



Interferencias de Landau-Zener en Sistemas Cuánticos de Dos Niveles

TRABAJO DE FIN DE GRADO

Manuel Antonio García Blázquez

Tutelado por
Jesús Casado Pascual

Universidad de Sevilla

Facultad de Física
Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear

Índice general

Resumen	II
Abstract	IV
1. Transiciones de Landau - Zener	1
1.1. Contexto General	1
1.2. El Teorema Adiabático	3
1.3. Transiciones en Sistemas de Dos Niveles	9
2. Modelo de Impulso Adiabático	10
2.1. Bases Diabática y Adiabática	10
2.2. Probabilidad de Transición en un Cruce	13
2.3. Aplicación del Modelo de Impulso Adiabático	15
2.3.1. Evolución Adiabática	15
2.3.2. Transición No Adiabática	18
2.3.3. Probabilidad de Transición en un Número Arbitrario de Cruces	24
2.3.4. Límite de Cruce Lento	30
3. Altas Frecuencias	37
3.1. Planteamiento	37
3.2. Aproximación de Onda Rotatoria	37
3.3. Ecuaciones Ópticas de Bloch	42
4. Resolución Numérica	50
4.1. Método de Floquet	50
4.2. Evolución Temporal de la Probabilidad de Transición	53
4.3. Promediado de la Probabilidad de Transición	58
Conclusiones	61
A. Propiedades de las Matrices de Pauli	62
Referencias	64

Resumen

Los sistemas con únicamente dos niveles energéticos son de gran interés en física experimental y teórica. Por un lado, proporcionan la posibilidad de observar multitud de fenómenos cuánticos en su versión más simple, y por otro; permiten emplear el entorno matemático más accesible de la mecánica cuántica debido a su reducida dimensionalidad. Un ejemplo recurrente de dichos sistemas lo constituyen un átomo o molécula de momento angular orbital nulo y número cuántico de espín $1/2$ en el seno de un campo magnético. Además, para una configuración con más de dos niveles, en ciertas circunstancias como por ejemplo bajas temperaturas resulta razonable la restricción a los estados fundamental y primer excitado; con lo que la teoría sobre sistemas de dos niveles tiene un amplio rango de aplicabilidad.

El objetivo del presente documento es estudiar el comportamiento de la probabilidad de transición entre los dos niveles de un sistema descrito por un hamiltoniano periódico en el tiempo. En general, este problema no puede resolverse analíticamente de forma exacta, sin embargo; existen distintos métodos que permiten obtener soluciones aproximadas bajo ciertas hipótesis, así como otros que facilitan una resolución numérica. A lo largo de los siguientes capítulos se van a presentar algunos de ellos, tratando de mantener cierto rigor matemático.

En el capítulo 1 se detallan las características comunes a la totalidad de los tratamientos. Además, se enuncia y demuestra el teorema adiabático para el caso concreto del sistema de estudio. Este resultado proporciona un punto límite de partida en el que no se producirían transiciones de nivel, lo cual permitirá poner de relieve la importancia de los distintos parámetros del sistema, además de ser de utilidad matemática.

En el capítulo 2 se desarrolla el modelo de impulso adiabático, el cual tiene como pilar fundamental al teorema adiabático. Este método es en muchos sentidos el más general, pues permite tratar todo el rango de frecuencias. No obstante, también es el más laborioso de desarrollar y aplicar, siendo sus resultados normalmente más imprecisos que los de otros modelos más específicos para la región de parámetros considerada. Sin embargo, su metodología sistemática basada en un estudio detallado de las características energéticas del sistema lo convierten en un siguiente paso natural desde el teorema adiabático. Este capítulo está basado en gran medida en el artículo [Shevchenko10].

En el capítulo 3 se utiliza la aproximación de onda rotatoria ó RWA para obtener una solución aproximada de la probabilidad a frecuencias elevadas. Posteriormente, se extiende este resultado para incluir fenomenológicamente los efectos de decoherencia y relajación por medio de las ecuaciones de Bloch. Esta última parte presenta un nivel de detalle inferior al del resto del documento, pues un desarrollo más pormenorizado exce-

dería el propósito de éste.

Finalmente, en el capítulo 4 se presenta el método de Floquet, que permite aprovechar la periodicidad del hamiltoniano para formular un algoritmo de resolución numérico de la ecuación de Schrödinger en intervalos arbitrarios, en general menos costoso que su resolución directa. Seguidamente, se presentan comparaciones entre estos resultados numéricos y las correspondientes predicciones de los modelos de impulso adiabático y RWA, a fin de juzgar la bondad de éstas.

Al final del documento se recopilan en un apéndice ciertas propiedades de las matrices y el vector de Pauli, a las que se hará referencia en algún momento durante el texto.

Abstract

Two-level systems are of major interest in both experimental and theoretical physics, for they allow the simplest version of a wide range of quantum phenomena to be observed, in addition to the utilization of the most accessible mathematical tools among quantum mechanics due to its minimal (non-trivial) dimensionality. A frequent example of such systems are atoms or molecules with zero orbital angular momentum and $1/2$ spin quantum number in a magnetic field. Furthermore, under certain conditions such as low temperatures, it is reasonable to consider just the ground and the first excited states within a many-level system. The range of applicability of the two-level system theory is therefore wider than it may seem.

In the present document we aim to study the transition probability between the two energy levels of a system described by a time periodic hamiltonian. This problem cannot generally be solved in an exact analytic form, nevertheless there exist several models which provide approximate solutions under some extra assumptions, besides others that may ease a numerical resolution. Over the course of the next chapters, some of these models will be developed, while trying to maintain an acceptable degree of mathematical rigor.

In chapter 1 we present the general background for the chapters to come. The adiabatic theorem is formulated and proved for our particular case of interest. This result provides an environment in which energy transitions can be regarded as limits of its applicability, and it will be of mathematical interest.

Chapter 2 is dedicated to the adiabatic impulse model, which crucially relies on the adiabatic theorem. This method is in many senses the most general one, for it allows any value of frequency to be treated. However, its development and application can at times be somewhat cumbersome, and its results are often less precise than those obtained with more specific models for a particular region of parameters. Still, its systematic procedure taking into account the energetic properties of the system makes the adiabatic impulse model a natural next step from the adiabatic theorem. This chapter is mainly based on the article [Shevchenko10].

In chapter 3 the rotating wave approximation (RWA) is employed in order to obtain an approximate solution for the transition probability at high frequencies. Afterwards, we extend this result to include phenomenological dephasing and relaxation times via Bloch equations, although the detail level in this extension is lower than in other sections of this document.

Finally, in chapter 4 we show how to take advantage of the hamiltonian's periodicity

to formulate an algorithm, based on the Floquet theory for differential equations, to numerically solve the Schrödinger equation over arbitrary intervals with improved efficiency. Afterwards, a comparison between this numerical results and those given by the adiabatic impulse model and RWA is presented in order to show the validity of said models.

At the end of the document, several useful properties of Pauli matrices and vector are gathered.

Capítulo 1

Transiciones de Landau - Zener

1.1. Contexto General

Consideremos un sistema cuántico no relativista con exactamente dos niveles energéticos, no degenerados. Los estados físicos accesibles para dicho sistema pueden entonces representarse por funciones de onda pertenecientes a un espacio de Hilbert complejo de dimensión 2, que tomaremos, sin pérdida de generalidad por isomorfismo entre espacios vectoriales de dimensión finita, como \mathbb{C}^2 con su producto escalar usual; en notación de Dirac:

$$\langle \varphi^a | \varphi^b \rangle = \varphi_1^{a*} \varphi_1^b + \varphi_2^{a*} \varphi_2^b.$$

Este producto escalar induce la norma vectorial euclídea:

$$\|\varphi\| = \sqrt{\langle \varphi | \varphi \rangle} = \sqrt{|\varphi_1|^2 + |\varphi_2|^2},$$

que a su vez induce la norma matricial espectral:

$$\|U\| = \sqrt{\text{máx} \left\{ \lambda \in \mathbb{C} \mid \det(U^\dagger U - \lambda I) = 0 \right\}},$$

bien definida ya que $U^\dagger U$ es hermítica y semidefinida positiva, con lo que sus autovalores son reales y no negativos.

El operador hamiltoniano (y análogamente los demás operadores que actúan sobre los estados del sistema) está representado, fijada una base $\{\varphi_a, \varphi_b\}$ del espacio, por una matriz cuadrada de dimensión 2:

$$\hat{\mathcal{H}} \longrightarrow \begin{pmatrix} \langle \varphi_a | \hat{\mathcal{H}} | \varphi_a \rangle & \langle \varphi_a | \hat{\mathcal{H}} | \varphi_b \rangle \\ \langle \varphi_b | \hat{\mathcal{H}} | \varphi_a \rangle & \langle \varphi_b | \hat{\mathcal{H}} | \varphi_b \rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{1,1} & \mathcal{H}_{1,2} \\ \mathcal{H}_{2,1} & \mathcal{H}_{2,2} \end{pmatrix},$$

y recíprocamente, a cada matriz de dichas dimensiones le corresponde un operador, fijada una base. Salvo que se especifique lo contrario, cuando expresemos un operador en forma matricial lo haremos respecto a la base ortonormal $\{(1, 0)^t, (0, 1)^t\}$, a la cual daremos el nombre de base diabática en el capítulo 2.

Las matrices de Pauli forman una base de las matrices 2×2 , con lo que el hamiltoniano puede expresarse como combinación de ellas. Para recalcar que estamos tratando con un sistema más general que el de una partícula de espín $1/2$, se utilizará la notación $\hat{\tau}_i \equiv \hat{\sigma}_i, \forall i = x, y, z$, consistente con el Apéndice A. La ecuación de Liouville-von Neumann para el operador o matriz densidad (ec. 2.52-[Blum]):

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}]$$

indica que la componente del hamiltoniano en la matriz identidad, dado que ésta conmuta con ρ , no afecta a la evolución temporal del operador densidad, con lo que por simplicidad no consideraremos dicha componente. Por otra parte, supondremos que éste es un operador bidimensional que puede expresarse en función de únicamente dos matrices de Pauli. Concretamente, postulamos el siguiente hamiltoniano dependiente del tiempo:

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = -\frac{\Delta\hbar}{2}\hat{\tau}_x - \frac{\varepsilon(t)\hbar}{2}\hat{\tau}_z. \quad (1.1)$$

Acerca de este operador:

- La elección de las matrices $\hat{\tau}_x$ y $\hat{\tau}_z$ no supone ninguna restricción, dado que mediante transformaciones unitarias (las cuales no alteran valores esperados ni probabilidades) es posible obtener un hamiltoniano como combinación de dos matrices de Pauli cualesquiera; lo cual puede observarse intuitivamente considerando la siguiente analogía geométrica: $\hat{\mathcal{H}}$ yace en el plano determinado por las dos componentes del vector de Pauli (A.10) que lo conforman. Mediante una rotación de $\pi/2$ en torno a la dirección correspondiente a la matriz de Pauli que se quiera mantener, se lleva al hamiltoniano al plano caracterizado por las dos matrices deseadas. Esta rotación sería equivalente a una transformación unitaria.
- $\Delta \in \mathbb{R}^+$ se denominará **amplitud de tunelaje**, y $\varepsilon : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$; **estímulo**. Ambos tienen dimensiones de frecuencia. El primero de ellos se introduce como parámetro de ajuste propio del sistema relacionado con la separación entre sus niveles energéticos, y se supondrá constante; mientras que el segundo se toma como una función periódica, generalmente:

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + A \text{sen}(\omega t) \quad (1.2)$$

o bien:

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + A \text{cos}(\omega t), \quad (1.3)$$

donde $\varepsilon_0 \in \mathbb{R}$ es el denominado **offset**, $A \in \mathbb{R}^+$ la amplitud; y $\omega \in \mathbb{R}^+$ la frecuencia (angular). Las expresiones (1.2) y (1.3) se diferencian únicamente en una traslación de ωt en un factor de $\pi/2$, con lo que el problema es esencialmente el mismo para ambos estímulos. Sin embargo, la elección de uno u otro puede reportar una ligera ventaja para el tratamiento matemático; con lo que se elegirá en cada caso la función conveniente, siendo los resultados obtenidos trasladables a la otra situación, simplemente trasladando la escala temporal. Señalar asimismo que Δ y $\varepsilon(t)$ no están intrínsecamente ligados a las matrices de Pauli que (1.1) les asocia: mediante la transformación $\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\tau}_x + \hat{\tau}_z)$, que con (A.3) y (A.4) se comprueba que es unitaria, se tiene:

$$\hat{\mathcal{H}}'(t) = \hat{U}\hat{\mathcal{H}}(t)\hat{U}^\dagger + i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \hat{U}^\dagger = \hat{U}\hat{\mathcal{H}}(t)\hat{U} = -\frac{\varepsilon(t)\hbar}{2}\hat{\tau}_x - \frac{\Delta\hbar}{2}\hat{\tau}_z,$$

efectivamente intercambiando el papel de ambos parámetros en (1.1). Podría además considerarse el caso de otra combinación de signos en el hamiltoniano; pero por fijar ideas se considerarán ambos negativos, y los signos de los parámetros como se han indicado.

Los modelos de los próximos capítulos partirán del hamiltoniano (1.1), y por tanto los resultados obtenidos serán aplicables a sistemas cuánticos descritos por este operador o por equivalentes unitarios suyos, y a los que sea aplicable la ecuación de Schrödinger (sistemas no relativistas).

En la práctica, el estímulo $\varepsilon(t)$ suele provenir de un campo electromagnético aplicado sobre la configuración física, con lo que ε_0 , A y ω pueden verse como parámetros controlables. Esto además permite fijar el tiempo en que $\varepsilon(t)$ empieza a actuar, lo cual es importante de cara a la determinación de las condiciones iniciales del sistema.

1.2. El Teorema Adiabático

Consideremos un sistema cuántico arbitrario descrito por un hamiltoniano hermítico dependiente del tiempo. Supongamos que durante un intervalo temporal J existe un autovalor $\lambda(t)$ de dicho operador que mantiene un carácter discreto (es decir, no forma parte de una franja continua del espectro ni interseca con otros autovalores en dicho intervalo) y que la variación en el hamiltoniano es infinitamente lenta (o adiabática). Bajo estas hipótesis, se formula el **teorema adiabático** como sigue:

Si el estado del sistema al principio del intervalo corresponde a una autofunción $|\Psi, t_0\rangle$ del hamiltoniano asociada a $\lambda(t_0)$, entonces el sistema evoluciona al estado $|\Phi, t\rangle = e^{i\alpha(t)} |\Psi, t\rangle$, para cierto $\alpha : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ y $\forall t \in J$.

Es decir, el sistema sigue la evolución natural del estado en que se encontraba adquiriendo únicamente un factor de fase, con lo que se mantiene en todo instante en un autoestado del hamiltoniano. Como corolario se tiene que si el espectro del hamiltoniano es puramente discreto y no se produce ninguna degeneración (tampoco instantánea) durante el intervalo de evolución; entonces el sistema permanece en todo momento en un nivel energético cuya ordenación respecto al estado fundamental es la misma que la del nivel de partida.

A continuación vamos a dar una prueba del teorema adiabático para el caso particular con el que vamos a trabajar en los siguientes capítulos: un hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}(t)$ de dimensión 2, con autovalores no degenerados: $\lambda_1(t) \neq \lambda_2(t)$, $\forall t \in J$. Una prueba más general puede encontrarse en [Kato]. Por simplificar la notación, vamos a omitir los símbolos de operador $\hat{\cdot}$.

Demostración:

Sea $\tau \in \mathbb{R}^+$ el parámetro con dimensiones de tiempo que determina la velocidad de cambio en $\mathcal{H}(t)$, de manera que por hipótesis, eventualmente debe tomarse el límite $\tau \rightarrow \infty$.

Por ejemplo, para un hamiltoniano periódico, $\tau \propto T = 2\pi/\omega$. Definimos la variable adimensional $s = t/\tau$, fijamos el punto de partida de la evolución del sistema en $t = s = 0$ y expresamos la ecuación de Schrödinger en función de esta nueva variable:

$$\partial_s |\Psi(s)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \tau \mathcal{H}(s) |\Psi(s)\rangle . \quad (1.4)$$

Es importante imponer la hipótesis adicional de que $\mathcal{H}(s)$ no dependa además de τ , o equivalentemente que la dependencia temporal del hamiltoniano sea exclusivamente a través de t/τ .

De esta forma, sean $\lambda_1(s)$, $\lambda_2(s)$, $|\Psi_1(s)\rangle$, $|\Psi_2(s)\rangle$ los autovalores de $\mathcal{H}(s)$ y sus correspondientes autofunciones normalizadas (que constituyen una base ortonormal), respectivamente. Los autovalores no dependen de τ por no hacerlo el hamiltoniano en la nueva variable, mientras que las autofunciones pueden depender de este parámetro a lo sumo a través de una fase (pues están indeterminadas salvo un factor arbitrario de módulo 1). Supondremos que todos ellos son funciones \mathcal{C}^2 (continuas y doblemente diferenciables) respecto de s . Definimos los proyectores asociados a cada autovalor como:

$$P_j(s) = |\Psi_j(s)\rangle \langle \Psi_j(s)| , \quad \forall j = 1, 2 , \quad (1.5)$$

los cuales no son función de τ ya que la dependencia en forma de fase en las autofunciones se cancela. Además, satisfacen las siguientes propiedades:

- $P_j^2(s) = |\Psi_j(s)\rangle \langle \Psi_j(s)| \Psi_j(s)\rangle \langle \Psi_j(s)| = |\Psi_j(s)\rangle \langle \Psi_j(s)| = P_j(s) , \quad \forall j = 1, 2 .$
- $P_2(s)P_1(s) = P_1(s)P_2(s) = |\Psi_1(s)\rangle \langle \Psi_1(s)| \Psi_2(s)\rangle \langle \Psi_2(s)| = 0 .$
- $P_j(s) |\Psi_j(s)\rangle = |\Psi_j(s)\rangle , \quad \forall j = 1, 2 . \quad P_i(s) |\Psi_j(s)\rangle = 0 , \quad i \neq j .$
- $P_j^\dagger(s) = P_j(s) , \quad \forall j = 1, 2 .$
- $P_1(s) + P_2(s) = I .$ (relación de cierre)
- $[\mathcal{H}(s) - \lambda_j(s)]P_j(s) = 0 , \quad \forall j = 1, 2 .$

De las anteriores relaciones se sigue directamente que los operadores:

$$S_1 = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} P_2 , \quad S_2 = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} P_1 , \quad (1.6)$$

bien definidos por no existir degeneración $\forall s$, satisfacen la relación:

$$[\mathcal{H}(s) - \lambda_j(s)]S_j(s) = I - P_j , \quad \forall j = 1, 2 . \quad (1.7)$$

Fijemos el $j = 1, 2$ concreto correspondiente al autovalor asociado a la autofunción de la que el sistema por hipótesis parte, suprimiendo este subíndice de aquí en adelante por simplificar la notación, pero sabiendo que estamos tratando con un autovalor específico y su

proyector asociado. Consideremos a continuación el siguiente sistema diferencial ordinario:

$$\partial_s X(s) = iA(s)X(s) \equiv [\partial_s P(s), P(s)]X(s) \quad (1.8)$$

y $U(s)$ su (única) solución con valor inicial $U(0) = I$. Notemos que es independiente de τ , que no aparece en (1.8) ni la condición inicial. Utilizando la hermiticidad de los proyectores, se tiene la de A :

$$A^\dagger = i(P^\dagger \partial_s P^\dagger - \partial_s P^\dagger P^\dagger) = i(P \partial_s P - \partial_s P P) = A ,$$

donde notamos que el operador ∂_s actuará de forma exclusiva sobre el primer elemento inmediatamente a su derecha, pudiendo englobarse más con el uso de paréntesis. De esta forma, $U(s)$ y $U^\dagger(s)$ satisfacen (1.8):

$$\partial_s U(s) = iA(s)U(s) , \quad \partial_s U^\dagger(s) = -iU^\dagger(s)A(s) . \quad (1.9)$$

Con lo que:

$$\begin{cases} \partial_s(U^\dagger U) = -iU^\dagger A U + U^\dagger iA U = 0 \Rightarrow U^\dagger(s)U(s) = U^\dagger(0)U(0) = I \\ \partial_s(UU^\dagger) = iA U U^\dagger - U iU^\dagger A = i[A, UU^\dagger] , \end{cases}$$

cuya segunda ecuación tiene como solución particular, para la condición inicial $U(0)U^\dagger(0) = I$, la solución constante $U(s)U^\dagger(s) = I \forall s$, que es entonces la única que puede satisfacer dicha condición. Por tanto se tiene que $U^\dagger(s)U(s) = U(s)U^\dagger(s) = I$, i.e., $U(s)$ es unitario. Notar que en efecto su inversa existe, lo cual se ve simplemente tomando determinantes a ambos lados de la última igualdad, pues estamos en dimensión finita.

