nu_3) \end{aligned} \quad [67]$$

La expresión para la probabilidad de transición hasta la tercera iteración [3] es:

$$P_{0 \rightarrow 1}^{(3)} = \frac{|\varepsilon^{(3)}|^2}{|\mu^{(3)}|^3} \text{Exp} \left[ \text{Re} \left( \frac{\nu^{(3)*} \varepsilon^{(3)}}{\mu^{(3)}} \right) - |\varepsilon^{(3)}|^2 \right] \quad [68]$$

donde:

$$\begin{aligned} \varepsilon^{(3)} &= \mu_3^* \varepsilon^{(2)} + \nu_3 \varepsilon^{(2)*} + \varepsilon_3 \\ \nu^{(3)} &= \mu^{(2)} \nu_3 + \nu^{(2)} \mu_3^* \\ \mu^{(3)} &= \mu^{(3)} \mu_3 + \nu^{(2)} \nu_3^* \end{aligned} \quad [69]$$

y para verificar que en efecto las iteraciones han convergido, se puede observar que la diferencia porcentual representada en la Figura 6 es nula.

Al aumentar la escala de  $\{-1,1\}$  a  $\{-10^{-20}, 10^{-20}\}$  en la Figura 6 se obtiene la misma gráfica.

Puede concluirse entonces el proceso iterativo, lográndose la convergencia en la tercera iteración. En un trabajo previo, titulado "Comentario sobre las transformaciones Iterativas de Bogoliubov y los osciladores anarmónicos" los autores Fernández y Castro (13) señalan que en este tipo de sistemas la divergencia suele ocurrir por inestabilidades del algoritmo empleado, y no por características intrínsecas del sistema, por ejemplo, que no exista una transformación que elimine los términos fuera de la diagonal.

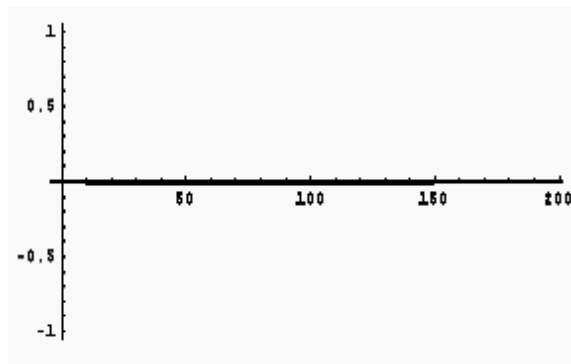


Figura 6. Diferencia relativa  $100(P_{0 \rightarrow 1}^{(2)} - P_{0 \rightarrow 1}^{(3)}) / P_{0 \rightarrow 1}^{(2)}$  entre la probabilidad de transición hasta la iteración (2)  $P_{0 \rightarrow 1}^{(2)}$  y la probabilidad de transición hasta la iteración (3)  $P_{0 \rightarrow 1}^{(3)}$  como función del tiempo para un  $X_c=0,00001$  y  $\eta_0=10\lambda$ .

Una vez culminado el proceso iterativo, puede señalarse que los términos fuera de la diagonal del Hamiltoniano contribuyen poco en la evolución del sistema luego de lo que fue denominado iteración cero. Por consiguiente, puede considerarse suficiente esta primera transformación para una óptima diagonalización del Hamiltoniano que describe al sistema a la anarmonicidad seleccionada:  $X_c = 0,00001$ , que corresponde a  $\bar{\lambda} = -0,00014718$  y a  $\bar{\nu} = 0,0000023037$ . Un estudio más riguroso requiere efectuar el cálculo iterativo a diferentes valores o parámetros de anarmonicidad, pues es de esperar que tanto la convergencia como la magnitud de la contribución del proceso iterativo dependan dramáticamente de este factor.

## Conclusiones

Es evidente que el primer resultado relevante del presente trabajo se encuentra en el haber reproducido numéricamente los resultados obtenidos analíticamente en la iteración cero, es decir, para la primera transformación de Bogoliubov (recordemos que el proceso iterativo comienza a partir de la aplicación de esta primera transformación sobre los términos de orden ma-

por a dos en los operadores de creación y aniquilación del Hamiltoniano original) a la anarmonicidad seleccionada, en presencia y ausencia del campo.