Consideremos ahora el operador de proyección (1.5). De su primera propiedad:

$$\partial_s P^2 = \partial_s P \Leftrightarrow \partial_s P P + P \partial_s P = \partial_s P . \quad (1.10)$$

Multiplicando (1.10) por P a izquierda y derecha, y simplificando:

$$2P \partial_s P P = P \partial_s P P \Rightarrow P \partial_s P P = 0 . \quad (1.11)$$

De (1.8) y (1.11) se tiene:

$$iPA = -P \partial_s P , \quad iAP = \partial_s P P . \quad (1.12)$$

Combinando (1.10) con (1.12) se obtiene la ecuación:

$$\partial_s P = iAP - iPA = i[A, P] . \quad (1.13)$$

Definimos a continuación:

$$W(s) = P(s)U(s) , \quad (1.14)$$

que verifica:

$$\partial_s W = \partial_s (PU) \stackrel{(1.9)}{=} [\partial_s P + iPA]U \stackrel{(1.13)}{=} iAPU = iAW, \quad (1.15)$$

con lo que $W(s)$ es solución de (1.8). Para una condición inicial arbitraria $W(0) = P(0)$, se comprueba que directamente que $W(s) = U(s)W(0)$ es la única solución de dicho problema diferencial, con lo que debe darse la igualdad:

$$W(s) = P(s)U(s) = U(s)P(0) \Leftrightarrow \quad (1.16)$$

$$P(s) = U(s)P(0)U^\dagger(s). \quad (1.17)$$

Esto es, la solución de la ecuación diferencial (1.8) para la condición inicial $X(0) = I$, a la que hemos denominado $U(s)$, constituye una transformación (unitaria, como se ha probado) que relaciona las evaluaciones del proyector en el instante inicial y en uno final arbitrario. Denominamos a $U(s)$ operador de transformación adiabática. Vamos a relacionar este operador con $W(s)$:

$$W(s) \stackrel{(1.14)}{=} P(s)W(s) \stackrel{(1.16)}{=} W(s)P(0). \quad (1.18)$$

Por tanto, aunando (1.16) y (1.18) se tiene que $W(s)P(0) = U(s)P(0)$, con lo que la imagen de $W(s)$ sobre el autoestado $|\Psi(0)\rangle$ coincide con la del operador de transformación adiabática salvo una fase, y es por esto que también se denomina a $W(s)$ de esta forma (representan esencialmente lo mismo). Vamos a ver a continuación que este operador efectivamente constituye la evolución adiabática del sistema, y que ésta coincide con la evolución dinámica real en el límite $\tau \rightarrow \infty$. Para ello, la siguiente relación será de utilidad:

$$P(s)\partial_s W(s) \stackrel{(1.15)}{=} PiAW = PiAPW \stackrel{(1.12)}{=} P\partial_s PPW \stackrel{(1.11)}{=} 0. \quad (1.19)$$

Sea $V_\tau(s)$ el operador de evolución del sistema, i.e., tal que aplicado sobre el estado inicial de éste (sea cual sea) resulta en el estado al que evoluciona el sistema en s de acuerdo a la ecuación de Schrödinger:

$$|\psi(s)\rangle = V_\tau(s) |\psi(0)\rangle \Rightarrow \quad (1.20)$$

$$i\hbar\partial_s V_\tau(s) |\psi(0)\rangle = i\hbar\partial_s |\psi(s)\rangle \stackrel{(1.4)}{=} \tau\mathcal{H}(s) |\psi(s)\rangle = \tau\mathcal{H}(s)V_\tau(s) |\psi(0)\rangle.$$

Luego dicho operador está caracterizado por ser la única solución del sistema diferencial:

$$\begin{cases} \partial_s V_\tau(s) = -\frac{i}{\hbar}\tau\mathcal{H}(s)V_\tau(s) \\ V_\tau(0) = I \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \partial_s V_\tau^\dagger(s) = \frac{i}{\hbar}\tau V_\tau^\dagger(s)\mathcal{H}(s) \\ V_\tau^\dagger(0) = I \end{cases} \quad (1.21)$$

y se demuestra, de manera análoga a como se hizo previamente con $U(s)$, que es unitario ($V_\tau^{-1}(s) = V_\tau^\dagger(s)$). En general, el operador de evolución sí depende de τ , ya que así lo

hacen las autofunciones; de ahí el subíndice empleado. A partir de este operador, se define:

$$\bar{V}_\tau(s) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\tau \int_0^s \lambda(s') ds'\right) V_\tau(s), \quad (1.22)$$

que también es unitario ($\bar{V}_\tau^{-1}(s) = \bar{V}_\tau^\dagger(s)$). Tomando derivadas respecto a s :

$$\partial_s \bar{V}_\tau^\dagger(s) \stackrel{(1.21)}{=} \frac{i}{\hbar}\tau V_\tau^\dagger(s) \mathcal{H}(s) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\tau \int_0^s \lambda(s') ds'\right) \quad (1.23)$$

$$-V_\tau^\dagger(s) \frac{i}{\hbar}\tau \lambda(s) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\tau \int_0^s \lambda(s') ds'\right) = \frac{i}{\hbar}\tau \bar{V}_\tau^\dagger(s) [\mathcal{H}(s) - \lambda(s)].$$

Introduciendo ahora el operador de transformación adiabática:

$$\partial_s (\bar{V}_\tau^\dagger(s) W(s)) \stackrel{(1.23)}{=} \frac{i}{\hbar}\tau \bar{V}_\tau^\dagger(s) [\mathcal{H}(s) - \lambda(s)] W(s) + \bar{V}_\tau^\dagger(s) \partial_s W(s), \quad (1.24)$$

donde el primer sumando a la derecha de la igualdad es nulo debido a la primera igualdad de (1.18) y la última propiedad antes listada de $P(s)$. Integrando entonces (1.24) entre 0 y s , y recordando las condiciones iniciales $W(0) = P(0)$, $\bar{V}_\tau^\dagger(0) = I$, se obtiene:

$$\bar{V}_\tau^\dagger(s) W(s) - P(0) = \int_0^s \bar{V}_\tau^\dagger(s') \partial_{s'} W(s') ds'. \quad (1.25)$$

Por otra parte, empleando expresiones anteriores que aún no se habían utilizado:

$$\begin{aligned} \partial_s W(s) &\stackrel{(1.19)}{=} [I - P(s)] \partial_s W(s) \stackrel{(1.7)}{=} [\mathcal{H}(s) - \lambda(s)] S(s) \partial_s W(s) \Rightarrow \\ &\bar{V}_\tau^\dagger(s) \partial_s W(s) \stackrel{(1.23)}{=} -\frac{i\hbar}{\tau} \partial_s \bar{V}_\tau^\dagger(s) S(s) \partial_s W(s). \end{aligned} \quad (1.26)$$

Introduciendo (1.26) en (1.25) e integrando por partes:

$$\bar{V}_\tau^\dagger(s) W(s) - P(0) = -\frac{i\hbar}{\tau} \left(\left[\bar{V}_\tau^\dagger(s') S(s') \partial_s W(s') \right]_0^s - \int_0^s \bar{V}_\tau^\dagger(s') \partial_{s'} (S(s') \partial_{s'} W(s')) ds' \right). \quad (1.27)$$

Aplicando la norma matricial espectral a ambos lados de (1.27), y aplicando su carácter de sub-aditiva y sub-multiplicativa (propiedades que pueden consultarse en cualquier texto básico de análisis funcional, por ejemplo en [Rynne]):

$$\begin{aligned} \left\| \bar{V}_\tau^\dagger(s) W(s) - P(0) \right\| &= \left| \frac{\hbar}{\tau} \right| \left\| \left[\bar{V}_\tau^\dagger(s') S(s') \partial_s W(s') \right]_0^s - \int_0^s \bar{V}_\tau^\dagger(s') \partial_{s'} (S(s') \partial_{s'} W(s')) ds' \right\| \\ &\leq \frac{\hbar}{\tau} \left(\left\| \bar{V}_\tau^\dagger(s) \right\| \left\| S(s) \right\| \left\| \partial_s W(s) \right\| + \left\| \bar{V}_\tau^\dagger(0) \right\| \left\| S(0) \right\| \left\| \partial_s W(0) \right\| + \int_0^s \left\| \bar{V}_\tau^\dagger(s') \right\| \right. \\ &\left. \left\| \partial_{s'} (S(s') \partial_{s'} W(s')) \right\| ds' \right) \rightarrow 0, \text{ cuando } \tau \rightarrow \infty \Leftrightarrow \bar{V}_\tau^\dagger(s) W(s) - P(0) \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

Obsérvese que el límite anterior se debe a la presencia del término multiplicativo τ^{-1} ; la

única otra dependencia en τ en el lado derecho de la desigualdad estaría restringida a los términos $\left\| \overline{V}_\tau^\dagger(s) \right\|$, pero esta norma espectral vale 1, $\forall s$ por ser $\overline{V}_\tau^\dagger(s)$ unitario. Dicho comportamiento asintótico se denota como:

$$\overline{V}_\tau^\dagger(s)W(s) - P(0) = \mathcal{O}(\tau^{-1}). \quad (1.28)$$

Multiplicando a la izquierda por $-V_\tau(s) = -\overline{V}_\tau(s) \exp(-\frac{i}{\hbar}\tau \int_0^s \lambda(s')ds')$, y utilizando el mismo razonamiento con las normas, se deduce con la segunda igualdad de (1.18) que:

$$\left[V_\tau(s) - \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\tau \int_0^s \lambda(s')ds'\right)W(s) \right] P(0) = \mathcal{O}(\tau^{-1}). \quad (1.29)$$

Este resultado indica que la transformación dinámica que experimenta el sistema, dada por el operador de evolución $V_\tau(s)$, tiende salvo un factor de fase a la transformación adiabática en el límite $\tau \rightarrow \infty$. El estado inicial del sistema es, por hipótesis, $|\Psi(0)\rangle$; que aplicado en (1.29) resulta (al no depender de τ salvo posiblemente como una fase):

$$V_\tau(s) |\Psi(0)\rangle - \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\tau \int_0^s \lambda(s')ds'\right)U(s) |\Psi(0)\rangle = \mathcal{O}(\tau^{-1}), \quad (1.30)$$

donde se ha usado que $P(0) |\Psi(0)\rangle = |\Psi(0)\rangle$ y $W(s)P(0) = U(s)P(0)$. Por otra parte, se tiene que el operador de transformación adiabática conecta la autofunción del hamiltoniano asociada al autovalor considerado entre los instantes inicial y final:

$$\begin{aligned} P(s)U(s) |\Psi(0)\rangle &= P(s)U(s)P(0) |\Psi(0)\rangle \stackrel{(1.16)}{=} P(s)W(s) |\Psi(0)\rangle \stackrel{(1.18)}{=} W(s) |\Psi(0)\rangle = \\ &U(s) |\Psi(0)\rangle \Rightarrow \mathcal{H}(s)U(s) |\Psi(0)\rangle = \lambda(s)U(s) |\Psi(0)\rangle. \end{aligned}$$

Por ello, se tiene $U(s) |\Psi(0)\rangle \propto |\Psi(s)\rangle$ (coinciden salvo fase), que es la autofunción de $\mathcal{H}(s)$ asociada a $\lambda(s)$ (de aquí el nombre otorgado a $U(s)$). Uniendo esto con (1.30) se tiene que el estado del sistema en s , que viene dado por definición por $V_\tau(s) |\Psi(0)\rangle$, verifica en el límite $\tau \rightarrow \infty$ la siguiente identidad:

$$V_\tau(s) |\Psi(0)\rangle = \exp(i\alpha_B) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\tau \int_0^s \lambda(s')ds'\right) |\Psi(s)\rangle, \quad (1.31)$$

que es el resultado que queríamos probar, con el factor de fase $\alpha(t) = \alpha_B(t) + \alpha_D(t)$, siendo:

$$\alpha_D(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t \lambda(t')dt' \quad (1.32)$$

la denominada **fase dinámica**. □

Esta prueba del teorema adiabático es más rigurosa que la usual (véase, por ejemplo, secc. 10.1.2-[Griffiths]), pues esta última requiere despreciar una serie de términos en base a una información únicamente parcial sobre éstos. Sin embargo, dicha demostración es más constructiva que la aquí dada, en el sentido de que permite obtener el término α_B , que

es (en orden 0 en $\langle \Psi_{1,2} | \partial_t \mathcal{H} | \Psi_{2,1} \rangle$) la denominada **fase de Berry** (ec. 10.40-[Griffiths]):

$$\alpha_B(t) = i \int_0^t \langle \Psi(t') | \partial_t | \Psi(t') \rangle dt' . \quad (1.33)$$

Las expresiones (1.32) y (1.33) se generalizan sin dificultad a un tiempo inicial arbitrario t_i , sustituyendo en los límites inferiores de integración 0 por t_i .

1.3. Transiciones en Sistemas de Dos Niveles

De acuerdo con el teorema adiabático, un sistema de dos niveles no degenerados cuyo estado en un instante inicial fuese una de las dos autofunciones independientes del hamiltoniano (lo cual puede asegurarse midiendo la energía de la configuración) permanecería en el correspondiente nivel energético durante toda evolución adiabática. Por supuesto, en la práctica los procesos adiabáticos por definición no pueden realizarse en tiempo finito, con lo que este teorema debe entenderse como el caso límite de una evolución real, donde existirá una probabilidad de transición entre niveles o estados energéticos no nula en general; las cuales son las denominadas **transiciones de Landau-Zener**.

En los siguientes capítulos trataremos con hamiltonianos periódicos cuyo par de niveles energéticos no se corta en el tiempo, pero para los que existen instantes de máximo acercamiento. Se va a comprobar que, cuando la evolución del sistema provoca oscilaciones alrededor de estos puntos, la probabilidad de transición (o su promedio temporal) entre niveles presenta patrones interferométricos respecto a los parámetros que caracterizan al hamiltoniano. Este hecho podrá eventualmente implicar (en el caso de interferencias constructivas) máximos elevados de probabilidad, pudiendo incluso ser una certeza la transición entre niveles en ciertos instantes de tiempo y para ciertas configuraciones paramétricas, aun cuando la frecuencia de oscilación (que en el límite tendiendo a cero resultaría en la condición adiabática, y por tanto en una probabilidad nula) sea pequeña respecto al resto de magnitudes.

Capítulo 2

Modelo de Impulso Adiabático

2.1. Bases Diabática y Adiabática

Consideremos el operador (1.1) con el estímulo (1.2) y $A > \varepsilon_0$. En forma matricial:

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\varepsilon(t) & -\Delta \\ -\Delta & \varepsilon(t) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -(\varepsilon_0 + A \operatorname{sen}(\omega t)) & -\Delta \\ -\Delta & \varepsilon_0 + A \operatorname{sen}(\omega t) \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Fijado $t \in \mathbb{R}$, los autovalores y autovectores instantáneos del hamiltoniano son:

$$E_{\pm}(t) = \pm \frac{\hbar}{2} \Omega(t), \quad (2.2)$$

$$\varphi_{\pm}(t) = \begin{pmatrix} \varphi_{\pm,1}(t) \\ \varphi_{\pm,2}(t) \end{pmatrix} = \mathcal{N}_{\pm}(t) \begin{pmatrix} -\frac{\Delta}{\varepsilon(t) \pm \Omega(t)} \\ 1 \end{pmatrix},$$

con $\Omega(t) = \sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2(t)}$. Imponiendo la normalización de las autofunciones (i.e., $\|\varphi_{\pm}(t)\|^2 = 1$) se obtienen las constantes de normalización, las cuales escogemos reales:

$$\left[1 + \left(\frac{\sqrt{\Omega^2(t) - \varepsilon^2(t)}}{\Omega(t) + \varepsilon(t)} \right)^2 \right] |\mathcal{N}_+(t)|^2 = \frac{2\Omega(t) |\mathcal{N}_+(t)|^2}{\Omega(t) + \varepsilon(t)} = 1 \Rightarrow \mathcal{N}_+(t) = -\sqrt{\frac{\Omega(t) + \varepsilon(t)}{2\Omega(t)}}.$$

Definiendo $\beta_{\pm}(t) = \sqrt{\frac{\Omega(t) \pm \varepsilon(t)}{2\Omega(t)}}$, y hallando análogamente $\mathcal{N}_-(t)$; se obtienen los autoestados:

$$|\varphi_{\pm}, t\rangle = \beta_{\mp}(t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \mp \beta_{\pm}(t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \beta_{\mp}(t) |\varphi_{\uparrow}\rangle \mp \beta_{\pm}(t) |\varphi_{\downarrow}\rangle, \quad (2.3)$$

donde se han introducido las autofunciones de la matriz z de Pauli: $\hat{\tau}_z |\varphi_{\uparrow\downarrow}\rangle = \pm |\varphi_{\uparrow\downarrow}\rangle$. Se definen la **base diabática** como $\{\varphi_{\uparrow}, \varphi_{\downarrow}\}$, que sería base de autofunciones del hamiltoniano si $\Delta = 0$; y la **base adiabática** como $\{\varphi_+(t), \varphi_-(t)\}$, para cada instante de tiempo. Ambas bases pueden emplearse para desarrollar el estado del sistema de dos niveles, siendo:

$$\begin{pmatrix} \varphi_+(t) \\ \varphi_-(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_-(t) & -\beta_+(t) \\ \beta_+(t) & \beta_-(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{\uparrow} \\ \varphi_{\downarrow} \end{pmatrix}.$$

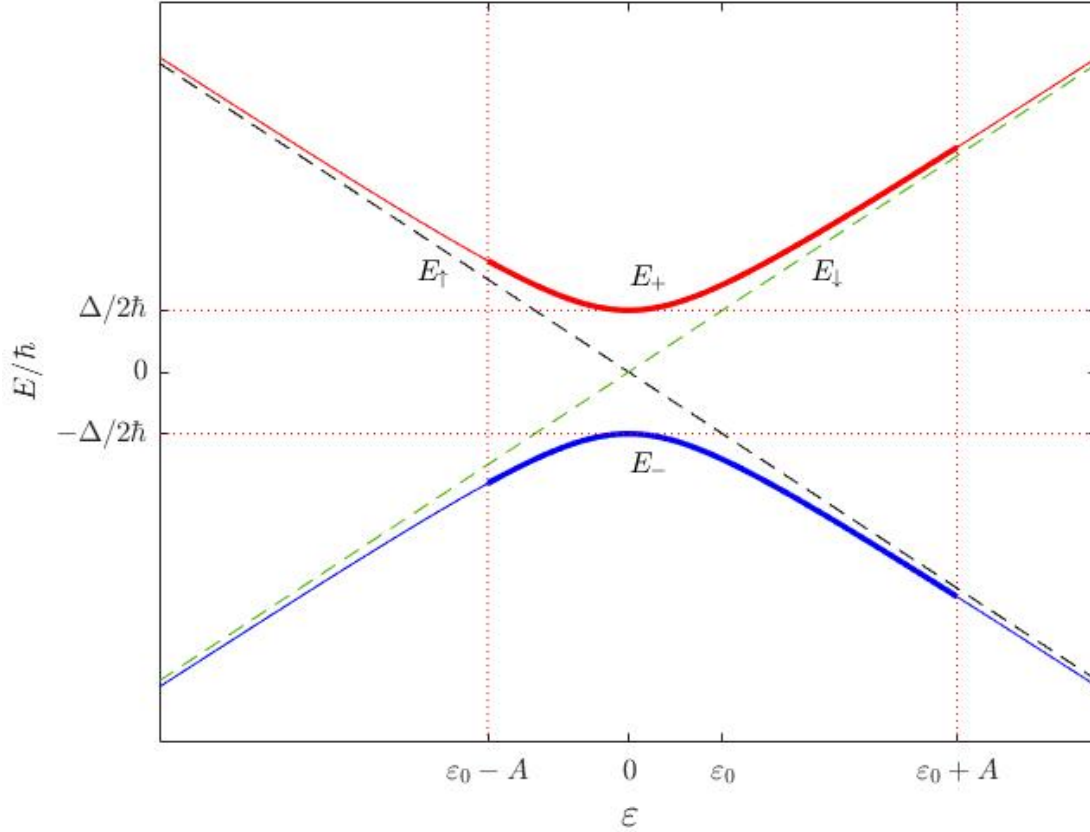


Figura 2.1: Niveles energéticos diabáticos y adiabáticos frente al estímulo. $E_{\uparrow} = -\varepsilon/2$, $E_{\downarrow} = \varepsilon/2$ corresponden a los autovalores de (2.1) cuando $\Delta = 0$.

En la figura 2.1 se observa que los niveles adiabáticos E_{+} y E_{-} experimentan un máximo acercamiento (de $\Delta\hbar$) cuando $\varepsilon(t) = 0$, lo cual ocurre si la amplitud es superior al offset. A este punto de mínima distancia se le denomina **cruce evitado**, o simplemente cruce. Lejos de él, los estados adiabáticos tienden a los diabáticos. Obsérvese que para $\varepsilon > 0$; el nivel diabático superior es E_{\downarrow} .