Hasta ahora se tenía conocimiento del efecto que ejerce el operador de evolución descrito como el producto de exponenciales sobre los operadores bosónicos, a través de la expresión  $U_{I_0}^{(l)\dagger} a U_{I_0}^{(l)}$  que depende de las funciones  $\alpha_i(t)$ . En el lenguaje de la óptica cuántica, el operador de evolución puede ser fácilmente relacionado con el producto de un operador de compresión  $U(z)$  y un operador de desplazamiento  $D(\alpha)$ , donde  $\alpha$  y  $z$  son números complejos (14). Por ende, el hecho de que la evolución temporal de los operadores de creación y aniquilación obedezca una transformación de Bogoliubov no debe sorprender. Sin embargo, y aunque efectuar tal identificación no es sencillo, es considerablemente más conveniente llevarla a cabo por varias razones. En primer lugar, el expresar al operador evolución en términos de su característica como operador de desplazamiento y compresión permite reportar por primera vez la resolución analítica del conjunto de ecuaciones diferenciales que gobiernan a las funciones que acompañan a los generadores del álgebra en la expresión del operador evolución. Por consiguiente, se deriva una expresión analítica para este operador.

En segundo lugar, dicha identificación facilita enormemente el cálculo analítico de  $U_{I_0}^{(l)\dagger} a U_{I_0}^{(l)}$  que ahora depende directamente de los coeficientes de transformación  $\mu_0$  y  $\nu_0$ :

$$U_{I_0}^{(l)\dagger} a U_{I_0}^{(l)} = \mu_0 a + \nu_0 a^\dagger + (\mu_0 \varepsilon_0 + \nu_0 \varepsilon_0^*)$$

y como se puede apreciar, es mucho más simple dado que refleja directamente la acción del operador. Con respecto al procedimiento iterativo, cabe resaltar lo siguiente: el Hamiltoniano que resulta de cada iteración siempre es Hermítico, y los coeficientes de transformación siempre guardan la relación que garantiza el carácter unitario del operador evolución, es decir, se cumple para todo tiempo que  $|\mu_{(i)}|^2 - |\nu_{(i)}|^2 = 1$ . Por lo tan-

to, el operador de evolución y el operador de evolución global para cada iteración son unitarios, dado que es el producto de un operador de desplazamiento y un operador de compresión. Al culminar el proceso iterativo, el efecto final sobre los estados de Fock es el desplazamiento y compresión de éstos. Es decir, el Hamiltoniano es capaz de generar los conocidos estados coherentes de dos fotones. Ello se hace evidente al poder resumir todo el proceso iterativo en un solo paso dentro del operador de evolución, el cual refleja una operación global de desplazamiento y compresión:

$$\langle 1 | U_{I_0}^{(l)} U_{I_1}^{(l)} U_{I_2}^{(l)} U_{I_3}^{(l)} \dots U_{I_k}^{(l)} | 0 \rangle = \langle 1 | U(z_0, z_1, \dots, z_k) D(\varepsilon^{(k)}) | 0 \rangle$$

Las iteraciones, que en principio corresponden a operadores de evolución diferentes, tal que cada uno de ellos es capaz por separado de generar estados coherentes de dos fotones, están en realidad muy relacionadas entre sí, puesto que el tratamiento algebraico descrito en esta sección las pudo agrupar en una sola. Esta ventaja se ve reflejada en los cálculos involucrados dentro de las posteriores iteraciones, que son básicamente las probabilidades de transición. La probabilidad de transición depende de los nuevos coeficientes de transformación de Bogoliubov que resultan de efectuar el cálculo  $(U_{I_0}^{(l)} U_{I_1}^{(l)} U_{I_2}^{(l)} \dots U_{I_k}^{(l)})^\dagger a U_{I_0}^{(l)} U_{I_1}^{(l)} U_{I_2}^{(l)} \dots U_{I_k}^{(l)}$ . También depende del nuevo parámetro de desplazamiento, con lo cual se puede ver que la expresión para la probabilidad de transición considerando hasta la  $i$ -ésima iteración es completamente equivalente a la expresión para la probabilidad de transición hasta la iteración anterior. Basta con reemplazar los parámetros anteriores por los nuevos parámetros de compresión, desplazamiento y fase.