Esta información es complementaria con la que aporta la figura 2.2, donde se aprecia la $(2\pi/\omega)$ -periodicidad temporal de los niveles adiabáticos (heredada del estímulo), lo cual provoca que se visite repetidamente el cruce evitado. De la definición de éste, se obtienen, imponiendo la minimalidad de E_{+} , los puntos (bien definidos pues $A > \varepsilon_0$):

$$\omega t_1 = -\arcsen\left(\frac{\varepsilon_0}{A}\right), \quad \omega t_2 = \pi + \arcsen\left(\frac{\varepsilon_0}{A}\right) = \pi - \omega t_1. \quad (2.4)$$

Resulta revelador observar el comportamiento de los coeficientes $\beta_{\pm}(t)$ de las autofunciones adiabáticas $\varphi_{\pm}(t)$ frente al tiempo (figura 2.3): estos varían bruscamente en las proximidades de los cruces, manteniéndose aproximadamente constantes en los demás tramos; comportamiento cuya acentuación es directamente proporcional a $\omega\sqrt{(A/\Delta)^2 - (\varepsilon_0/\Delta)^2}$, como se comprueba evaluando $\dot{\beta}_{\pm}(t_{1,2})$. Dado que se trata de una representación temporal, lo anterior se traduce en una variación muy lenta de los estados adiabáticos para todo instante de tiempo, salvo aquellos lo suficientemente cercanos a $t_1/\omega + kT$ o $t_2/\omega + kT$, con $T = 2\pi/\omega$ el periodo de oscilación y $k \in \mathbb{Z}$. Suponiendo que el sistema se encuentra

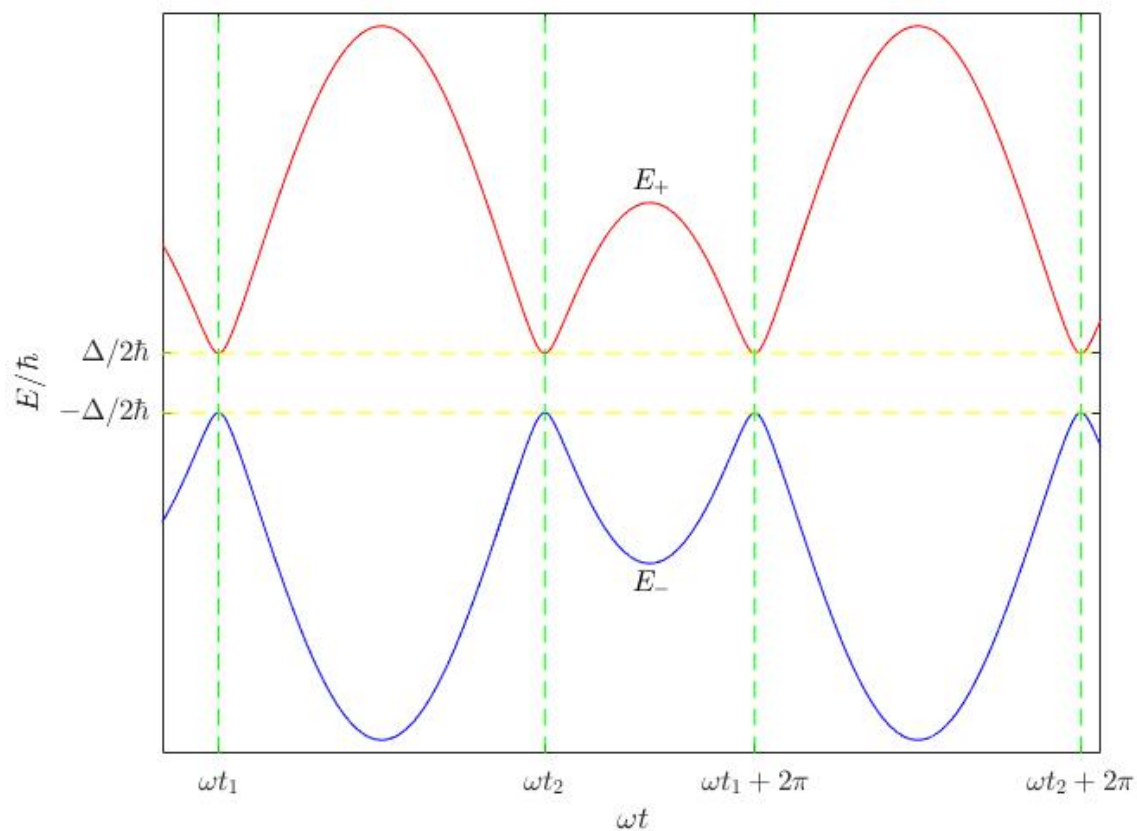


Figura 2.2: Niveles adiabáticos frente al tiempo.

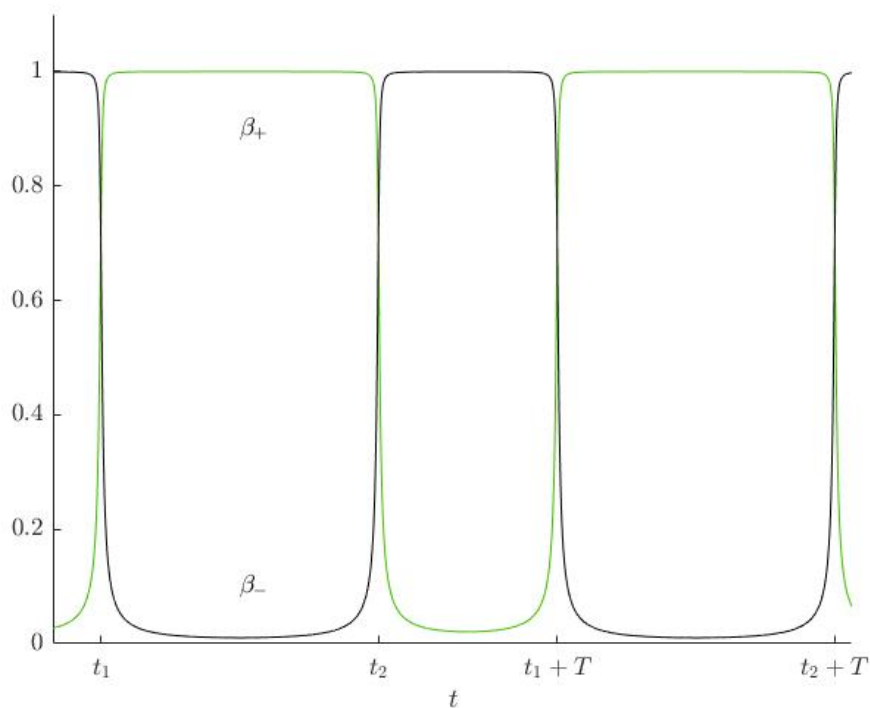


Figura 2.3: Coordenadas de $\varphi_{\pm}(t)$ en la base diabática frente al tiempo.

inicialmente en un estado de la base adiabática, resulta entonces razonable asumir la siguiente aproximación, que constituye el **modelo de impulso adiabático** o modelo de la matriz de transferencia:

La evolución del sistema está gobernada por el teorema adiabático en todo instante de tiempo salvo aquellos correspondientes exactamente a cruces evitados, donde puede producirse un cambio de nivel energético.

Se utilizará la notación $t_{1,2}^-$ para indicar el instante en que el sistema se encuentra en un cruce pero aún no ha experimentado su efecto, y análogamente $t_{1,2}^+$ cuando el sistema acaba de experimentarlo. A efectos numéricos, $t_{1,2}^- = t_{1,2}^+$, ya que en el modelo está implícito que las transiciones son instantáneas.

Naturalmente, esta discretización del comportamiento no adiabático del sistema no constituye un modelo exacto, pero permite representar el impacto de los cruces en la distribución energética mediante un operador independiente del tiempo, denominado matriz de transferencia, que obtendremos posteriormente. La terminología de base y estados adiabáticos empleada en este capítulo queda, por su relación con el teorema adiabático, justificada.

2.2. Probabilidad de Transición en un Cruce

Consideremos un entorno próximo al cruce evitado: $t' = t - t_{1,2}$ y $\omega|t'| \ll 1$. Desarrollando (1.2) en serie de Taylor en torno a $t = t_{1,2}$ hasta primer orden en t' , se tiene:

$$\varepsilon(t) \simeq \varepsilon(t_{1,2}) + A\omega \cos(\omega t_{1,2}) t' \stackrel{(2.4)}{=} \begin{cases} A\omega t' \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon_0}{A}\right)^2}, & \text{en } t_1 \\ -A\omega t' \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon_0}{A}\right)^2}, & \text{en } t_2 \end{cases} = \pm v t', \quad (2.5)$$

donde se ha utilizado que: $\cos(\arcsen(x)) = \sqrt{1 - x^2} = -\cos(\pi + \arcsen(x))$, y se ha introducido el parámetro positivo con dimensiones de cuadrado de frecuencia:

$$v = A\omega \left| \cos(\omega t_{1,2}) \right| = A\omega \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon_0}{A}\right)^2}. \quad (2.6)$$

Es directo comprobar que el cambio $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$ en (2.1) no altera los autovalores (2.2) ni autofunciones normalizadas (2.3) del hamiltoniano, sólo los intercambia; con lo que el tratamiento del problema es el mismo en t_1 que en t_2 . Tomando, sin pérdida por tanto de generalidad, el signo positivo en (2.5) y renombrando t' a t (aunque debe recordarse entonces que $\omega|t| \ll 1$) se obtiene el hamiltoniano linealizado:

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = -\frac{\Delta\hbar}{2} \hat{\tau}_x - \frac{v\hbar}{2} \hat{\tau}_z. \quad (2.7)$$

Supongamos el estado $\left| \varphi_-, t_{1,2}^- \right\rangle$. Entonces, de acuerdo con [Landau77] la transición desde el nivel fundamental al superior (estado $\left| \varphi_+, t_{1,2}^+ \right\rangle$) puede tratarse de forma similar al problema de la reflexión en una barrera de potencial de altura la diferencia entre los

niveles. De (2.2) y (2.5) se obtiene que $E_+(t) = E_-(t) \Leftrightarrow t = \pm i \frac{\Delta}{v} \equiv t_{eq} \in \mathbb{C}$. Por tanto, la probabilidad de transición $|\varphi_-\rangle \rightarrow |\varphi_+\rangle$ en un cruce viene dada por (ec. 53.10-[Landau77] ó ec. 4.5-[Delone]):

$$P_+ = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} \left(\int_0^{t_{eq}} (E_+(t) - E_-(t)) dt \right) \right] \equiv e^{-\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im}(I)}.$$

Empleando la parametrización $\gamma(s) = i\Delta s/v$ para hallar la integral en el plano complejo:

$$I = i \frac{\Delta}{v} \int_0^1 \hbar \left[\sqrt{\Delta^2 - v^2 \left(\frac{\Delta}{v} \right)^2 s^2} \right] ds = \left(\begin{array}{l} s = \operatorname{sen}(u) \\ ds = \cos(u) du \end{array} \right) i \hbar \frac{\Delta^2}{v} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos^2(u) du = i \hbar \frac{\Delta^2}{4v} \pi$$

se llega a la expresión, denominada **probabilidad de transición de Landau-Zener**:

$$P_+ = e^{-2\pi\delta} \equiv P_{LZ}, \quad (2.8)$$

donde se ha introducido el **parámetro de adiabaticidad**:

$$\delta = \frac{\Delta^2}{4v}. \quad (2.9)$$

Resultados similares aparecieron por primera vez en [Landau32], [Majorana], [Stückelberg] y [Zener].

El objetivo es derivar analíticamente la probabilidad de encontrar un estado final dado ($|\varphi_+, t\rangle$ ó $|\varphi_-, t\rangle$) partiendo de un estado inicial ($|\varphi_+, t_0\rangle$ ó $|\varphi_-, t_0\rangle$); para lo cual la información de (2.8) resulta insuficiente ya que, como se verá posteriormente, la trayectoria del sistema en el espacio $E - t$ (figura 2.2) da lugar a interferencias. A pesar de ello, esta expresión es útil pues aparecerá de manera natural durante la aplicación del modelo de impulso adiabático. Los resultados más manejables pueden obtenerse en los siguientes casos:

- **Límite de cruce lento:** $v \ll \Delta^2 \Rightarrow \delta \gg 1, P_{LZ} \ll 1$. Notar que $\delta \approx 1$ también hace P_{LZ} pequeña, por lo que puede considerarse como la frontera de este caso límite.
- **Límite de cruce rápido:** $v \gg \Delta^2 \Rightarrow \delta \ll 1, P_{LZ} \approx 1$.

Aunque el método de impulso adiabático puede emplearse para estudiar ambos límites, analizaremos únicamente el límite lento (sección 2.3.4); el caso de alta frecuencia admite un tratamiento alternativo menos laborioso que se realizará en el capítulo 3. La aplicación del presente modelo al límite rápido puede encontrarse, por ejemplo, en [Ashhab].

2.3. Aplicación del Modelo de Impulso Adiabático

2.3.1. Evolución Adiabática

Todo estado del sistema de dos niveles puede desarrollarse en la base adiabática, cuya evolución temporal desde un instante t_i hasta otro t_f en la región adiabática (i.e., tales que $\exists n \in \mathbb{Z}$ cumpliendo o bien $t_1 + nT < t_i < t_f < t_2 + nT$, o bien $t_2 + nT < t_i < t_f < t_1 + (n+1)T$) viene determinada, por hipótesis, por el teorema adiabático, luego:

$$\begin{aligned} |\psi, t_f\rangle &= |\varphi_+, t_f\rangle \langle \varphi_+, t_i | \psi, t_i\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} E_+(t) dt\right) \\ &+ |\varphi_-, t_f\rangle \langle \varphi_-, t_i | \psi, t_i\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} E_-(t) dt\right), \end{aligned} \quad (2.10)$$

donde se ha introducido la fase dinámica (1.32) asociada a cada nivel energético. Notemos que en este caso la fase de Berry (1.33) no interviene, ya que (suprimiendo la dependencia temporal en la notación por simplicidad):

$$\begin{aligned} \langle \varphi_\pm | \varphi_\pm \rangle = 1 \Rightarrow 0 &= \hat{\partial}_t \langle \varphi_\pm | \varphi_\pm \rangle = \hat{\partial}_t (\langle \varphi_\pm |) | \varphi_\pm \rangle + \langle \varphi_\pm | \hat{\partial}_t | \varphi_\pm \rangle = \left(\langle \varphi_\pm | \hat{\partial}_t | \varphi_\pm \rangle \right)^* \\ &+ \langle \varphi_\pm | \hat{\partial}_t | \varphi_\pm \rangle = 2 \operatorname{Re}(\langle \varphi_\pm | \hat{\partial}_t | \varphi_\pm \rangle) = 2 \langle \varphi_\pm | \hat{\partial}_t | \varphi_\pm \rangle \Rightarrow \langle \varphi_\pm | \hat{\partial}_t | \varphi_\pm \rangle = 0, \end{aligned}$$

donde el último paso se deduce de la expresión (2.2) de las funciones adiabáticas; el único inconveniente consistiría en un factor no real, el cual podría provenir exclusivamente a través de la constante de normalización, y a priori sería relevante únicamente si se toma una fase dependiente del tiempo de la forma $\mathcal{N}'_\pm(t) = \mp \exp(i\theta_\pm(t))\beta_\pm(t)$ (con las nuevas funciones adiabáticas $|\varphi'_\pm, t\rangle = \exp(i\theta_\pm(t))|\varphi_\pm, t\rangle$), siendo entonces:

$$\begin{aligned} \langle \varphi'_\pm, t | \hat{\partial}_t | \varphi'_\pm, t \rangle &= \langle \varphi_\pm, t | \hat{\partial}_t | \varphi_\pm, t \rangle + i\dot{\theta}_\pm(t) \langle \varphi_\pm, t | \varphi_\pm, t \rangle = i\dot{\theta}_\pm(t) \Rightarrow \\ \alpha_B^\pm(t) &= i \int_{t_i}^t i\dot{\theta}_\pm(t') dt' = \theta_\pm(t_i) - \theta_\pm(t). \end{aligned}$$

Finalmente, si se añaden en (2.10) estas fases de Berry asociadas a $|\varphi'_\pm, t\rangle$:

$$\begin{aligned} |\psi', t_f\rangle &= e^{i\alpha_B^{+\prime}(t_f)} |\varphi'_+, t_f\rangle \langle \varphi'_+, t_i | \psi, t_i\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} E_+(t) dt\right) + e^{i\alpha_B^{-\prime}(t_f)} |\varphi'_-, t_f\rangle \langle \varphi'_-, t_i | \\ &|\psi, t_i\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} E_-(t) dt\right) = e^{i(\theta_+(t_i) - \theta_+(t_f))} e^{i\theta_+(t_f)} e^{-i\theta_+(t_i)} |\varphi_+, t_f\rangle \langle \varphi_+, t_i | \psi, t_i\rangle \\ &\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} E_+(t) dt\right) + e^{i(\theta_-(t_i) - \theta_-(t_f))} e^{i\theta_-(t_f)} e^{-i\theta_-(t_i)} |\varphi_-, t_f\rangle \langle \varphi_-, t_i | \psi, t_i\rangle \\ &\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} E_-(t) dt\right) = |\psi, t_f\rangle. \end{aligned}$$

Luego la fase de Berry no interviene en la evolución del sistema, con independencia de la elección de la fase en la constante de normalización de las funciones adiabáticas.

Definimos:

$$\zeta(t_f, t_i) = \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} \Omega(t) dt \quad (2.11)$$

y el espinor en el instante t como:

$$|\chi, t\rangle = \begin{pmatrix} \langle \varphi_+, t | \psi, t \rangle \\ \langle \varphi_-, t | \psi, t \rangle \end{pmatrix}.$$

Trabajar con el espinor implica utilizar la base adiabática para representar los operadores, de forma análoga a cómo emplear la función de onda implica normalmente el uso de la base diabática. Haciendo uso de (2.2) y (A.5); la evolución adiabática del sistema está entonces caracterizada por la relación:

$$|\chi, t_f\rangle = e^{-i\zeta(t_f, t_i)\hat{\tau}_z} |\chi, t_i\rangle, \quad (2.12)$$

esto es, los estados inicial y final están relacionados por un operador unitario, denominado **matriz de evolución**, que en la base adiabática está representado por la matriz:

$$\hat{U}(t_f, t_i) = e^{-i\zeta(t_f, t_i)\hat{\tau}_z}. \quad (2.13)$$

Además, resulta útil particularizar los casos:

$$\hat{U}_{1,2} = e^{-i\zeta_{1,2}\hat{\tau}_z}, \quad (2.14)$$

$$\zeta_1 = \zeta(t_2, t_1), \quad \zeta_2 = \zeta(t_1 + T, t_2), \quad (2.15)$$

que constituyen las fases dinámicas adquiridas por el sistema debido al tránsito entre cruces consecutivos. La anterior terminología invita a denominar **zona 1** o primera a cada región comprendida entre $t_1 + nT$ y $t_2 + nT$, y **zona 2** o segunda entre $t_2 + nT$ y $t_1 + (n+1)T$, independientemente del periodo concreto.

De su expresión, se observa que ζ_1 y ζ_2 corresponden al área bajo la curva superior (E_+/\hbar) de la figura 2.2 en las zonas 1 y 2, respectivamente. Señalar que, debido a la T -periodicidad de $\Omega(t)$, la definición (2.15) es independiente del periodo en el que se integre: sólo depende de si se hace en la zona primera o segunda.

A continuación imponemos simultáneamente:

a) $\omega|t| \ll 1$, luego el hamiltoniano linealizado (2.7) es válido.

b) $v|t| \gg \Delta$, que en conjunción con a) y (2.5) implica que $|\varepsilon(t)| \gg \Delta$.

Intuitivamente, ambas condiciones podrían parecer contradictorias, puesto que a) implica estar en un cierto entorno del cruce, mientras que $|\varepsilon(t)| \gg \Delta$ sugiere estar, observando

la figura 2.1, lejos de él. Sin embargo, se tiene de (2.6) que $v|t| = w|t| \sqrt{A^2 - \varepsilon_0^2}$; lo cual puede conectar simultáneamente las situaciones a) y b) si:

$$\frac{\Delta}{\sqrt{A^2 - \varepsilon_0^2}} \ll \omega|t| \ll 1. \quad (2.16)$$

Para que el método de impulso adiabático sea válido, es necesario estar en la región de parámetros caracterizada por la desigualdad entre los extremos de la ecuación (2.16) (o al menos no cerca de la región $\sqrt{A^2 - \varepsilon_0^2} \ll \Delta$). Esto puede conciliarse con el límite de cruce lento si ω es lo suficientemente pequeña.

De a) y b) se tiene entonces:

$$\Omega(t) = \sqrt{\Delta^2 + (vt)^2} \simeq v|t| \Rightarrow \beta_{\pm}(t) \simeq \sqrt{\frac{|t| \pm t}{2|t|}} \Rightarrow \begin{cases} \beta_+(t) \simeq 1, \beta_-(t) \simeq 0, & \text{si } t > 0 \\ \beta_+(t) \simeq 0, \beta_-(t) \simeq 1, & \text{si } t < 0. \end{cases}$$

Esto indica que existe efectivamente una región que es a la vez lo suficientemente cercana al cruce evitado para linealizar el hamiltoniano, y lo suficientemente lejana a éste para aproximar los estados adiabáticos por los diabáticos. Mientras se mantengan las hipótesis a) y b), vamos a hacer el cambio de notación: $t \rightarrow t_{\text{asintótico}} \equiv t_a$ para recalcar la condición b). De esta forma, usando lo anterior y (2.3):

$$|\varphi_+, t_a\rangle \simeq \begin{cases} -|\varphi_{\downarrow}\rangle, & \text{si } t_a > 0 \\ |\varphi_{\uparrow}\rangle, & \text{si } t_a < 0 \end{cases}, \quad |\varphi_-, t_a\rangle \simeq \begin{cases} |\varphi_{\uparrow}\rangle, & \text{si } t_a > 0 \\ |\varphi_{\downarrow}\rangle, & \text{si } t_a < 0. \end{cases} \quad (2.17)$$

Veamos qué ocurre con la fase dinámica adquirida entre $t = 0$ (correspondiente al cruce, ya que recordemos que en el hamiltoniano linealizado la variable temporal se redefinía con origen en $t_{1,2}$) y $\pm t_a$ (tomamos $t_a > 0$, correspondiendo $-t_a$ al caso negativo de (2.17)):

$$\zeta(\pm t_a, 0) = \frac{1}{2} \int_0^{\pm t_a} \sqrt{\Delta^2 + (vt)^2} dt = \left(\begin{array}{l} vt/\Delta = \sinh(u) \\ vdt/\Delta = \cosh(u)du \end{array} \right) \frac{\Delta^2}{2v} \int_0^{\pm \operatorname{arcsenh}(\frac{vt_a}{\Delta})} \cosh^2(u)$$

$$du = \frac{\Delta^2}{4v} \left[\frac{1}{2} \sinh(2u) + u \right]_{u=0}^{u=\pm \operatorname{arcsenh}(\frac{vt_a}{\Delta})} \stackrel{(1)}{=} \pm \delta \left[\frac{vt_a}{\Delta} \sqrt{1 + \left(\frac{vt_a}{\Delta}\right)^2} + \operatorname{arcsenh}\left(\frac{vt_a}{\Delta}\right) \right] \stackrel{(2)}{=}$$

$$\pm \delta \left[\frac{z_a}{\sqrt{2\delta}} \sqrt{1 + \frac{z_a^2}{2\delta}} + \ln \left(\sqrt{1 + \frac{z_a^2}{2\delta}} + \frac{z_a}{\sqrt{2\delta}} \right) \right] \stackrel{(3)}{\approx} \pm \left[\frac{z_a^2}{2} + \frac{\delta}{2} + \delta \ln \left(\sqrt{\frac{2}{\delta}} z_a + \sqrt{\frac{\delta}{2}} \frac{1}{z_a} \right) \right]$$

$$= \pm \left[\frac{z_a^2}{2} + \frac{\delta}{2} + \delta \ln \left(\sqrt{\frac{2}{\delta}} z_a \left(1 + \frac{\delta}{2z_a^2} \right) \right) \right] \approx \pm \left[\frac{z_a^2}{2} + \frac{\delta}{2} + \delta \ln(\sqrt{2}z_a) - \frac{\delta}{2} \ln \delta \right] \Rightarrow$$

$$\zeta(\pm t_a, 0) \approx \pm [\phi(z_a) - \phi_{\delta}], \quad (2.18)$$

donde:

- (1) $\sinh(\pm 2 \operatorname{arcsenh}(x)) = \pm 2 \sinh(\operatorname{arcsenh}(x)) \cosh(\operatorname{arcsenh}(x)) = \pm 2x\sqrt{1+x^2}$.
- (2) $\operatorname{arcsenh}(x) = \ln(\sqrt{1+x^2} + x)$ (ec. 1.622-1 [Gradshteyn]). Además, se ha introducido la siguiente notación:

$$z = \sqrt{\frac{v}{2}}t. \quad (2.19)$$

- (3) $v|t| \gg \Delta = 2\sqrt{v\delta} \Rightarrow |z_a| \gg \sqrt{2\delta} \Rightarrow 2\delta/z_a^2 \ll 1$. Luego desarrollando en primer orden en serie de Taylor:

$$\sqrt{1 + \frac{z_a^2}{2\delta}} = \frac{z_a}{\sqrt{2\delta}} \sqrt{1 + \frac{2\delta}{z_a^2}} \approx \frac{z_a}{\sqrt{2\delta}} \left(1 + \frac{\delta}{z_a^2}\right).$$

y se ha introducido la notación:

$$\phi(z_a) = \frac{z_a^2}{2} + \delta \ln(\sqrt{2}z_a), \quad \phi_\delta = \frac{\delta}{2}(\ln(\delta) - 1). \quad (2.20)$$

Nótese que $\zeta(t_a, 0) = \zeta(0, -t_a)$.

2.3.2. Transición No Adiabática

De acuerdo con el modelo de impulso adiabático, existe un operador \hat{N} (**matriz de transferencia**) que contiene toda la información sobre el comportamiento del sistema de dos niveles en un cruce evitado. En particular, la evolución desde $-t_a$ hasta t_a puede descomponerse secuencialmente en un tramo adiabático $-t_a \rightarrow 0^-$, seguido de uno no adiabático $t = 0^- \rightarrow 0^+$ y otro adiabático $t = 0^+ \rightarrow t_a$:

$$|\chi, t_a\rangle = \hat{U}(t_a, 0^+) \hat{N} \hat{U}(0^-, -t_a) |\chi, -t_a\rangle \stackrel{(2.13)}{=} e^{-i\zeta(t_a, 0)\hat{\tau}_z} \hat{N} e^{-i\zeta(t_a, 0)\hat{\tau}_z} |\chi, -t_a\rangle. \quad (2.21)$$

Los operadores o matrices de evolución vienen dados por (2.18). Para hallar \hat{N} , es necesario entonces determinar los espinores en los tiempos asintóticos. Para ello resolvemos la ecuación de Schrödinger $i\hbar\hat{\partial}_t|\psi\rangle = \hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle$ con el hamiltoniano linealizado (2.7), lo cual da lugar, en la representación o base diabática, al sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden acopladas:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\psi_1(t)}{dt} = -\hbar \frac{vt}{2} \psi_1(t) - \hbar \frac{\Delta}{2} \psi_2(t) \\ i\hbar \frac{d\psi_2(t)}{dt} = -\hbar \frac{\Delta}{2} \psi_1(t) + \hbar \frac{vt}{2} \psi_2(t). \end{cases} \quad (2.22)$$

Para desacoplarlas, basta con aumentar el orden de derivación:

$$\begin{cases} i \frac{d^2 \psi_1(t)}{dt^2} = -i \frac{vt}{4} [vt\psi_1(t) + \Delta\psi_2(t)] - i \frac{\Delta}{4} [\Delta\psi_1(t) - vt\psi_2(t)] - \frac{v}{2} \psi_1(t) \\ i \frac{d^2 \psi_2(t)}{dt^2} = i \frac{vt}{4} [\Delta\psi_1(t) - vt\psi_2(t)] - i \frac{\Delta}{4} [vt\psi_1(t) + \Delta\psi_2(t)] + \frac{v}{2} \psi_2(t) . \end{cases}$$

Introduciendo la variable z (2.19), que verifica $\hat{\partial}_t^2 = (v/2)\hat{\partial}_z^2$, y el parámetro de adiabaticidad (2.9); se obtiene el sistema de ecuaciones de segundo orden desacopladas:

$$\begin{cases} \frac{d^2 \psi_1(z)}{dz^2} + [2\delta - i + z^2] \psi_1(z) = 0 \\ \frac{d^2 \psi_2(z)}{dz^2} + [2\delta + i + z^2] \psi_2(z) = 0 . \end{cases} \quad (2.23)$$

Estas expresiones para ψ_1 y ψ_2 son casos particulares de la ecuación diferencial de Weber, cuya solución viene dada como combinación lineal de las denominadas funciones cilíndricas parabólicas (ec. 9.255-2 [Gradshteyn], donde $\lambda = 2\delta \mp i \Rightarrow -(1+i\lambda)/2 = -i\delta - 1/2 \mp 1/2$):

$$\begin{cases} \psi_1(z) = A_+ D_{-1-i\delta}[(1+i)z] + A_- D_{-1-i\delta}[-(1+i)z] \\ \psi_2(z) = B_+ D_{-i\delta}[(1+i)z] + B_- D_{-i\delta}[-(1+i)z] . \end{cases} \quad (2.24)$$

Es posible recuperar el número de condiciones iniciales (dos) requeridas para determinar $\psi(z)$ mediante la ecuación de Schrödinger. Para ello, empleamos la siguiente propiedad de las funciones cilíndricas parabólicas (ec. 9.247-3 [Gradshteyn]):

$$\frac{dD_p(s)}{ds} = -D_{p+1}(s) + \frac{s}{2} D_p(s) . \quad (2.25)$$

Llamando $s = (1+i)z \Rightarrow \hat{\partial}_t = \sqrt{v/2} \hat{\partial}_z = (1+i)\sqrt{v/2} \hat{\partial}_s = \sqrt{v} e^{i\pi/4} \hat{\partial}_s$ y aplicando (2.25) en la primera ecuación de (2.22):

$$\begin{aligned} & i\sqrt{v} e^{i\pi/4} \left[A_+ \left(-D_{-i\delta}(s) + \frac{\sqrt{v}}{2} t e^{i\pi/4} D_{-1-i\delta}(s) \right) + A_- \left(D_{-i\delta}(-s) + \frac{\sqrt{v}}{2} t e^{i\pi/4} D_{-1-i\delta}(-s) \right) \right] \\ & = -\frac{vt}{2} [A_+ D_{-1-i\delta}(s) + A_- D_{-1-i\delta}(-s)] - \frac{\Delta}{2} [B_+ D_{-i\delta}(s) + B_- D_{-i\delta}(-s)] . \end{aligned}$$

Las funciones $D_{-1-i\delta}(\pm s)$ y $D_{-i\delta}(\pm s)$ deben ser linealmente independientes, ya que consti-
tuyen la base del espacio de soluciones de (2.23). Por tanto, los coeficientes que acompañan
a cada una de las cuatro a cada lado de la igualdad deben coincidir:

$$\begin{aligned} \blacksquare D_{-i\delta}(s): \quad & \frac{\Delta}{2} B_+ = i\sqrt{v} e^{i\frac{\pi}{4}} A_+ \Rightarrow B_+ = -\frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{\delta}} A_+. \end{aligned} \quad (2.26)$$

$$\blacksquare D_{-i\delta}(-s): \quad -\frac{\Delta}{2} B_- = i\sqrt{v} e^{i\frac{\pi}{4}} A_- \Rightarrow B_- = \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{\delta}} A_- . \quad (2.27)$$

$$\blacksquare D_{-1-i\delta}(s): \quad i\frac{v}{2} t e^{i\frac{\pi}{2}} A_+ = -\frac{vt}{2} A_+ \Rightarrow A_+ = A_+ . \quad \checkmark$$

$$\blacksquare D_{-1-i\delta}(-s): \quad i\frac{v}{2} t e^{i\frac{\pi}{2}} A_- = -\frac{vt}{2} A_- \Rightarrow A_- = A_- . \quad \checkmark$$

Reuniendo (2.24), (2.26) y (2.27), se tiene la solución de la ecuación de Schrödinger para
el hamiltoniano linealizado:

$$\begin{cases} \psi_1(z) = A_+ D_{-1-i\delta}[\sqrt{2} e^{i\frac{\pi}{4}} z] + A_- D_{-1-i\delta}[-\sqrt{2} e^{i\frac{\pi}{4}} z] \\ \psi_2(z) = -\frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{\delta}} A_+ D_{-i\delta}[\sqrt{2} e^{i\frac{\pi}{4}} z] + \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{\delta}} A_- D_{-i\delta}[-\sqrt{2} e^{i\frac{\pi}{4}} z] . \end{cases} \quad (2.28)$$

Esta expresión general no es satisfactoria de cara al cálculo de la matriz de transferencia.
Por ello, vamos a introducir el tiempo asintótico, con el que ya se había planteado la
ecuación (2.21), siendo $s_a = \sqrt{2} e^{i\frac{\pi}{4}} z_a = \sqrt{v} e^{i\frac{\pi}{4}} t_a$. Invocando las hipótesis a) y b) de la
sección 2.3.1, se va a suponer $z_a \gg 1$, lo suficientemente grande para justificar el uso de
la siguiente expresión asintótica (ec. 9.246-1 [Gradshteyn]):

$$D_p(x) \approx e^{-\frac{x^2}{4}} x^p, \quad \forall x \in \mathbb{C} \mid |x| \gg 1, |x| \gg |p|, |\arg x| < \frac{3}{4}\pi . \quad (2.29)$$

Utilizando esta aproximación, junto a la relación (ec. 9.248-1 [Gradshteyn]):

$$D_p(x) = e^{-i\pi p} D_p(-x) + \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-p)} e^{-i\frac{\pi}{2}(p+1)} D_{-p-1}(ix), \quad (2.30)$$

obtenemos las siguientes expresiones para las funciones parabólicas cilíndricas (notar que

$z_a \in \mathbb{R} \Rightarrow \arg(s_a) = \pi/4, \arg(-s_a) = -3\pi/4$:

(1) $D_{-1-i\delta}(s_a) \stackrel{(2.29)}{\approx} e^{-i\frac{z_a^2}{2}} \left(\sqrt{2}e^{i\frac{\pi}{4}}z_a\right)^{-1-i\delta} \rightarrow 0$, si $z_a \rightarrow \infty$; ya que se trata de una función oscilatoria acotada en z_a por otra proporcional a z_a^{-1} .

(2) $D_{-1-i\delta}(-s_a) \stackrel{(2.30)}{=} e^{i\pi(1+i\delta)}D_{-1-i\delta}(s_a) + \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1+i\delta)}e^{-i\frac{\pi}{2}(-i\delta)}D_{i\delta}(-is_a) \stackrel{(1)}{\approx}$

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1+i\delta)}e^{-\frac{\pi}{2}\delta}D_{i\delta}(\sqrt{2}e^{-i\frac{\pi}{4}}z_a) \stackrel{(2.29)}{\approx} \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1+i\delta)}e^{-\frac{\pi}{2}\delta}\exp\left(-e^{-i\frac{\pi}{2}}\frac{z_a^2}{2}\right)(\sqrt{2}e^{-i\frac{\pi}{4}}z_a)^{i\delta} =$$

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1+i\delta)}e^{-\frac{\pi}{2}\delta}e^{i\frac{z_a^2}{2}}e^{\frac{\pi}{4}\delta}e^{i\delta\ln(\sqrt{2}z_a)} \stackrel{(2.20)}{=} \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1+i\delta)}e^{-\frac{\pi}{4}\delta}e^{i\phi(z_a)}.$$

(3) $D_{-i\delta}(s_a) \stackrel{(2.29)}{\approx} e^{-i\frac{z_a^2}{2}}e^{\frac{\pi}{4}\delta}e^{-i\delta\ln(\sqrt{2}z_a)} = e^{\frac{\pi}{4}\delta}e^{-i\phi(z_a)}.$

La diferencia con (1) es la ausencia del factor z_a^{-1} , que implica valores muy pequeños.

(4) $D_{-i\delta}(-s_a) \stackrel{(2.30)}{=} e^{-\pi\delta}D_{-i\delta}(s_a) + \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(i\delta)}e^{-i\frac{\pi}{2}(1-i\delta)}D_{-1+i\delta}(\sqrt{2}e^{-i\frac{\pi}{4}}z_a) \stackrel{(2.29)}{\approx}$

$$e^{-\pi\delta}D_{-i\delta}(s_a) + \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(i\delta)}e^{-i\frac{\pi}{2}(1-i\delta)}e^{i\frac{z_a^2}{2}}(\sqrt{2}e^{-i\frac{\pi}{4}}z_a)^{-1+i\delta} \stackrel{(1)}{\approx} e^{-\pi\delta}D_{-i\delta}(s_a) \stackrel{(3)}{\approx} e^{-\frac{3\pi}{4}\delta}e^{-i\phi(z_a)}.$$

Introduciendo estas relaciones en (2.28), se obtienen las soluciones asintóticas de la ecuación de Schrödinger:

$$\begin{cases} \psi_1(z_a) \approx A_- H_1(\delta) e^{i\phi(z_a)} \\ \psi_2(z_a) \approx (-e^{\frac{\pi}{2}\delta} A_+ + e^{-\frac{\pi}{2}\delta} A_-) H_2(\delta) e^{-i\phi(z_a)}, \end{cases} \quad (2.31)$$

$$\begin{cases} \psi_1(-z_a) \approx A_+ H_1(\delta) e^{i\phi(z_a)} \\ \psi_2(-z_a) \approx (-e^{-\frac{\pi}{2}\delta} A_+ + e^{\frac{\pi}{2}\delta} A_-) H_2(\delta) e^{-i\phi(z_a)}, \end{cases} \quad (2.32)$$

donde $H_1(\delta) = \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1+i\delta)}e^{-\frac{\pi}{4}\delta}$, $H_2(\delta) = \frac{1}{\sqrt{\delta}}e^{-i\frac{\pi}{4}}e^{-\frac{\pi}{4}\delta}$.

Luego, expresada en la base diabática, la función de onda asintótica general del sistema es: $|\psi, \pm t_a\rangle = \psi_1(\pm z_a) |\varphi_\uparrow\rangle + \psi_2(\pm z_a) |\varphi_\downarrow\rangle$. Empleando el cambio de base en este límite, dado por (2.17), se obtiene en la base adiabática: $|\psi, t_a\rangle = -\psi_2(z_a) |\varphi_+, t_a\rangle + \psi_1(z_a) |\varphi_-, t_a\rangle$, y $|\psi, -t_a\rangle = \psi_1(-z_a) |\varphi_+, -t_a\rangle + \psi_2(-z_a) |\varphi_-, -t_a\rangle$. Por tanto, los espinores quedan:

$$|\chi, t_a\rangle = \begin{pmatrix} -\psi_2(z_a) \\ \psi_1(z_a) \end{pmatrix}, \quad |\chi, -t_a\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(-z_a) \\ \psi_2(-z_a) \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Recopilando (2.31), (2.32) y (2.33) en (2.21), se obtiene, en forma matricial en la base adiabática:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} -\psi_2(z_a) \\ \psi_1(z_a) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{-i\zeta(t_a,0)} & 0 \\ 0 & e^{i\zeta(t_a,0)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_{11} & N_{12} \\ N_{21} & N_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\zeta(t_a,0)} & 0 \\ 0 & e^{i\zeta(t_a,0)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(-z_a) \\ \psi_2(-z_a) \end{pmatrix} = \\ & \begin{pmatrix} e^{-i2\zeta(t_a,0)}\psi_1(-z_a)N_{11} + \psi_2(-z_a)N_{12} \\ \psi_1(-z_a)N_{21} + e^{i2\zeta(t_a,0)}\psi_2(-z_a)N_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -H_2(\delta)e^{-i\phi(z_a)} \left[-e^{-\frac{\pi}{2}\delta} A_+ + e^{-\frac{\pi}{2}\delta} A_- \right] \\ H_1(\delta)e^{i\phi(z_a)} A_- \end{pmatrix} = \\ & \begin{pmatrix} \left[N_{11}e^{-i2\zeta(t_a,0)}H_1(\delta)e^{i\phi(z_a)} \right] A_+ + N_{12}H_2(\delta)e^{-i\phi(z_a)} \left[-e^{-\frac{\pi}{2}\delta} A_+ + e^{\frac{\pi}{2}\delta} A_- \right] \\ \left[N_{21}H_1(\delta)e^{i\phi(z_a)} \right] A_+ + N_{22}H_2(\delta)e^{i2\zeta(t_a,0)}e^{-i\phi(z_a)} \left[-e^{-\frac{\pi}{2}\delta} A_+ + e^{\frac{\pi}{2}\delta} A_- \right] \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Este sistema de ecuaciones debe verificarse para cualquier condición inicial del sistema, es decir; para cualesquiera $A_+, A_- \in \mathbb{C}$, con lo que fijando convenientemente estas constantes podemos obtener los elementos de \hat{N} . De esta forma, tomando:

$$(1) \quad A_+ = 0, \quad A_- \neq 0 \Rightarrow$$

(I) Ecuación superior:

$$N_{12}H_2(\delta)e^{-i\phi(z_a)}e^{\frac{\pi}{2}\delta} = -H_2(\delta)e^{-i\phi(z_a)}e^{-\frac{\pi}{2}\delta} \implies N_{12} = -e^{-\pi\delta}. \quad (2.34)$$

(II) Ecuación inferior:

$$\begin{aligned} N_{22}H_2(\delta)e^{i2\zeta(t_a,0)}e^{-i\phi(z_a)}e^{\frac{\pi}{2}\delta} &= H_1(\delta)e^{i\phi(z_a)} \xrightarrow{(2.18)} N_{22} = \frac{H_1(\delta)}{H_2(\delta)}e^{i2\phi\delta}e^{-\frac{\pi}{2}\delta} = \\ & \frac{\sqrt{2\pi\delta}}{\Gamma(1+i\delta)}e^{i\frac{\pi}{4}}e^{i2\phi\delta}e^{-\frac{\pi}{2}\delta}. \end{aligned}$$

Teniendo ahora en cuenta que la función gamma $\Gamma : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$, dada por $\Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-t}t^{x-1} dt$ puede expresarse, como cualquier número complejo, tal que: $\Gamma(x) = |\Gamma(x)| e^{i \arg \Gamma(x)}$, y que verifica las siguientes propiedades:

- De su definición, por ser el dominio de integración real, se tiene directamente que: $\Gamma(\bar{x}) = \overline{\Gamma(x)} \implies \arg(\Gamma(x)) = -\arg(\Gamma(\bar{x})), \quad \forall x \in \mathbb{C}$.

- Ec. 8.332-3 [Gradshteyn], junto a la propiedad anterior:

$$|\Gamma(1 + iy)| = \sqrt{\frac{y\pi}{\sinh(y\pi)}} = \sqrt{\frac{2y\pi}{e^{y\pi} - e^{-y\pi}}}, \quad \forall y \in \mathbb{R}.$$

se sigue entonces que:

$$N_{22} = \sqrt{1 - e^{-2\pi\delta}} e^{i(\frac{\pi}{4} + 2\phi_\delta + \arg(\Gamma(1 - i\delta)))}. \quad (2.35)$$

(2) $A_+ \neq 0, A_- = 0 \Rightarrow$

(I) Ecuación superior:

$$\begin{aligned} N_{11}H_1(\delta)e^{i\phi(z_a)}e^{-i2\zeta(t_a,0)} - H_2(\delta)e^{-i\phi(z_a)}e^{-\frac{3\pi}{2}\delta} &= H_2(\delta)e^{-i\phi(z_a)}e^{\frac{\pi}{2}\delta} \Rightarrow \\ N_{11} &= \frac{H_2(\delta)}{H_1(\delta)}e^{-i2\phi(\delta)}e^{\frac{\pi}{2}}(1 - e^{-2\pi\delta}) = \sqrt{1 - e^{-2\pi\delta}} e^{-i(\frac{\pi}{4} + 2\phi_\delta + \arg(\Gamma(1 - i\delta)))}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

(II) Ecuación inferior:

$$\begin{aligned} N_{21}H_1(\delta)e^{i\phi(z_a)} &= N_{22}H_2(\delta)e^{i2\zeta(t_a,0)}e^{-i\phi(z_a)}e^{-\frac{\pi}{2}\delta} \Rightarrow \\ N_{21} &= \frac{H_2(\delta)}{H_1(\delta)}e^{-i2\phi_\delta}e^{-\frac{\pi}{2}\delta} \frac{H_1(\delta)}{H_2(\delta)}e^{i2\phi_\delta}e^{-\frac{\pi}{2}\delta} = e^{-\pi\delta}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Rescatando el parámetro (2.8), e introduciendo la denominada **fase de Stokes**:

$$\theta_S = \frac{\pi}{4} + \delta(\ln(\delta) - 1) + \arg(\Gamma(1 - i\delta)), \quad (2.38)$$

($\theta_S \in \mathbb{R}$) se concluye, por tanto, que la matriz de transferencia es, en la base adiabática:

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - P_{LZ}} e^{-i\theta_S} & -\sqrt{P_{LZ}} \\ \sqrt{P_{LZ}} & \sqrt{1 - P_{LZ}} e^{i\theta_S} \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

Observaciones acerca de este operador:

- Es unitario, como es de esperar para los operadores de propagación que determinan la evolución del sistema, ya que conservan la norma.
- Depende únicamente de δ , es decir, de los parámetros A, ε_0, ω y Δ ; pero no del tiempo.