Por otra parte, se corroboró que la operación seguida de dos operadores de compresión  $U_{(z_0)} U_{(z_1)}$  es equivalente a una compresión global, la cual genera una transformación de Bogoliubov, tal que los nuevos coeficientes de transformación son:

$U^*(\tilde{z})aU(\tilde{z}) = (\mu_0\mu_1 + \nu_0\nu_1^*)$   
 $a + (\mu_0\nu_1 + \nu_0\mu_1^*)a^\dagger = \tilde{\mu}a + \tilde{\nu}a^\dagger$  donde se verifica fácilmente que  $|\tilde{\mu}|^2 - |\tilde{\nu}|^2 = 1$ . A la anarmonicidad seleccionada dada por los parámetros  $X_e = 0,00001$ , que corresponde a  $\bar{\lambda} = -0,00014718$  y a  $\bar{\gamma} = 0,0000023037$ , se logra una convergencia que diagonaliza por completo al Hamiltoniano en la tercera iteración. De ser así, resulta suficiente la primera transformación de Bogoliubov sobre los operadores bosónicos efectuada en la iteración cero para una óptima diagonalización del Hamiltoniano. Es recomendable estudiar el comportamiento del sistema para varios valores de anarmonicidad y campo eléctrico pues es de esperar que tanto la convergencia como la magnitud de la contribución del procedimiento iterativo dependan de éstos. La metodología iterativa empleada representa una mejor alternativa con respecto a las técnicas perturbativas convencionales pues presenta la ventaja que permite extraer la información provista por la parte anarmónica del sistema, e incorporarla de forma no perturbativa dentro de la parte resoluble del problema. Ello además permite obtener un operador de evolución unitario, lo que no está garantizado por la teoría de perturbaciones convencional.

### Agradecimientos

El presente trabajo fue soportado parcialmente por el Fondo Nacional de Ciencia, tecnología e Innovación (FONACIT) (proyecto G-97000593) y por el Decanato de Investigaciones de la Universidad Simón Bolívar (proyecto GID-13).

### Referencias Bibliográficas

1. MUNDARAIN D., PAZ J.L., RÉCAMIER J., SALAZAR M.C., HERNÁNDEZ A.J. *Phys Lett A* 273: 42-52, 2000.
2. YUEN H.P. *Phys Rev A* 13: 2226-2243, 1976.
3. RÉCAMIER J., JÁUREGUI R. *Int J of Quant Chem* 62: 125-135, 1997.
4. COOPER I.L. *Chem Phys* 112: 67-75, 1987.
5. FERNÁNDEZ F.M., CASTRO E.A. *Phys Rev A* 27: 663-669, 1983.
6. FERNÁNDEZ F.M., CASTRO E.A. *Phys Lett A* 88: 4-6, 1982.
7. RÉCAMIER J., BERRONDO M. *Molec Phys* 73: 831-844, 1991.
8. RÉCAMIER J., BERRONDO M. *Chem Phys Lett* 158: 116-121, 1989.
9. BERRONDO M., PALMA A., *J Phys A Math Gen* 13: 773-780, 1980.
10. ALHASSID Y., LEVINE R.D., *Phys Rev A* 18: 89-116, 1978.
11. GILMORE R., YUAN J. *J Chem Phys* 86: 130-189, 1987.
12. FERNÁNDEZ F.M. *Phys Rev A* 40: 41-44, 1989.
13. FERNÁNDEZ F.M., CASTRO E.A. *Phys Rev A* 48: 3398-3399, 1993.
14. RÉCAMIER J., JAUREGUI R. *Chem Phys Lett* 230: 25-34, 1994.