- El hecho de que los autovalores y autofunciones del hamiltoniano (linealizado o sin linealizar) sean invariantes bajo cambio de signo en ε (como se comentó al plantear la ecuación (2.7)) hace que el anterior desarrollo con el tiempo asintótico, que en última instancia permitió obtener (2.39); sea igualmente válido para los dos cruces de cada periodo (en t_1 y t_2). Esto, junto a la independencia del tiempo (y por tanto del periodo en cuestión), justifica que este operador pueda utilizarse para describir el efecto no adiabático de *cualquier* cruce visitado durante la evolución del sistema.
- Es consistente con la fórmula de la probabilidad de transición de Landau-Zener (2.8). De su definición en la sección 2.2, se infiere: $P_{LZ} = \left| \langle \varphi_+, t = 0^+ | \varphi_-, t = 0^- \rangle \right|^2 = \left| \langle \varphi_+, t = 0^+ | \hat{N}^\dagger | \varphi_-, t = 0^+ \rangle \right|^2 = \left| \langle \varphi_-, t = 0^+ | \hat{N} | \varphi_+, t = 0^+ \rangle^* \right|^2 = |N_{2,1}|^2 = P_{LZ}$, ya que (2.39) está representada en la base adiabática. Esto constituye un argumento a favor de la consistencia y la validez del modelo. Además, se obtiene que la probabilidad de cambio de estado en un cruce evitado es P_{LZ} , y la de permanencia; $1 - P_{LZ}$, para cualquiera de los dos estados adiabáticos.

2.3.3. Probabilidad de Transición en un Número Arbitrario de Cruces

Nos encontramos ya en condiciones de abordar el estudio de la evolución en la ocupación de los niveles energéticos del sistema. Para ello, vamos a fijar el tiempo de origen $t_0 = t_1^+$, es decir, el estímulo (1.2) comienza aumentando desde cero: $\varepsilon(t_1^+) = 0$, $d\varepsilon(t_1^+)/dt > 0$; y no se considera el cruce correspondiente a t_1 , lo cual dentro del modelo de impulso adiabático es lógico pues, de tenerse en cuenta, el sistema experimentaría potencialmente un cambio brusco en el instante de encendido del estímulo, cuando éste aún se mantiene nulo. En cualquier caso, si se quisiera considerar el efecto de este cruce inicial, bastaría con componer la matriz de transferencia a la derecha.

Fijado $t > t_1$, el operador (unitario) de evolución del sistema es:

$$\hat{T}(t, t_1) = \begin{cases} \hat{U}(t, t_1 + nT)(\hat{N}\hat{U}_2\hat{N}\hat{U}_1)^n & \text{si } \exists n \in \mathbb{N}_0 \mid t - nT \in (t_1, t_2) \\ \hat{U}(t, t_2 + nT)\hat{N}\hat{U}_1(\hat{N}\hat{U}_2\hat{N}\hat{U}_1)^n & \text{si } \exists n \in \mathbb{N}_0 \mid t - nT \in (t_2, t_1 + T), \end{cases} \quad (2.40)$$

donde n juega el papel de número de periodos completos existentes entre t_1 y t , y debe por tanto ser: $n = \lfloor (t - t_1)/T \rfloor = \lfloor \omega(t - t_1)/2\pi \rfloor$. El primer caso corresponde a un tiempo final en la zona 1, mientras que el segundo hace lo propio con la zona 2. No se considera el caso de acabar exactamente en un cruce evitado porque, aunque ciertamente podría tomarse ($t = t_{1,2} + nT = t_{1,2}^\pm + nT$); en el marco del modelo de impulso adiabático esta situación no está bien definida, pues sería necesario especificar si el último cruce llega a efectuarse (t^+) o no (t^-), pero por hipótesis $t^+ = t^-$. Se puede, por tanto, fijar el estado final a una distancia arbitrariamente pequeña de un cruce evitado, pero estrictamente positiva.

Se tiene, simplemente operando con (2.14) y (2.39) en forma matricial (en la base adiabática):

$$NU_2NU_1 = \begin{pmatrix} \alpha & -\gamma^* \\ \gamma & \alpha^* \end{pmatrix} \equiv M, \quad (2.41)$$

donde:

$$\alpha = (1 - P_{LZ})e^{-i\zeta_+} - P_{LZ}e^{-i\zeta_-}, \quad (2.42)$$

$$\gamma = \sqrt{P_{LZ}(1 - P_{LZ})} e^{i\theta_S} \left(e^{-i\zeta_+} + e^{-i\zeta_-} \right), \quad (2.43)$$

$$\zeta_+ = \zeta_1 + \zeta_2 + 2\theta_S, \quad (2.44)$$

$$\zeta_- = \zeta_1 - \zeta_2. \quad (2.45)$$

Las siguientes relaciones serán de utilidad en lo que sigue:

$$1 - |\alpha|^2 = 1 - (1 - P_{LZ})^2 - P_{LZ}^2 + P_{LZ}(1 - P_{LZ})(e^{i(\zeta_+ - \zeta_-)} + e^{-i(\zeta_+ - \zeta_-)}) = \\ P_{LZ}(1 - P_{LZ})(2 + e^{i(\zeta_+ - \zeta_-)} + e^{-i(\zeta_+ - \zeta_-)}) = |\gamma|^2, \quad (2.46)$$

$$|\gamma|^2 = 2P_{LZ}(1 - P_{LZ})(1 + \cos(\zeta_+ - \zeta_-)) = \\ 2P_{LZ}(1 - P_{LZ})(1 + \cos(\zeta_+) \cos(\zeta_-) + \text{sen}(\zeta_+) \text{sen}(\zeta_-)), \quad (2.47)$$

$$\text{Im}(\alpha) = P_{LZ} \text{sen}(\zeta_-) - (1 - P_{LZ}) \text{sen}(\zeta_+) \Rightarrow \\ \text{Im}^2(\alpha) = (1 - P_{LZ})^2 \text{sen}^2(\zeta_+) + P_{LZ}^2 \text{sen}^2(\zeta_-) - 2P_{LZ}(1 - P_{LZ}) \text{sen}(\zeta_+) \text{sen}(\zeta_-). \quad (2.48)$$

Para calcular el operador de evolución (2.40), es necesario determinar la n -ésima potencia de (2.41), para lo cual vamos a expresarla en función de una matriz diagonal semejante. Esto puede conseguirse utilizando como matriz de paso la formada por los autovectores de M , en cuyo caso las entradas de la matriz diagonal serán sus autovalores (pues son las coordenadas de toda matriz en la base formada por sus autovectores).

El polinomio característico de M es, en la variable λ :

$$|\gamma|^2 + |\alpha|^2 + \lambda^2 - \lambda(\alpha^* + \alpha) = \lambda^2 - 2\lambda \text{Re}(\alpha) + |\gamma|^2 + |\alpha|^2 = 0 \Leftrightarrow \\ \lambda = \text{Re}(\alpha) \pm \sqrt{\text{Re}^2(\alpha) - |\alpha|^2 - |\gamma|^2} \stackrel{(2.46)}{=} \text{Re}(\alpha) \pm \sqrt{\text{Re}^2(\alpha) - 1}.$$

Luego los autovalores de (2.41) son:

$$\lambda_{1,2} = \operatorname{Re}(\alpha) \pm i\sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(\alpha)}, \quad (2.49)$$

y sus autovectores asociados vienen dados por:

$$\left(\alpha - \operatorname{Re}(\alpha) \mp i\sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(\alpha)} \right) u_{1,2}^\uparrow - \gamma^* u_{1,2}^\downarrow = i \left(\operatorname{Im}(\alpha) \mp \sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(\alpha)} \right) u_{1,2}^\uparrow - \gamma^* u_{1,2}^\downarrow = 0.$$

Dado que la normalización no importa para nuestros intereses actuales, tomamos, por ejemplo $u_{1,2}^\uparrow = 1 \Rightarrow$

$$u_{1,2} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{i}{\gamma^*} \left[\operatorname{Im}(\alpha) \mp \sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(\alpha)} \right] \end{pmatrix}. \quad (2.50)$$

Sea entonces $P = \begin{pmatrix} u_1 & u_2 \end{pmatrix}$ la matriz de paso, cuya inversa es:

$$P^{-1} = \frac{1}{2\sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(\alpha)}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(\alpha)} + \operatorname{Im}(\alpha) & i\gamma^* \\ \sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(\alpha)} - \operatorname{Im}(\alpha) & -i\gamma^* \end{pmatrix}.$$

De esta forma, si D es la matriz diagonal con entradas dadas por (2.49), se verifica: $M^n = (PDP^{-1})^n = PD^nP^{-1}$, por cancelación de los factores $P^{-1}P$ entre términos sucesivos. Denotando $a = \operatorname{Im}(\alpha)$, $b = \sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(\alpha)}$, se tiene entonces que:

$$M^n = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{i}{\gamma^*}(a-b) & \frac{i}{\gamma^*}(a+b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1^n & 0 \\ 0 & \lambda_2^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{a+b}{2b} & \frac{i\gamma^*}{2b} \\ \frac{b-a}{2b} & -\frac{i\gamma^*}{2b} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \lambda_1^n \frac{a+b}{2b} + \lambda_2^n \frac{b-a}{2b} & \frac{i\gamma^*}{2b}(\lambda_1^n - \lambda_2^n) \\ \frac{i}{\gamma^*} \frac{a^2 - b^2}{2b}(\lambda_1^n - \lambda_2^n) & -\frac{\lambda_1^n}{2b}(a-b) + \frac{\lambda_2^n}{2b}(a+b) \end{pmatrix}.$$

Esta expresión es simplificable introduciendo el parámetro:

$$\cos \phi = \operatorname{Re}(\alpha) \Rightarrow \quad (2.51)$$

$$\operatorname{sen} \phi = \sqrt{1 - \operatorname{Re}^2(\alpha)} = \sqrt{1 + \operatorname{Im}^2(\alpha) - |\alpha|^2} \stackrel{(2.46)}{=} \sqrt{|\gamma|^2 + \operatorname{Im}^2(\alpha)}, \quad (2.52)$$

(bien definido pues de (2.46) se deduce que $|\alpha| \leq 1$) que permite expresar (2.49) como: $\lambda_{1,2} = \cos \phi \pm i \operatorname{sen} \phi = e^{\pm i\phi}$ y $b = \operatorname{sen} \phi$. Los elementos de M^n quedan entonces:

▪ $(M^n)_{1,1}$:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2 \operatorname{sen} \phi} \left[e^{in\phi} (\operatorname{sen}(\phi) + \operatorname{Im}(\alpha)) + e^{-in\phi} (\operatorname{sen}(\phi) - \operatorname{Im}(\alpha)) \right] = \\ & \frac{1}{2 \operatorname{sen} \phi} \left[\operatorname{sen}(\phi) 2 \cos(n\phi) + \operatorname{Im}(\alpha) 2i \operatorname{sen}(n\phi) \right] = \cos(n\phi) + i \operatorname{Im}(\alpha) \frac{\operatorname{sen}(n\phi)}{\operatorname{sen}(\phi)}. \end{aligned}$$

▪ $(M^n)_{1,2}$:

$$\frac{i\gamma^*}{2 \operatorname{sen}(\phi)} (e^{in\phi} - e^{-in\phi}) = -\gamma^* \frac{\operatorname{sen}(n\phi)}{\operatorname{sen}(\phi)}.$$

▪ $(M^n)_{2,1}$:

$$\frac{i}{\gamma^*} \frac{\operatorname{Im}^2(\alpha) - \operatorname{sen}^2(\phi)}{2 \operatorname{sen}(\phi)} (e^{in\phi} - e^{-in\phi}) \stackrel{(2.52)}{=} \frac{|\gamma|^2 \operatorname{sen}(n\phi)}{\gamma^* \operatorname{sen}(\phi)} = \gamma \frac{\operatorname{sen}(n\phi)}{\operatorname{sen}(\phi)}.$$

▪ $(M^n)_{2,2}$:

$$\frac{1}{2 \operatorname{sen} \phi} \left[e^{in\phi} (\operatorname{sen}(\phi) - \operatorname{Im}(\alpha)) + e^{-in\phi} (\operatorname{sen}(\phi) + \operatorname{Im}(\alpha)) \right] = \cos(n\phi) - i \operatorname{Im}(\alpha) \frac{\operatorname{sen}(n\phi)}{\operatorname{sen}(\phi)}.$$

Por tanto, en la base adiabática:

$$\begin{aligned} (M)^n &= (NU_2 NU_1)^n \equiv \begin{pmatrix} m_{11} & -m_{21}^* \\ m_{21} & m_{11}^* \end{pmatrix} = \\ & \begin{pmatrix} \cos(n\phi) + i \operatorname{Im}(\alpha) \frac{\operatorname{sen}(n\phi)}{\operatorname{sen}(\phi)} & -\gamma^* \frac{\operatorname{sen}(n\phi)}{\operatorname{sen}(\phi)} \\ \gamma \frac{\operatorname{sen}(n\phi)}{\operatorname{sen}(\phi)} & \cos(n\phi) - i \operatorname{Im}(\alpha) \frac{\operatorname{sen}(n\phi)}{\operatorname{sen}(\phi)} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.53)$$

En la práctica, a falta de estímulo ($\varepsilon = 0$), el sistema se encontrará, en circunstancias estándares, en su estado fundamental. Por ello, vamos a fijar el estado inicial $|\varphi_-, t_1\rangle$, y determinar la probabilidad de encontrar el estado final $|\varphi_+, t\rangle$. El análisis para cualquier otra combinación $|\varphi_{\pm}, t_1\rangle \rightarrow |\varphi_{\pm}, t\rangle$ es totalmente análogo. De esta forma, aplicando (2.53) en (2.40), se distinguen los casos:

1) $t \in$ Zona 1:

$$P_+^I(n) = |\langle \varphi_+, t | \varphi_-, t_1 \rangle|^2 = |\langle \varphi_+, t_1 | \hat{T}^\dagger(t, t_1) | \varphi_-, t \rangle|^2 = |\langle \varphi_-, t | \hat{T}(t, t_1) | \varphi_+, t \rangle^*|^2$$

$$|(U(t, t_1 + nT)M^n)_{2,1}|^2 = \left| e^{i\zeta(t, t_1 + nT)} \gamma \frac{\text{sen}(n\phi)}{\text{sen}(\phi)} \right|^2 = |\gamma|^2 \frac{\text{sen}^2(n\phi)}{\text{sen}^2(\phi)}. \quad (2.54)$$

2) $t \in$ Zona 2:

$$P_+^{II}(n) = |(U(t, t_2 + nT)NU_1M^n)_{1,2}|^2 =$$

$$\left| -m_{21}^* \sqrt{1 - P_{LZ}} e^{-i(\theta_S + \zeta_1 + \zeta(t, t_2 + nT))} - m_{11}^* \sqrt{P_{LZ}} e^{i(\zeta_1 - \zeta(t, t_2 + nT))} \right|^2 =$$

$$|m_{21}|^2 (1 - P_{LZ}) + |m_{11}|^2 P_{LZ} + \sqrt{P_{LZ}(1 - P_{LZ})} W \equiv p + \sqrt{P_{LZ}(1 - P_{LZ})} W ,$$

con $W = \left(m_{21} m_{11}^* e^{i(\theta_S + 2\zeta_1)} + m_{21}^* m_{11} e^{-i(\theta_S + 2\zeta_1)} \right)$. Para simplificar esta expresión, será necesario un poco de álgebra. Vamos por partes:

- $|m_{11}|^2 = \cos^2(n\phi) + \text{Im}^2(\alpha) \frac{\text{sen}^2(n\phi)}{\text{sen}^2(\phi)} = \cos(2n\phi) + \text{sen}^2(n\phi) + \text{Im}^2(\alpha) \frac{\text{sen}^2(n\phi)}{\text{sen}^2(\phi)}.$
- $p = P_{LZ} \cos(2n\phi) + \left[|\gamma|^2 (1 - P_{LZ}) + P_{LZ} (\text{Im}^2(\alpha) + \text{sen}^2(\phi)) \right] \frac{\text{sen}^2(n\phi)}{\text{sen}^2(\phi)} \stackrel{(2.52)}{=} P_{LZ} \cos(2n\phi) + \left[|\gamma|^2 + 2 \text{Im}^2(\alpha) P_{LZ} \right] \frac{\text{sen}^2(n\phi)}{\text{sen}^2(\phi)}.$
- $m_{21} m_{11}^* = \gamma \frac{\text{sen}(2n\phi)}{2 \text{sen}(\phi)} - i\gamma \text{Im}(\alpha) \frac{\text{sen}^2(n\phi)}{\text{sen}^2(\phi)} = \left[\gamma^* \frac{\text{sen}(2n\phi)}{2 \text{sen}(\phi)} + i\gamma^* \text{Im}(\alpha) \frac{\text{sen}^2(n\phi)}{\text{sen}^2(\phi)} \right]^*$
 $= m_{21}^* m_{11} .$
- $Q \equiv \gamma e^{i(\theta_S + 2\zeta_1)} \stackrel{(2.43)}{=} \stackrel{(2.45)}{=} \sqrt{P_{LZ}(1 - P_{LZ})} (e^{i\zeta_+} + e^{i\zeta_-}) .$
- $W = \frac{\text{sen}(2n\phi)}{\text{sen}(\phi)} \text{Re}(Q) + 2 \frac{\text{sen}^2(n\phi)}{\text{sen}^2(\phi)} \text{Im}(\alpha) \text{Im}(Q) \stackrel{(2.48)}{\implies} \sqrt{P_{LZ}(1 - P_{LZ})} W =$
 $\frac{\text{sen}(2n\phi)}{\text{sen}(\phi)} P_{LZ} (1 - P_{LZ}) (\cos(\zeta_+) + \cos(\zeta_-)) + \frac{\text{sen}^2(n\phi)}{\text{sen}^2(\phi)} 2P_{LZ} (1 - P_{LZ}) [P_{LZ} \text{sen}^2(\zeta_-)$
 $- (1 - P_{LZ}) \text{sen}^2(\zeta_+) - (1 - 2P_{LZ}) \text{sen}(\zeta_+) \text{sen}(\zeta_-)] .$

- $\cos(\zeta_+) + \cos(\zeta_-) = 2 \cos\left(\frac{\zeta_+ + \zeta_-}{2}\right) \cos\left(\frac{\zeta_+ - \zeta_-}{2}\right) = 2 \cos(\zeta_1 + \theta_S) \cos(\zeta_2 + \theta_S)$.
- Reuniendo las expresiones para p y W , junto a (2.47) y (2.48) se tiene, para el término que acompaña a $\frac{\text{sen}^2(n\phi)}{\text{sen}^2(\phi)}$ en $P_+^I(n)$, que denominamos $2Q_1$:

$$\begin{aligned} & \text{sen}^2(\zeta_+) [2P_{LZ}(1 - P_{LZ})^2 - 2P_{LZ}(1 - P_{LZ})^2] + \text{sen}^2(\zeta_-)[2P_{LZ}^3 + 2P_{LZ}^2(1 - P_{LZ})] \\ & + \text{sen}(\zeta_+) \text{sen}(\zeta_-)[2P_{LZ}(1 - P_{LZ}) - 4P_{LZ}^2(1 - P_{LZ}) - 2P_{LZ}(1 - P_{LZ})(1 - 2P_{LZ})] \\ & + 2P_{LZ}(1 - P_{LZ})(1 + \cos(\zeta_+) \cos(\zeta_-)) \Rightarrow \end{aligned}$$

$$Q_1 = P_{LZ}^2 \text{sen}^2(\zeta_-) + P_{LZ}(1 - P_{LZ})(1 + \cos(\zeta_+) \cos(\zeta_-)). \quad (2.55)$$

Y para el término que acompaña a $\frac{\text{sen}(2n\phi)}{\text{sen}(\phi)}$, que denominamos Q_2 ; utilizando el ítem anterior a éste se tiene:

$$Q_2 = 2P_{LZ}(1 - P_{LZ}) \cos(\zeta_1 + \theta_S) \cos(\zeta_2 + \theta_S). \quad (2.56)$$

Por tanto, la probabilidad con el estado final en la zona 2 es:

$$P_+^{II}(n) = 2Q_1 \frac{\text{sen}^2(n\phi)}{\text{sen}^2(\phi)} + Q_2 \frac{\text{sen}(2n\phi)}{\text{sen}(\phi)} + P_{LZ} \cos(2n\phi). \quad (2.57)$$

Nótese que la dependencia temporal de (2.54) y (2.57) es a través de $n = \lfloor (t - t_1)/T \rfloor$, con lo que se trata de funciones continuas en las regiones adiabáticas entre cruces (zonas 1 y 2), presentando discontinuidades de salto en éstos (recordar que la probabilidad de interés va alternando entre P_+^I y P_+^{II} tras pasar cada cruce, y ambas son, en general, distintas). Este comportamiento está en perfecto acuerdo con la descripción del modelo de impulso adiabático, en la cual la población de los niveles puede variar exclusivamente en los cruces.

Para un número suficientemente elevado de periodos, resulta razonable tratar la variable n como continua, y obtener el promedio de las probabilidades anteriores. Recordando que $\overline{\text{sen}^2} = 1/2$, $\overline{\text{sen}} = \overline{\cos} = 0$; y usando (2.52), se tiene:

$$\overline{P_+^I} = \frac{1}{2} \frac{|\gamma|^2}{|\gamma|^2 + \text{Im}^2(\alpha)}, \quad (2.58)$$

$$\overline{P_+^{II}} = \frac{Q_1}{|\gamma|^2 + \text{Im}^2(\alpha)}. \quad (2.59)$$

Teniendo en cuenta el recorrido de los parámetros que se desprende de (2.46) ($|\alpha|^2$, $|\gamma|^2 < 1$), se observa que \overline{P}_+^I es máxima, con valor $1/2$, si y sólo si $\text{Im}(\alpha) = 0$. Esta circunstancia se conoce como **condición de resonancia**, la cual podemos expresar haciendo uso de (2.48) como:

$$(1 - P_{LZ}) \text{sen}(\zeta_+) - P_{LZ} \text{sen}(\zeta_-) = 0. \quad (2.60)$$

Obsérvese que \overline{P}_+^I y \overline{P}_+^{II} pueden relacionarse entre sí a través de la condición de resonancia. En efecto, de (2.47) y (2.55) se sigue:

$$\begin{aligned} |\gamma|^2 = & 2Q_1 + 2P_{LZ}(1 - P_{LZ}) \text{sen}(\zeta_+) \text{sen}(\zeta_-) - 2P_{LZ}^2 \text{sen}^2(\zeta_-) = \\ & 2Q_1 + 2P_{LZ} \text{sen}(\zeta_-)[(1 - P_{LZ}) \text{sen}(\zeta_+) - P_{LZ} \text{sen}(\zeta_-)]. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Por ello, cuando se verifica la condición de resonancia, se tiene: $|\gamma|^2 = 2Q_1 \Rightarrow \overline{P}_+^I = \overline{P}_+^{II} = 1/2$. Con lo que, en resonancia, la probabilidad de encontrar al sistema en el nivel superior no depende, en promedio, de la zona del periodo final.

El papel de las fases dinámicas, adquiridas por el sistema durante los tránsitos adiabáticos, es trascendental en su evolución, como se puede apreciar en las expresiones de probabilidad y condición de resonancia.

2.3.4. Límite de Cruce Lento

Consideremos el caso límite $v \ll \Delta^2$, $\delta \gg 1$, $P_{LZ} \ll 1$, $1 - P_{LZ} \approx 1$. Esta situación es, a priori, la más cercana a mantener las poblaciones de los niveles energéticos y, en consecuencia, respetar el teorema adiabático durante la totalidad de la evolución del sistema.

Veamos primero qué forma adopta la fase de Stokes (2.38). Para ello notemos que, como para cualquier número complejo; $\ln \Gamma(x) = \ln(|\Gamma(x)| e^{i \arg \Gamma(x)}) = \ln(|\Gamma(x)|) + i \arg \Gamma(x) \Rightarrow \text{Im}(\ln \Gamma(x)) = \arg(\Gamma(x))$. Dado que $\delta \gg 1$ y $|\arg(1 - i\delta)| \approx \pi/2 < \pi$, se tiene (ec. 8.327-3 [Gradshteyn]):

$$\ln(\Gamma(1 - i\delta)) \approx \left(\frac{1}{2} - i\delta\right) \ln(1 - i\delta) - 1 + i\delta + \frac{1}{2} \ln(2\pi) = \left(\frac{1}{2} - i\delta\right) [\ln(\sqrt{1 + \delta^2}) +$$

$$i \arg(1 - i\delta)] - 1 + i\delta + \frac{1}{2} \ln(2\pi) \approx \left(\frac{1}{2} - i\delta\right) \left[\ln(\delta) - i\frac{\pi}{2}\right] - 1 + i\delta + \frac{1}{2} \ln(2\pi) \Rightarrow$$

$$\text{Im}(\ln \Gamma(1 - i\delta)) = \arg(\Gamma(1 - i\delta)) \approx -\delta(\ln(\delta) - 1) - \frac{\pi}{4},$$

con lo que:

$$\theta_S \approx 0. \quad (2.62)$$

Por otra parte, la condición de resonancia (2.60) adopta entonces la forma:

$$(1 - P_{LZ}) \operatorname{sen}(\zeta_+) \approx 0 \Rightarrow \zeta_+ \stackrel{(2.62)}{=} \zeta_1 + \zeta_2 = k\pi, \forall k \in \mathbb{Z}. \quad (2.63)$$

De acuerdo a (2.61), la diferencia entre $|\gamma|^2$ y $2Q_1$, y por tanto entre (2.58) y (2.59); decrece conforme lo hace P_{LZ} , con lo cual resulta razonable en el límite de cruce lento considerar, por simplicidad, que $\overline{P}_+^I = \overline{P}_+^{II} \equiv \overline{P}_+$. Despreciando los términos P_{LZ}^{m+1} frente a aquéllos P_{LZ}^m , $\forall m \in \mathbb{N}_0$ en las expresiones (2.48) y (2.55), e introduciéndolas en (2.59) ó equivalentemente (2.58):

$$\overline{P}_+ = \frac{Q_1}{|\gamma|^2 + 2Q_1} \approx \frac{P_{LZ}(1 + \cos(\zeta_+) \cos(\zeta_-))}{\operatorname{sen}^2(\zeta_+) + 2P_{LZ}(1 + \cos(\zeta_+) \cos(\zeta_-))}, \quad (2.64)$$

que es la fórmula de la probabilidad promedio de tránsito $|\varphi_- \rangle \rightarrow |\varphi_+ \rangle$ al cabo del tiempo, en condiciones de $P_{LZ} \ll 1$. A primera vista parece depender de 4 variables o parámetros con dimensiones de frecuencia (A , ε_0 , ω y Δ) a través de P_{LZ} , ζ_+ y ζ_- (o equivalentemente de δ , ζ_1 y ζ_2), pero esta dependencia puede simplificarse a las 3 variables adimensionales $A^* = A/\Delta$, $\varepsilon_0^* = \varepsilon_0/\Delta$ y $\omega^* = \omega/\Delta$, ya que podemos expresar las variables intermedias como:

$$\delta = \frac{1}{4\omega^* \sqrt{(A^*)^2 - (\varepsilon_0^*)^2}},$$

$$\zeta_1 = \frac{\Delta}{2} \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{1 + \frac{\varepsilon^2(t)}{\Delta^2}} dt = \left(\begin{array}{l} s = \omega t \\ ds = \omega dt \end{array} \right) \frac{1}{2\omega^*} \int_{-\operatorname{arc\,sen}(\varepsilon_0^*/A^*)}^{\operatorname{arc\,sen}(\varepsilon_0^*/A^*)+\pi} \sqrt{1 + (\varepsilon_0^* + A^* \operatorname{sen}(s))^2} ds,$$

$$\zeta_2 = \frac{1}{2\omega^*} \int_{\operatorname{arc\,sen}(\varepsilon_0^*/A^*)+\pi}^{-\operatorname{arc\,sen}(\varepsilon_0^*/A^*)+2\pi} \sqrt{1 + (\varepsilon_0^* + A^* \operatorname{sen}(s))^2} ds.$$

Por otra parte, se aprecia en (2.64) que la condición de resonancia (2.63) implica un valor maximal de $\overline{P}_+ = 1/2$, al igual que en el caso general de la sección 2.3.3. Además, dicha probabilidad es mínima cuando:

$$\cos(\zeta_+) \cos(\zeta_-) = -1, \quad (2.65)$$

en cuyo caso $\overline{P}_+ = 0$. Ésta es la condición de interferencia destructiva en el límite que nos ocupa. Debe señalarse que la condición de resonancia (2.63) es necesaria, pero no suficiente, para que (2.64) alcance un máximo, dado que podría verificarse simultáneamente (2.65); lo cual anularía la probabilidad.

Dado el impacto que la resonancia tiene en la dinámica del sistema, sería de gran interés obtener una expresión analítica de la condición de resonancia en función de A , ε_0 y ω ; que son los parámetros controlables del problema. Desafortunadamente, en el caso

general esto no va a ser posible, debido a que ζ_1 y ζ_2 son integrales elípticas, en la que los parámetros anteriores intervienen en los límites de integración así como, junto a Δ , en el integrando; con lo cual (2.63) sólo proporciona una relación implícita a evaluar numéricamente. Sin embargo, existen dos situaciones en las que es posible obtener una expresión más sencilla:

- $\varepsilon_0 = 0$: Por (2.4); $t_1 = 0$, $t_2 = \pi/\omega$, con lo que por periodicidad de (2.2), se deduce de (2.15) y (2.11) que $\zeta_1 = \zeta_2$, donde:

$$\zeta_1 = \frac{1}{2} \int_0^{\pi/\omega} \sqrt{\Delta^2 + A^2 \sin^2(\omega t)} dt = \left(\begin{array}{l} x = \omega t \\ dx = \omega dt \end{array} \right) \frac{\Delta}{2\omega} \int_0^\pi \sqrt{1 + \frac{A^2}{\Delta^2} \sin^2(x)} dx \stackrel{(1)}{=}$$

$$\frac{\Delta}{\omega} \int_0^{\pi/2} \sqrt{\left(1 + \frac{A^2}{\Delta^2}\right) - \frac{A^2}{\Delta^2} \cos^2(x)} dx = \left(\begin{array}{l} \alpha = \pi/2 - x \\ d\alpha = -dx \end{array} \right)$$

$$\frac{\sqrt{\Delta^2 + A^2}}{\omega} \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - \frac{A^2}{\Delta^2 + A^2} \sin^2(\alpha)} d\alpha \stackrel{(2)}{=} \frac{\sqrt{\Delta^2 + A^2}}{\omega} E \left(\sqrt{\frac{A^2}{\Delta^2 + A^2}} \right),$$

donde:

- (1) El integrando presenta simetría par respecto a $x = \pi/2$.
- (2) E es la integral elíptica completa de 2ª especie (ec. 8.111-3 y 8.112-2 [Gradshteyn]).

Recordando (2.16), podemos aproximar: $E \left(\sqrt{\frac{A^2}{\Delta^2 + A^2}} \right) \approx E(1) = 1$, por su definición. Por tanto, la condición de resonancia toma la forma:

$$\zeta_+ = 2\zeta_1 \approx \frac{2A}{\omega} = k\pi \Rightarrow A = \omega \frac{k\pi}{2}, \forall k \in \mathbb{Z}. \quad (2.66)$$

- $\Delta \ll \varepsilon_0$: En este caso el factor Δ^2 en $\Omega(t)$ es apenas relevante para el valor de la integral, con lo que:

$$\zeta_1 \approx \frac{1}{2} \int_{t_1}^{t_2} |\varepsilon(t)| dt \stackrel{(2.4)}{=} \frac{1}{2} \int_{t_1}^{t_2} \varepsilon(t) dt = \frac{\varepsilon_0}{2} (t_2 - t_1) - \frac{A}{2\omega} (\cos(\omega t_2) - \cos(\omega t_1)) = \frac{\varepsilon_0}{2\omega}$$

$$\left[\pi + 2 \arcsen \left(\frac{\varepsilon_0}{A} \right) \right] + \frac{A}{\omega} \cos \left(\arcsen \left(\frac{\varepsilon_0}{A} \right) \right) = \frac{\pi \varepsilon_0}{\omega} - \frac{\varepsilon_0}{\omega} \arccos \left(\frac{\varepsilon_0}{A} \right) + \frac{\sqrt{A^2 - \varepsilon_0^2}}{\omega},$$

donde se ha utilizado que $\arcsen(x) = \pi/2 - \arccos(x)$. Análogamente para la fase

en la zona 2, teniendo en cuenta que en esta región $\varepsilon(t)$ es negativo:

$$\zeta_2 \approx -\frac{1}{2} \int_{t_2}^{t_1+T} \varepsilon(t) dt = -\frac{\varepsilon_0}{2\omega} \left(\pi - 2 \arcsen \left(\frac{\varepsilon_0}{A} \right) \right) + \frac{A}{\omega} \cos \left(\arcsen \left(\frac{\varepsilon_0}{A} \right) \right) =$$

$$-\frac{\varepsilon_0}{\omega} \arccos \left(\frac{\varepsilon_0}{A} \right) + \frac{\sqrt{A^2 - \varepsilon_0^2}}{\omega}.$$

Por tanto, la condición de resonancia toma la forma:

$$\zeta_+ = \frac{\pi\varepsilon_0}{\omega} - \frac{2\varepsilon_0}{\omega} \arccos \left(\frac{\varepsilon_0}{A} \right) + \frac{2\sqrt{A^2 - \varepsilon_0^2}}{\omega} = k\pi, \quad \forall k \in \mathbb{Z}. \quad (2.67)$$

De ambos casos, el primero es evidentemente el más satisfactorio, pues constituye una relación sencilla entre los parámetros A y ω , fijado $\varepsilon_0 = 0$. El segundo caso no supone una mejoría tan remarcable respecto a la situación general; pero, aunque no proporciona una expresión explícita para el tercer parámetro (fijados los otros dos), al menos no requiere la computación de ninguna integral elíptica.

El caso de offset nulo permite analizar analíticamente el patrón de interferencias de forma sencilla. Fijado ω lo suficientemente pequeño para verificar el límite $v \ll \Delta^2$, que en este caso se reduce a $A\omega \ll \Delta^2$; por (2.66), los máximos de probabilidad se darán cuando A valga un múltiplo entero de $\omega\pi/2$, mientras que por (2.65) la condición de mínimo es (dado que $\zeta_- = \zeta_1 - \zeta_2 = 0$): $\zeta_+ = (2k+1)\pi$, $\forall k \in \mathbb{Z}$. Luego, utilizando que $\zeta_1 \approx A/\omega$:

$$\overline{P}_+(A, \varepsilon_0 = 0) \approx \begin{cases} \text{máx}(\overline{P}_+) = \frac{1}{2} \Leftrightarrow A = \omega \frac{k\pi}{2}, \quad \forall k \in \mathbb{Z} \\ \text{mín}(\overline{P}_+) = 0 \Leftrightarrow A = \omega \frac{\pi}{2} (2k+1), \quad \forall k \in \mathbb{Z}. \end{cases} \quad (2.68)$$

En las figuras 2.4 y 2.5 se muestra un ejemplo numérico de la dependencia de la probabilidad promedio de transición sin offset frente a A/Δ , con $\omega/\Delta = 0,05$. El límite de aplicabilidad de (2.64) viene dado por el de la condición de cruce lento: $A\omega/\Delta^2 \approx 1$, con lo que debe ser aproximadamente $A/\Delta < 20$. Por otra parte, por (2.16), para que el método de impulso adiabático sea válido en este caso, debe ser al menos $A/\Delta > 1$. De hecho, dado que en la deducción de las expresiones (2.68), cuyo significado queremos ilustrar gráficamente, se utilizó que $A \gg \Delta$; deberíamos tomar una región donde se tenga al menos $A/\Delta > 10$. Teniendo esto en cuenta, se muestra en la figura 2.5 una vista ampliada de la figura 2.4, con las divisiones del eje horizontal adaptadas a (2.68) (corresponden a un rango de aproximadamente $11 < A/\Delta < 12$). En ella se aprecia que los picos (valles, resp.) de probabilidad coinciden aproximadamente con los múltiplos pares (impares, resp.) de $\omega\pi/2$, como es de esperar. En la regiones $A/\Delta \in (0, 1) \cup (20, \infty)$, el modelo en el límite lento deja de ser fiable; y en la región complementaria a ésta, donde sí esperamos que lo sea, se aprecian comportamientos que no concuerdan con (2.68) en ciertas partes (como los máximos reducidos en $A/\Delta < 10$ o los elevados mínimos en $A/\Delta > 15$). Este ejemplo, correspondiente a las circunstancias más sencillas posibles, pone de manifiesto

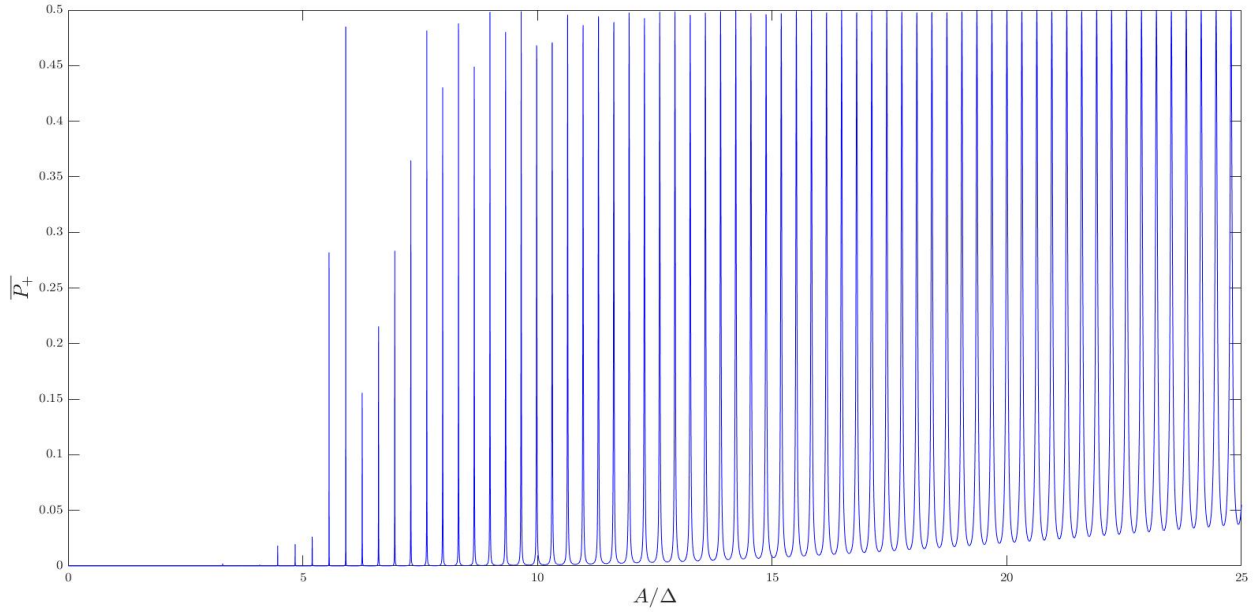


Figura 2.4: \overline{P}_+ frente a A/Δ , con $\varepsilon_0 = 0$, $\omega/\Delta = 0,05$.
Se ha utilizado (2.64) con (2.62), calculando ζ_1 y ζ_2 numéricamente para una hilera de valores A/Δ .

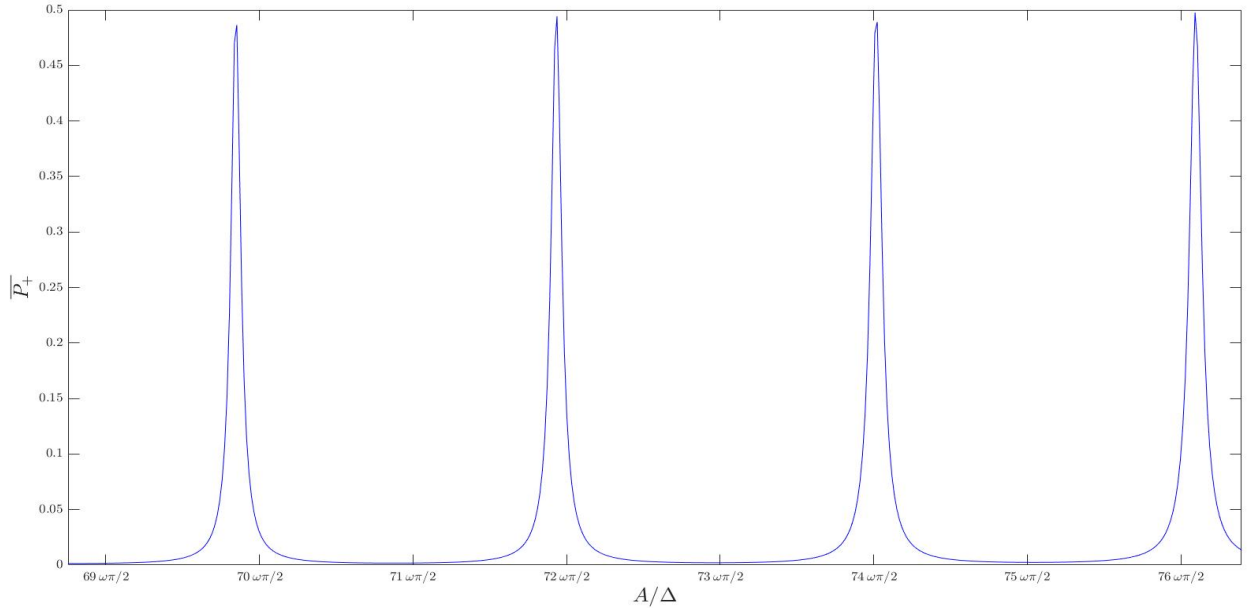


Figura 2.5: Idem a la figura 2.4, ampliada.

la dificultad de analizar analíticamente la probabilidad de tránsito.

Sin embargo, podemos determinar numéricamente el comportamiento de \overline{P}_+ en función de la amplitud y el offset, fijada la razón ω/Δ . A este efecto, se presenta en las figuras (2.6), (2.7) y (2.8) un mapeado de dicha probabilidad sobre el plano $A/\Delta - \varepsilon_0/\Delta$, donde el código de colores indica su valor. El valor ω/Δ determina en cada caso las regiones de aplicabilidad del límite de cruce lento (o equivalentemente, de (2.64), que es la expresión

representada) a través de (por (2.6)) $\sqrt{(A/\Delta)^2 - (\varepsilon_0/\Delta)^2} < \Delta/\omega$; y del propio modelo de impulso adiabático, a través de (por (2.16)) $\sqrt{(A/\Delta)^2 - (\varepsilon_0/\Delta)^2} > 1$. Luego los resultados presentados en estas figuras son significativos (en el sentido de que la probabilidad representada debería ajustarse a la real) en la región dada aproximadamente por:

$$1 < \sqrt{\left(\frac{A}{\Delta}\right)^2 - \left(\frac{\varepsilon_0}{\Delta}\right)^2} < \frac{\Delta}{\omega},$$

que es la comprendida entre las dos curvas rojas.

Obsérvese que la hipótesis $A > \varepsilon_0$, que impusimos precisamente al principio del presente capítulo, es imprescindible para el análisis efectuado (de otra forma, P_{LZ} sería un número complejo, entre otras consecuencias); por lo que la región $A \leq \varepsilon_0$ ha sido ignorada.

En todos los casos se observa que la condición de resonancia (2.63) y la de interferencia destructiva (2.65) forman arcos intercalados alrededor del origen. Además, aumentar la amplitud a offset constante supone alternar máximos y mínimos de probabilidad (globales o locales, en función del offset fijado), tal como muestra la recta vertical negra de la figura (2.7). Por otra parte, se aprecia que la anchura de las zonas de máxima probabilidad es directamente proporcional a ω/Δ , al igual que el periodo de los ciclos de \overline{P}_+ frente a A con ε_0 constante; mientras que el tamaño de la región de validez (comprendida entre las dos curvas rojas) es inversamente proporcional a ω/Δ ; lo cual es consecuencia de la violación de la hipótesis del límite de cruce lento.

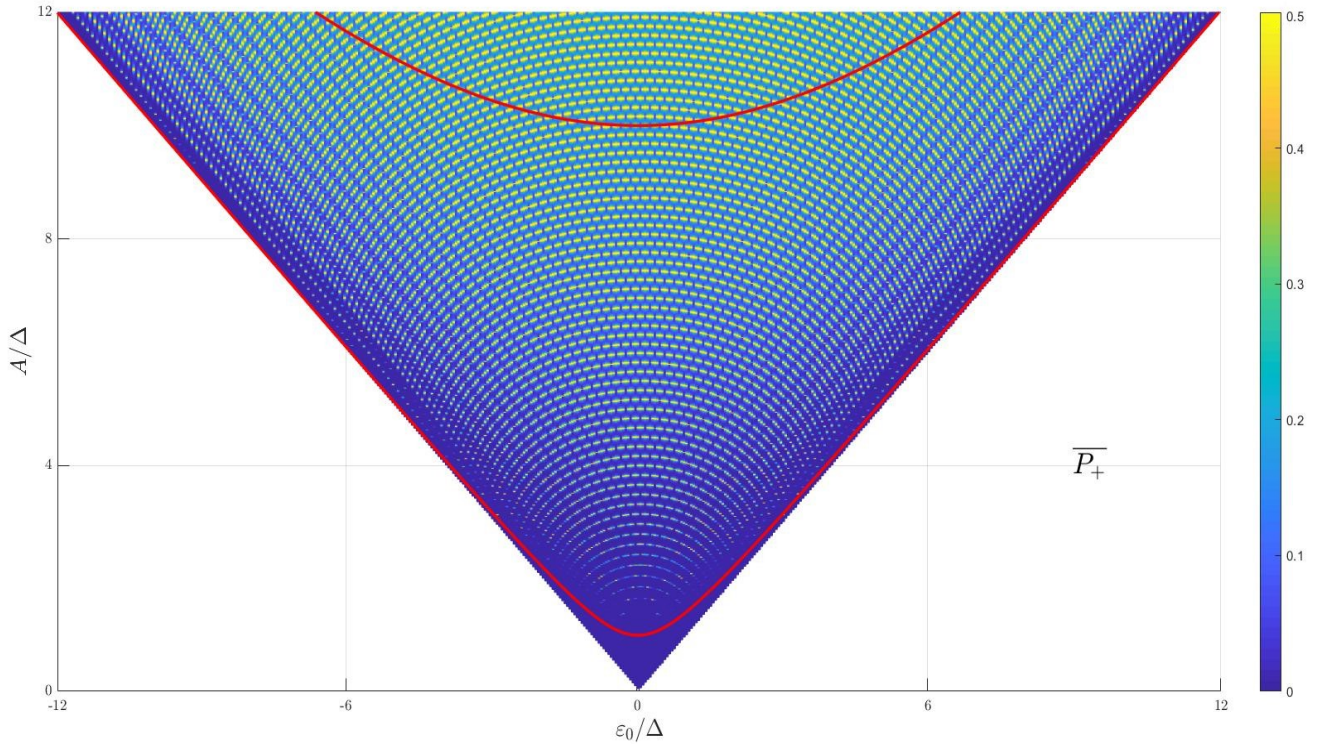


Figura 2.6: \overline{P}_+ (2.64) frente a A/Δ y ε_0/Δ , con $\omega/\Delta = 0,1$ y $\theta_S = 0$ (2.62).

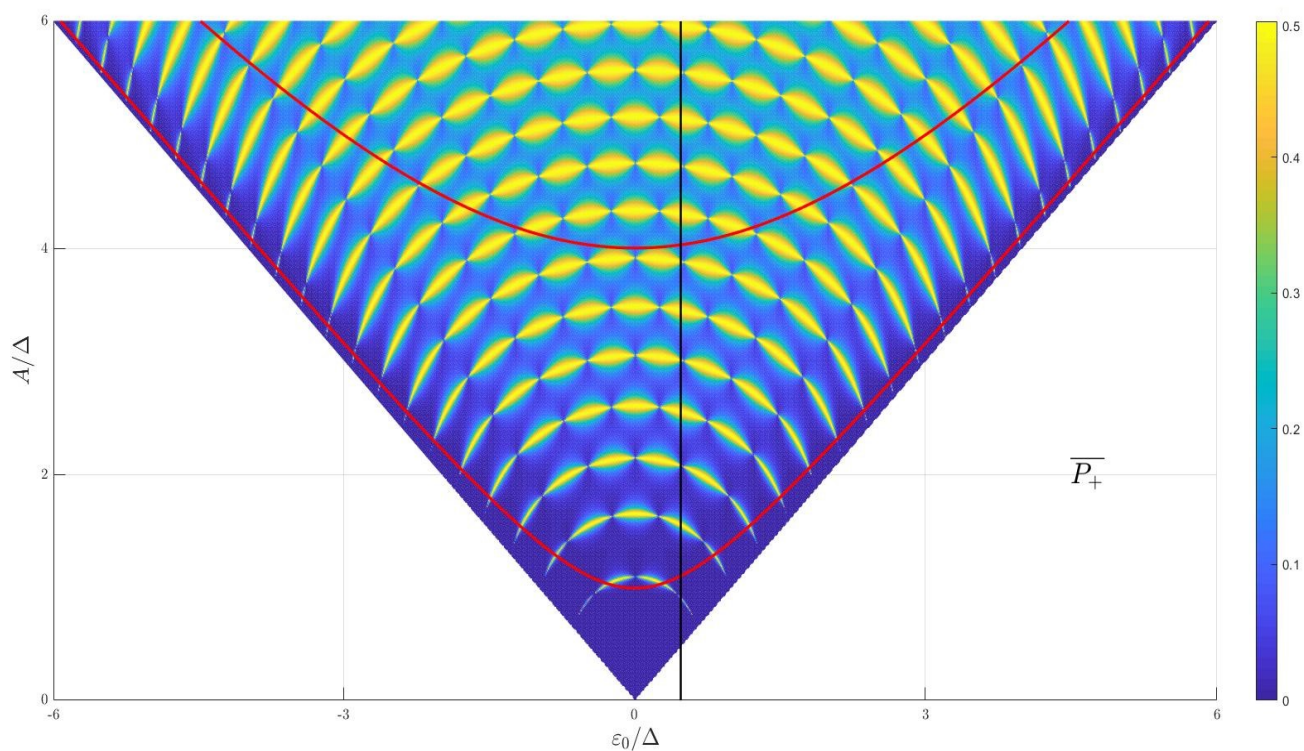


Figura 2.7: \overline{P}_+ (2.64) frente a A/Δ y ε_0/Δ , con $\omega/\Delta = 0,25$ y $\theta_S = 0$ (2.62).

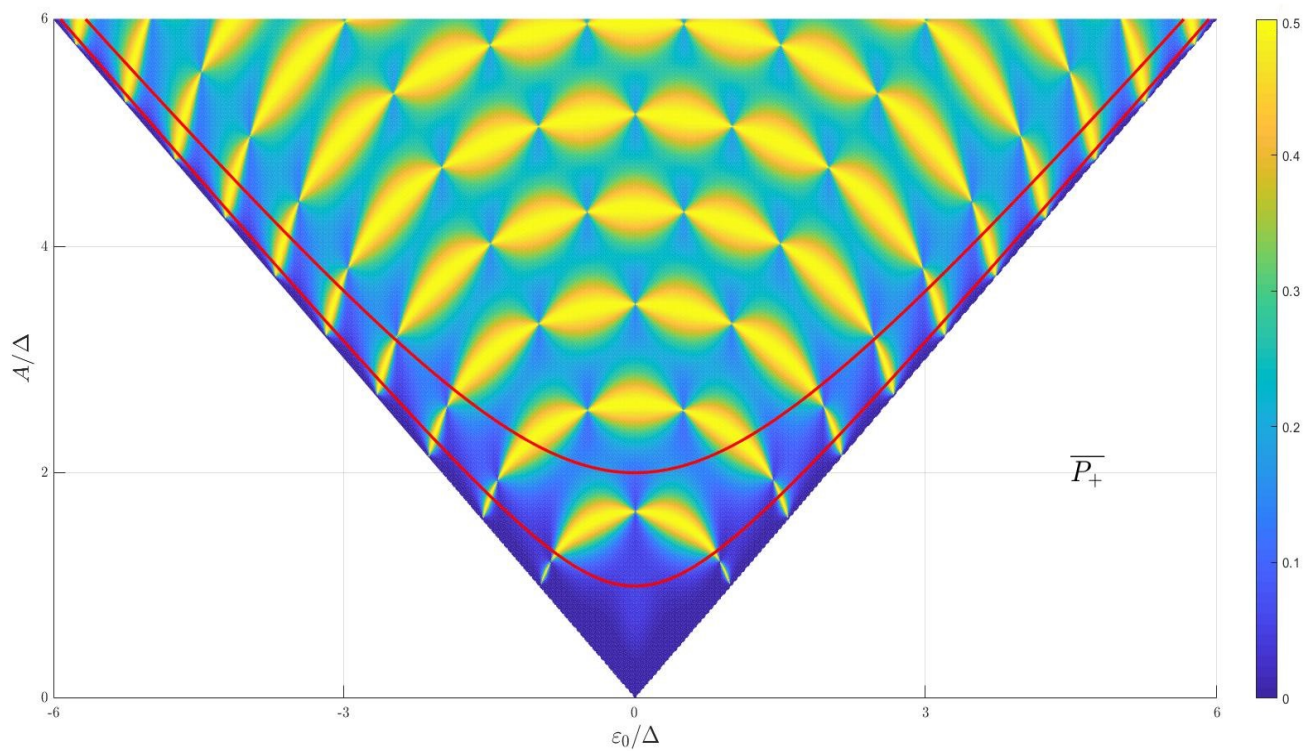


Figura 2.8: \overline{P}_+ (2.64) frente a A/Δ y ε_0/Δ , con $\omega/\Delta = 0,5$ y $\theta_S = 0$ (2.62).

Capítulo 3

Altas Frecuencias

3.1. Planteamiento

Consideremos el operador (1.1) con el estímulo (1.3), esto es:

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = -\frac{\Delta\hbar}{2}\hat{\tau}_x - \frac{\varepsilon_0 + A\cos(\omega t)}{2}\hbar\hat{\tau}_z. \quad (3.1)$$

Vamos a aplicar un tratamiento alternativo al del capítulo 2 con el mismo objetivo: obtener la probabilidad de encontrar al sistema de dos niveles en un estado final $|\varphi_{\uparrow\downarrow}, t\rangle$ habiendo partido de uno inicial $|\varphi_{\uparrow\downarrow}, t_0\rangle$. Señalar que se empleará únicamente la base diabática, pues la adiabática es una construcción de utilidad más específica en el contexto del modelo de impulso adiabático. En la base diabática no existe una ordenación energética inequívoca para todo instante de tiempo, con lo que se suele adoptar el convenio de llamar estado fundamental a $|\varphi_{\uparrow}\rangle$ si $\varepsilon_0 > 0$, ó $|\varphi_{\downarrow}\rangle$ si $\varepsilon_0 < 0$, según el nivel que quede por debajo cuando se anula la parte temporal de $\varepsilon(t)$ de acuerdo a la figura 2.1. En cualquier caso, veremos en el tema 4 que la probabilidad de transición entre estados de la base diabática es simétrica bajo permutación de los estados inicial y final, salvo en el caso especial de la sección 3.3.

Este nuevo método se basará en una aproximación, denominada de onda rotatoria (ó RWA), que aparece en ciertas ramas de la física (particularmente, la óptica cuántica) y es adecuada para tratar con frecuencias elevadas. Por ello, nos restringimos en el presente capítulo a la región de parámetros:

$$\omega \gg \Delta, \quad (3.2)$$

que es parecida a la dada por el límite de cruce rápido (en el que $v \gg \Delta^2 \Rightarrow \omega \gg \Delta/\sqrt{(A/\Delta)^2 - (\varepsilon_0/\Delta)^2}$). Aceptar esta aproximación permite resolver la ecuación de Schrödinger analíticamente para cualquier $t > t_0$ con relativa facilidad matemática, de lo cual se obtiene toda la información acerca de la evolución del sistema.

Por simplicidad en los cálculos, vamos a considerar $t_0 = 0 \Rightarrow \varepsilon(t_0) = \varepsilon_0 + A$.

3.2. Aproximación de Onda Rotatoria

Consideremos un estado $|\psi, t\rangle$ del sistema, solución por tanto de la ecuación de Schrödinger con el hamiltoniano (3.1):

$$i\hbar \hat{\partial}_t |\psi, t\rangle = \hat{\mathcal{H}}(t) |\psi, t\rangle . \quad (3.3)$$

Vamos a aplicar una transformación unitaria para modificar la dependencia temporal en (3.1), que se localiza en la componente z del vector de Pauli; con lo que dicha transformación debe tener la forma:

$$\hat{U}_i(t) = e^{i\phi(t)\hat{\tau}_z} , \quad (3.4)$$

con $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ a determinar. De esta forma, la función de onda se modifica como:

$$|\psi', t\rangle = \hat{U}_i(t) |\psi, t\rangle , \quad (3.5)$$

con lo que la ecuación de Schrödinger que ésta satisface es:

$$\begin{aligned} i\hbar \hat{\partial}_t |\psi', t\rangle &= -\hbar\dot{\phi}(t)\hat{\tau}_z |\psi', t\rangle + \hat{U}_i(t) i\hbar \hat{\partial}_t |\psi, t\rangle \stackrel{(3.3)}{=} \left[-\hbar\dot{\phi}(t)\hat{\tau}_z + \hat{U}_i(t)\hat{\mathcal{H}}(t)\hat{U}_i^\dagger(t) \right] |\psi', t\rangle \\ &\equiv \hat{\mathcal{H}}'(t) |\psi', t\rangle , \end{aligned} \quad (3.6)$$

siendo el nuevo hamiltoniano:

$$\hat{\mathcal{H}}'(t) \stackrel{(A.6)}{=} -\hbar\dot{\phi}(t)\hat{\tau}_z - \frac{\hbar\Delta}{2} e^{i\phi(t)\hat{\tau}_z} \hat{\tau}_x e^{-i\phi(t)\hat{\tau}_z} - \frac{\hbar\varepsilon(t)}{2} \hat{\tau}_z .$$

Tomamos, por tanto;

$$\dot{\phi}(t) = -\frac{\varepsilon(t)}{2} \Rightarrow \phi(t) = -\frac{1}{2} \int_0^t [\varepsilon_0 + A \cos(\omega s)] ds = -\frac{\varepsilon_0}{2} t - \frac{A}{2\omega} \text{sen}(\omega t) . \quad (3.7)$$

En consecuencia, utilizando (A.2) se obtiene el operador:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}'(t) &\stackrel{(A.7)}{=} -\frac{\hbar\Delta}{4} \left[e^{-i(\varepsilon_0 t + \frac{A}{\omega} \text{sen}(\omega t))} \hat{\tau}_+ + e^{i(\varepsilon_0 t + \frac{A}{\omega} \text{sen}(\omega t))} \hat{\tau}_- \right] \\ &= -\frac{\hbar\Delta}{4} \sum_{n \in \mathbb{Z}} J_n \left(\frac{A}{\omega} \right) \left[e^{-i(\varepsilon_0 + n\omega)t} \hat{\tau}_+ + e^{i(\varepsilon_0 + n\omega)t} \hat{\tau}_- \right] , \end{aligned} \quad (3.8)$$

donde se ha utilizado ec. 8.511-4 [Gradshteyn]:

$$\begin{aligned} \forall x, \theta \in \mathbb{R}; e^{ix \cos(\theta)} &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} i^n J_n(x) e^{in\theta} \xrightarrow{\theta \rightarrow \theta - \pi/2} e^{ix \sin(\theta)} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} i^n J_n(x) e^{in\theta} e^{-in\frac{\pi}{2}} \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} J_n(x) e^{in\theta} \left(i e^{-i\frac{\pi}{2}} \right)^n = \sum_{n \in \mathbb{Z}} J_n(x) e^{in\theta}, \end{aligned}$$

siendo $J_n(x)$ la función de Bessel de primera especie y orden n :

$$\begin{aligned} J_n(x) : \mathbb{C} \times \mathbb{C} &\longrightarrow \mathbb{C} \\ (n, x) &\longmapsto \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l! \Gamma(l+n+1)} \left(\frac{x}{2} \right)^{2l+n}, \end{aligned}$$

que toma valores reales en la restricción $n, x \in \mathbb{R}$ (por hacerlo la función gamma), con lo que conjugando: $e^{-ix \sin(\theta)} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} J_n(x) e^{-in\theta}$.

Para cada $m \in \mathbb{Z}$, definimos la **frecuencia de sintonía** como:

$$\delta\omega_m = \varepsilon_0 - m\omega. \quad (3.9)$$

Sea $k = k(\varepsilon_0, \omega) \in \mathbb{Z}$, al cual denominamos **modo k** , tal que $|\delta\omega_k| = \min_{n \in \mathbb{Z}} |\delta\omega_n|$. Separando del sumatorio el término $n = -k$ y empleando la relación $J_{-m}(x) = (-1)^m J_m(x)$, $\forall m \in \mathbb{Z}$ (ec. 8.404-2 [Gradshteyn], donde se formula para $m \in \mathbb{N}$, pero es trivial la extensión a los enteros con el cambio $m \rightarrow -m$), podemos expresar (3.8) como:

$$\hat{\mathcal{H}}'(t) = -\frac{\hbar\Delta}{4} (-1)^k J_k \left(\frac{A}{\omega} \right) \left[e^{-i\delta\omega_k t \hat{\tau}_+} + e^{i\delta\omega_k t \hat{\tau}_-} \right] + \hat{\mathcal{H}}_\omega(t), \quad (3.10)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_\omega(t) = -\frac{\hbar\Delta}{4} \sum_{n \in \mathbb{Z}/\{-k\}} J_n \left(\frac{A}{\omega} \right) \left[e^{-i(\delta\omega_k + (k+n)\omega)t \hat{\tau}_+} + e^{i(\delta\omega_k + (k+n)\omega)t \hat{\tau}_-} \right].$$

La **aproximación de onda rotatoria** (ó **RWA**) consiste en tomar el promedio temporal de los términos oscilatorios en el tiempo con frecuencias considerablemente superiores a la característica del sistema, que en el estado $|\psi', t\rangle$ vendría dada por $\left\| \hat{\mathcal{H}}'(t)/\hbar \right\| \stackrel{(3.8)}{\approx} \Delta$, $\forall t$; donde se ha utilizado que $|J_n(x)| \leq 1$, $\forall (n, x) \in (\mathbb{Z}, \mathbb{C})$ (expresión 1-[Wolfram]). De esta forma, utilizando que $|k+n| \geq 1$ en cada exponente de $\hat{\mathcal{H}}_\omega(t)$, y que, por definición, $\delta\omega_k < \omega$, además de la hipótesis (3.2); podemos emplear la RWA y promediar dicha componente del hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}'(t) &\simeq -\frac{\hbar\Delta}{4} (-1)^k J_k \left(\frac{A}{\omega} \right) \left[e^{-i\delta\omega_k t \hat{\tau}_+} + e^{i\delta\omega_k t \hat{\tau}_-} \right] + \overline{\hat{\mathcal{H}}_\omega(t)} \\ &= -\frac{\hbar\Delta}{4} (-1)^k J_k \left(\frac{A}{\omega} \right) \left[e^{-i\delta\omega_k t \hat{\tau}_+} + e^{i\delta\omega_k t \hat{\tau}_-} \right], \end{aligned} \quad (3.11)$$

donde $\overline{\hat{\mathcal{H}}_\omega(t)} = 0$ por ser promedio de una combinación lineal de senos y cosenos. Comparando las expresiones (3.8) y (3.11), se observa que la utilización de la aproximación de

onda rotatoria ha permitido linealizar la dependencia temporal en los exponentes, la cual podemos eliminar por completo desarrollando la expresión anterior:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}'(t) &\stackrel{(A.8)(A.9)}{=} -\frac{\hbar\Delta}{4}(-1)^k J_k\left(\frac{A}{\omega}\right) e^{-i\frac{\delta\omega_k}{2}t\hat{\tau}_z} [\hat{\tau}_+ + \hat{\tau}_-] e^{i\frac{\delta\omega_k}{2}t\hat{\tau}_z} \\ &= -\frac{\hbar\Delta}{2}(-1)^k J_k\left(\frac{A}{\omega}\right) e^{-i\frac{\delta\omega_k}{2}t\hat{\tau}_z} \hat{\tau}_x e^{i\frac{\delta\omega_k}{2}t\hat{\tau}_z}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

A continuación, aplicamos una segunda transformación unitaria:

$$\hat{U}_{ii}(t) = e^{i\frac{\delta\omega_k}{2}t\hat{\tau}_z}, \quad (3.13)$$

que genera el nuevo estado:

$$|\psi'', t\rangle = e^{i\frac{\delta\omega_k}{2}t\hat{\tau}_z} |\psi', t\rangle \stackrel{(3.5)}{=} e^{i\frac{\delta\omega_k}{2}t\hat{\tau}_z} e^{-i\left(\frac{\varepsilon_0}{2}t + \frac{A}{2\omega}\sin(\omega t)\right)\hat{\tau}_z} |\psi, t\rangle = \hat{U}_{ii}(t)\hat{U}_i(t) |\psi, t\rangle, \quad (3.14)$$

el cual satisface la ecuación de Schrödinger:

$$\begin{aligned} i\hbar \hat{\partial}_t |\psi'', t\rangle &\stackrel{(3.6)}{=} -\frac{\hbar\delta\omega_k}{2}\hat{\tau}_z |\psi'', t\rangle + e^{i\frac{\delta\omega_k}{2}t\hat{\tau}_z} \hat{\mathcal{H}}'(t) |\psi', t\rangle \stackrel{(3.14)}{=} \left[-\frac{\hbar\delta\omega_k}{2}\hat{\tau}_z + \right. \\ &\left. e^{i\frac{\delta\omega_k}{2}t\hat{\tau}_z} \hat{\mathcal{H}}'(t) e^{-i\frac{\delta\omega_k}{2}t\hat{\tau}_z} \right] |\psi'', t\rangle \stackrel{(3.12)}{=} \left[-\frac{\hbar\delta\omega_k}{2}\hat{\tau}_z - \frac{\hbar\Delta}{2}(-1)^k J_k\left(\frac{A}{\omega}\right) \hat{\tau}_x \right] |\psi'', t\rangle. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Con lo que el nuevo hamiltoniano es:

$$\hat{\mathcal{H}}''(t) = -\frac{\hbar\delta\omega_k}{2}\hat{\tau}_z - \frac{\hbar\Delta}{2}(-1)^k J_k\left(\frac{A}{\omega}\right) \hat{\tau}_x \equiv \hat{\mathcal{H}}'', \quad (3.16)$$

que es efectivamente independiente del tiempo. Resulta entonces trivial resolver (3.15) por exponenciación de la matriz que representa al hamiltoniano constante (3.16):

$$|\psi'', t\rangle = \exp\left(-i\frac{\hat{\mathcal{H}}''}{\hbar}t\right) |\psi'', 0\rangle \stackrel{(3.14)}{=} \exp\left(-i\frac{\hat{\mathcal{H}}''}{\hbar}t\right) |\psi, 0\rangle,$$

que puede expresarse de forma compacta introduciendo el vector unitario:

$$\vec{v} = \frac{1}{|\vec{u}|} \left[\frac{\delta\omega_k}{2} \hat{z} + \frac{(-1)^k \Delta}{2} J_k\left(\frac{A}{\omega}\right) \hat{x} \right] \in \mathbb{R}^3, \quad |\vec{u}| = \sqrt{\left(\frac{\delta\omega_k}{2}\right)^2 + \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 J_k^2\left(\frac{A}{\omega}\right)}. \quad (3.17)$$

Empleando el producto tensorial (A.11), se sigue directamente de (3.16) y (3.17) que:

$$|\psi'', t\rangle = \exp\left(i|\vec{u}|(\vec{v} \circ \hat{\tau})t\right) |\psi, 0\rangle \stackrel{(A.12)}{=} \left[\cos(|\vec{u}|t) \hat{I} + i \sin(|\vec{u}|t) (\vec{v} \circ \hat{\tau}) \right] |\psi, 0\rangle, \quad (3.18)$$

que es la solución de la ecuación de Schrödinger para $|\psi''\rangle$ (3.15). Podemos recuperar la solución de la ecuación original para $|\psi\rangle$ (3.3) deshaciendo las dos transformaciones unitarias según (3.14): $|\psi, t\rangle = \hat{U}_i^\dagger \hat{U}_{ii}^\dagger |\psi'', t\rangle$, aunque no es necesario de cara al cálculo de probabilidades ya que estas transformaciones no modifican ninguna magnitud medible.

La expresión (3.18) permite determinar la probabilidad de tránsito entre estados cualesquiera, fijados los parámetros del sistema. Nos centraremos en el paso desde el nivel fundamental al excitado, cuya asignación depende del signo de ε_0 como se dijo en la sección 3.1. Pero en cualquier caso, la probabilidad es la misma:

$$\begin{aligned}
 P_{up}^{(k)}(t) &= \left| \langle \varphi_{\uparrow\downarrow}, t | \varphi_{\downarrow\uparrow}, 0 \rangle \right|^2 = \left| \left(\cos(|\vec{u}|t) \hat{I} + i \operatorname{sen}(|\vec{u}|t) (\vec{v} \circ \hat{\tau}) \right)_{1,2} \right|^2 = \\
 & \left| \left(\cos(|\vec{u}|t) \hat{I} + i \operatorname{sen}(|\vec{u}|t) (\vec{v} \circ \hat{\tau}) \right)_{2,1} \right|^2 \stackrel{(3.17)}{=} \left| \frac{i(-1)^k \Delta}{2|\vec{u}|} J_k \left(\frac{A}{\omega} \right) \operatorname{sen}(|\vec{u}|t) \right|^2 = \\
 & \frac{\Delta_k^2}{4|\vec{u}|^2} \operatorname{sen}^2(|\vec{u}|t) = \frac{\Delta_k^2}{8|\vec{u}|^2} \left[1 - \cos(2|\vec{u}|t) \right],
 \end{aligned}$$

donde se ha introducido el parámetro:

$$\Delta_k = \Delta J_k \left(\frac{A}{\omega} \right). \quad (3.19)$$

Luego, sustituyendo la expresión (3.17) para $|\vec{u}|$, se obtiene:

$$P_{up}^{(k)}(t) = \frac{\Delta_k^2}{2(\delta\omega_k^2 + \Delta_k^2)} \left[1 - \cos \left(\sqrt{\delta\omega_k^2 + \Delta_k^2} t \right) \right], \quad (3.20)$$

que es una función oscilatoria en el tiempo con periodo $2\pi/\sqrt{\delta\omega_k^2 + \Delta_k^2}$, valor inicial cero (como era de esperar, ya que en ese instante el estado del sistema se ha impuesto diferente al final) y valores extremales 0 y $\Delta_k^2/(\delta\omega_k^2 + \Delta_k^2) \leq 1, \forall k \in \mathbb{Z}$.

A altas frecuencias, resulta especialmente útil considerar el promedio temporal de las funciones que describan al sistema, siendo en este caso:

$$\overline{P_{up}^k} = \frac{\Delta_k^2}{2(\delta\omega_k^2 + \Delta_k^2)}, \quad (3.21)$$

expresión que alcanza un máximo (de $\overline{P_{up}^k} = 1/2$), considerando su relación funcional con la frecuencia de sintonía, cuando $\delta\omega_k = 0$; lo cual por (3.9) puede suceder cuando se cumple la relación entre parámetros: $\varepsilon_0/\omega \in \mathbb{Z}$.

Resulta de interés estudiar la dependencia de la probabilidad promedio de transición respecto a los parámetros controlables del sistema, tal y como se llevó a cabo en el capítulo 2 con las figuras 2.6, 2.7 y 2.8. A este respecto, la expresión (3.21) presenta dos inconvenientes:

- Al variar los parámetros ω y ε_0 , el modo que define la probabilidad de transición es asimismo susceptible de cambio; con lo que no sería correcto utilizar una misma expresión compuesta por un único modo fijo en una representación gráfica en la que alguna o ambas magnitudes variasen. A este efecto es habitual considerar la suma sobre todos los modos:

$$\overline{P_{up}} = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \overline{P_{up}^k} = \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{\Delta_k^2}{\delta\omega_k^2 + \Delta_k^2}. \quad (3.22)$$

Esta extensión a una fórmula cerrada se basa en el hecho de que (3.21) decrece rápidamente conforme $|\delta\omega_k|$ aumenta (las funciones de este tipo se dice que presentan un pico Lorentziano), con lo que realmente solo es necesario evaluar uno o dos sumandos.

- Tanto (3.21) como (3.22) presentan discontinuidades evitables sobre las rectas definidas por $\varepsilon_0/\omega = \text{cte} \in \mathbb{Z}$ ($\Rightarrow \overline{P_{up}} \simeq 1/2$) variando A , localizadas exactamente en los (infinitos) ceros de $J_{\varepsilon_0/\omega}$, donde $\overline{P_{up}} = 0$. Este comportamiento poco realista puede arreglarse introduciendo dos constantes fenomenológicas: T_1 y T_2 , que son los denominados **periodos de relajación** y **desfase**, respectivamente. A grandes rasgos, el primero de ellos representa el tiempo que el sistema tarda en desexcitarse al estado fundamental; mientras que el segundo da cuenta del intervalo temporal, a partir de la fijación de unas condiciones iniciales dadas, en que se mantiene la coherencia (y por tanto, el sistema se comporta según las leyes de la mecánica cuántica, dando lugar al comportamiento interferométrico que estamos analizando). Estos dos parámetros representan la interacción del sistema con su entorno.

A continuación vamos a considerar un método diferente y más general que el de la aproximación de onda rotatoria con el fin de tener en cuenta los periodos de relajación y desfase del sistema, y veremos que los resultados para la probabilidad son funcionalmente muy similares. Señalar que no se va a hacer especial hincapié en el significado físico de T_1 y T_2 (para nosotros son simplemente dos constantes de ajuste), ni se va a desarrollar el nuevo método desde el nivel elemental que correspondería, ya que esto por sí solo podría constituir otro trabajo o memoria diferentes; nuestro objetivo es generalizar ligeramente el resultado de la RWA con el fin de estudiar su dependencia en ε_0 , A , ω y Δ .

3.3. Ecuaciones Ópticas de Bloch

Consideremos el sistema de dos niveles gobernado por el hamiltoniano (3.16) (equivalente unitario de (3.1)) y la matriz de densidad asociada a dicho sistema en la base diabática (ec. 1.36-[Blum]):

$$\rho(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + Z & X - iY \\ X + iY & 1 - Z \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

donde $\rho(t)_{1,1}$, $\rho(t)_{2,2}$ representan la probabilidad de encontrar al sistema en los estados $|\varphi_\uparrow\rangle$ y $|\varphi_\downarrow\rangle$, respectivamente (notar que $\rho(t)_{1,1} + \rho(t)_{2,2} = 1$, $\forall t$). Los parámetros adimensionales X, Y, Z son reales y dependen, en general, del tiempo. Separando la parte temporal del hamiltoniano:

$$\hat{\mathcal{H}}''(t) = \hat{\mathcal{H}}^0 + \hat{\mathcal{V}}(t) = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar\delta\omega_k}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar\delta\omega_k}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & (-1)^{k+1} \frac{\hbar\Delta}{2} J_k\left(\frac{A}{\omega}\right) \\ (-1)^{k+1} \frac{\hbar\Delta}{2} J_k\left(\frac{A}{\omega}\right) & 0 \end{pmatrix}.$$

Denotamos, como es habitual, $\mathcal{H}_{i,j}^0$, $\mathcal{V}_{i,j}$ a los correspondientes elementos de matriz (en la base diabática) de las componentes del hamiltoniano. Definimos a continuación:

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} (\mathcal{V}_{1,2} + \mathcal{V}_{2,1})/\hbar \\ (\mathcal{V}_{1,2} - \mathcal{V}_{2,1})/\hbar \\ (\mathcal{H}_{1,1}^0 - \mathcal{H}_{2,2}^0)/\hbar \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (-1)^{k+1} \Delta J_k(A/\omega) \\ 0 \\ -\delta\omega_k \end{pmatrix}, \quad (3.24)$$

así como el denominado vector de pseudoespín:

$$\vec{\nu} = \begin{pmatrix} \text{tr}(\rho(t)\tau_x) \\ \text{tr}(\rho(t)\tau_y) \\ \text{tr}(\rho(t)\tau_z) \end{pmatrix} \stackrel{(3.23)}{=} \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

cuya evolución temporal viene determinada por las ecuaciones ópticas de Bloch (ec. 8.86-[Blum], donde $Z_0 = 0$, o más generalmente; ec. 8 a 10-[Shevchenko05]) en función de los periodos de relajación y desfase:

$$\begin{pmatrix} \dot{X} \\ \dot{Y} \\ \dot{Z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\vec{\alpha} \times \vec{\nu})_1 - X/T_2 \\ (\vec{\alpha} \times \vec{\nu})_2 - Y/T_2 \\ (\vec{\alpha} \times \vec{\nu})_3 - (Z - Z_0)/T_1 \end{pmatrix} \stackrel{(3.19)}{=} \begin{pmatrix} \delta\omega_k Y - X/T_2 \\ -\delta\omega_k X + (-1)^k \Delta_k Z - Y/T_2 \\ (-1)^{k+1} \Delta_k Y - (Z - Z_0)/T_1 \end{pmatrix}, \quad (3.26)$$

donde Z_0 es el valor de Z en equilibrio térmico a una temperatura absoluta T del sistema con su entorno, que viene dado a partir de la distribución de Boltzmann (ec. 8.43-[Blum]):

$$\frac{\rho_{1,1}^{T.eq.}}{\rho_{2,2}^{T.eq.}} = e^{\beta(E_2 - E_1)} \Rightarrow Z^{T.eq.} \equiv Z_0 = \frac{e^{\frac{\beta}{2}(E_2 - E_1)} - e^{-\frac{\beta}{2}(E_2 - E_1)}}{e^{\frac{\beta}{2}(E_2 - E_1)} + e^{-\frac{\beta}{2}(E_2 - E_1)}} = \tanh\left(\frac{\beta(E_2 - E_1)}{2}\right),$$

con $\beta = 1/(k_B T)$, y E_1 , E_2 los autovalores del presente hamiltoniano. Supondremos bajas temperaturas, que es la condición necesaria para aproximar por sistema de dos niveles en

multitud de casos, con lo que podemos aproximar $Z_0 \approx \lim_{x \rightarrow 0} \tanh(1/x) = 1$.

Por fijar ideas, vamos a obtener la probabilidad de transición del estado $|\varphi_\uparrow\rangle$ al $|\varphi_\downarrow\rangle$, es decir; $\rho(t)_{2,2} = (1 - Z(t))/2$, siendo $\rho(0)_{2,2} = (1 - Z(0))/2 = 0 \Rightarrow Z(0) = 1$. Por otro lado, donde antes tomábamos promediado temporal, ahora imponemos régimen estacionario ($\dot{X} = \dot{Y} = \dot{Z} = 0$) para eliminar la dependencia temporal, ya que en principio no estamos tratando con funciones periódicas. Resolviendo el sistema (3.26) numéricamente, observamos que $\rho(t)_{2,2}$ tiende (a efectos prácticos en tiempo finito) a dicho valor estacionario con independencia de la condición inicial $\rho(0)_{2,2}$, como se observa en la figura 3.1. Esta independencia se debe al uso del hamiltoniano resultante de aplicar la aproximación de onda rotatoria, que permite eliminar la dependencia temporal.

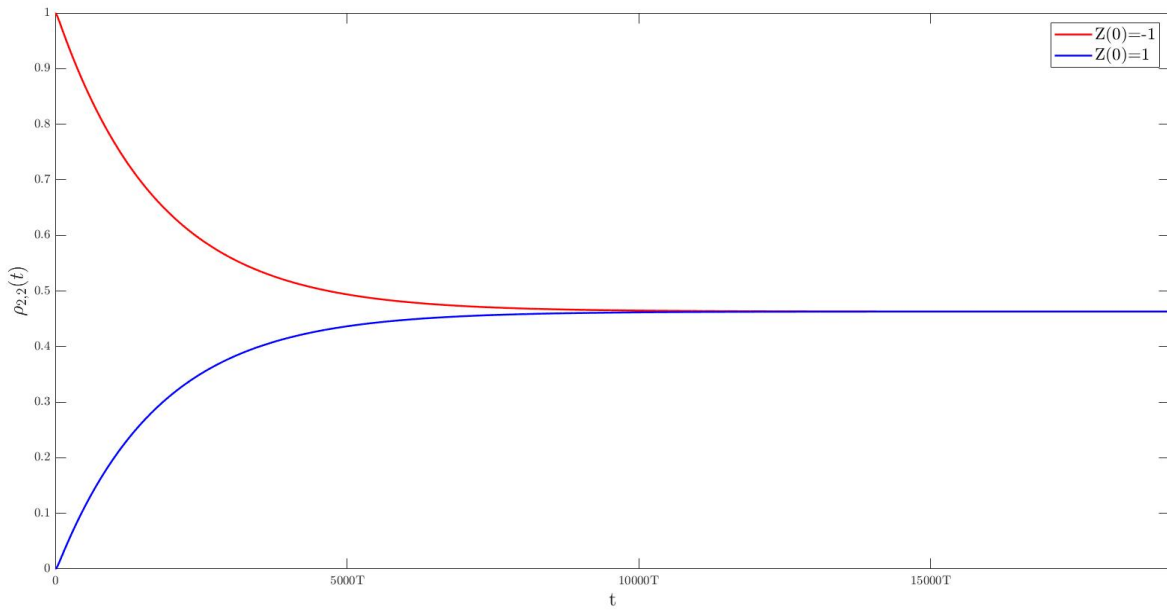


Figura 3.1: Evolución temporal de la probabilidad de encontrar al sistema en el estado $|\varphi_\downarrow\rangle$, partiendo de $|\varphi_\uparrow\rangle$ (azul) y $|\varphi_\downarrow\rangle$ (rojo). $T = 2\pi/\omega$.

Para unificar la notación con (3.21) y (3.22), denotaremos \bar{X} , \bar{Y} , \bar{Z} a las correspondientes soluciones estacionarias. En ese caso, desarrollando el sistema (3.26):

$$\begin{aligned} \bar{Y} = \frac{\bar{X}}{T_2 \delta \omega_k} &\Rightarrow \left(\frac{1}{T_2^2 \delta \omega_k} + \delta \omega_k \right) \bar{X} = (-1)^k \Delta_k \bar{Z}, \quad \left(\frac{(-1)^{k+1} \Delta_k}{T_2 \delta \omega_k} \right) \bar{X} = \frac{\bar{Z} - 1}{T_1} \Rightarrow \\ \frac{(-1)^k \Delta_k T_2^2 \delta \omega_k}{1 + T_2^2 \delta \omega_k^2} \bar{Z} &= \frac{(-1)^{k+1} T_2 \delta \omega_k}{\Delta_k T_1} (\bar{Z} - 1) \Rightarrow \left(\frac{T_1 T_2^2 \Delta_k^2 \delta \omega_k + T_2 \delta \omega_k (1 + T_2^2 \delta \omega_k^2)}{T_1 \Delta_k (1 + T_2^2 \delta \omega_k^2)} \right) \bar{Z} \\ &= \frac{T_2 \delta \omega_k}{T_1 \Delta_k} \Rightarrow \bar{Z} = \frac{T_2 \delta \omega_k (1 + T_2^2 \delta \omega_k^2)}{T_2 \delta \omega_k (1 + T_2^2 \delta \omega_k^2) + T_1 T_2^2 \Delta_k^2 \delta \omega_k} = \frac{1 + T_2^2 \delta \omega_k^2}{1 + T_2^2 \delta \omega_k^2 + T_1 T_2 \Delta_k^2} \equiv \bar{Z}_k. \end{aligned}$$

Luego:

$$\overline{P_{up}^k} = \frac{1}{2}(1 - \overline{Z_k}) = \frac{1}{2} \left[\frac{\Delta_k^2}{\frac{1}{T_1 T_2} + \frac{T_2}{T_1} \delta \omega_k^2 + \Delta_k^2} \right]. \quad (3.27)$$

Técnicamente, la matriz de densidad (3.23) corresponde al sistema con el hamiltoniano resultante de aplicar la transformación unitaria (3.14); pero al deshacer dicha transformación para el operador densidad se observa que las componentes diagonales (y por tanto las probabilidades) no cambian, ya que en general:

$$e^{i\alpha\tau_z} \begin{pmatrix} \rho_{1,1} & \rho_{1,2} \\ \rho_{2,1} & \rho_{2,2} \end{pmatrix} e^{-i\alpha\tau_z} = \begin{pmatrix} \rho_{1,1} & e^{i2\alpha} \rho_{1,2} \\ e^{-i2\alpha} \rho_{2,1} & \rho_{2,2} \end{pmatrix}, \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}.$$

Por tanto, considerando la suma para todos los modos, obtenemos el valor estacionario de la probabilidad de transición (o de permanencia) al estado $|\varphi_\downarrow\rangle$:

$$\overline{P_{up}} = \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{\Delta_k^2}{\frac{1}{T_1 T_2} + \frac{T_2}{T_1} \delta \omega_k^2 + \Delta_k^2} = \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{J_k^2(\tilde{A})}{\frac{1}{T_1^* T_2^*} + \frac{T_2^*}{T_1^*} (\omega^*(k - \tilde{\varepsilon}_0))^2 + J_k^2(\tilde{A})}, \quad (3.28)$$

donde se han introducido los parámetros adimensionales $\tilde{A} = A/\omega$, $\tilde{\varepsilon}_0 = \varepsilon_0/\omega$, $\omega^* = \omega/\Delta$, $T_{1,2}^* = T_{1,2}\Delta$ a efectos de reducir de 6 a 5 el número de variables de $\overline{P_{up}}$ y hacerlas independientes de la elección de un sistema de unidades. La expresión (3.28) es la generalización buscada de (3.22), coincidiendo con esta última en el límite $T_1 = T_2 \rightarrow \infty$. Hacer tender ambos parámetros a infinito equivale a eliminar los efectos de relajación y decoherencia (no se alcanzarían en tiempo finito), los cuales no fueron tenidos en cuenta en la derivación de (3.22); con lo que era de esperar encontrar este límite. Sin embargo, que T_1 y T_2 deban aumentar a la misma velocidad no podemos explicarlo sin un estudio detallado de los fenómenos anteriores.

Se muestra en las figuras (3.2) a (3.8) un mapeado de la probabilidad (3.28) sobre el plano $A/\omega - \varepsilon_0/\omega$ para distintos valores de ω/Δ , $T_1\Delta$ y $T_2\Delta$. El incremento del número de parámetros necesarios para caracterizar cada figura genera una casuística más profunda que la encontrada en el límite de cruce lento del capítulo 2, lo cual hace necesario que nos ciñamos a una determinada ruta. De esta forma, se va a empezar por el triplete de valores $\omega/\Delta = 300$, $T_1\Delta = 500$, $T_2\Delta = 0,5$, de acuerdo con [Shevchenko10] (pág. 12), y sobre éstos se van a analizar las consecuencias de reducir o incrementar en al menos un orden de magnitud cada uno de dichos parámetros individualmente (manteniendo los otros dos constantes). En cada figura se evalúan únicamente los correspondientes 1 o 2 mayores sumandos de la serie que define a $\overline{P_{up}}$ para cada punto del mallado del plano. El segundo sumando es despreciable en todos los puntos salvo aquellos donde la parte decimal de $\tilde{\varepsilon}_0$ es 0,5; que es donde la frecuencia de sintonía no está unívocamente determinada.

En el primer caso (figura 3.2) se observa que la probabilidad es nula en todas partes salvo en un fino entorno de las diferentes rectas $\varepsilon_0/\omega = z \in \mathbb{Z}$ (en rojo se marcan arbitrariamente dos de ellas), donde la frecuencia de sintonía asociada al modo z se anula. Esto supone maximizar, en la variable ε_0/ω , el mayor de los sumandos de la serie, lo

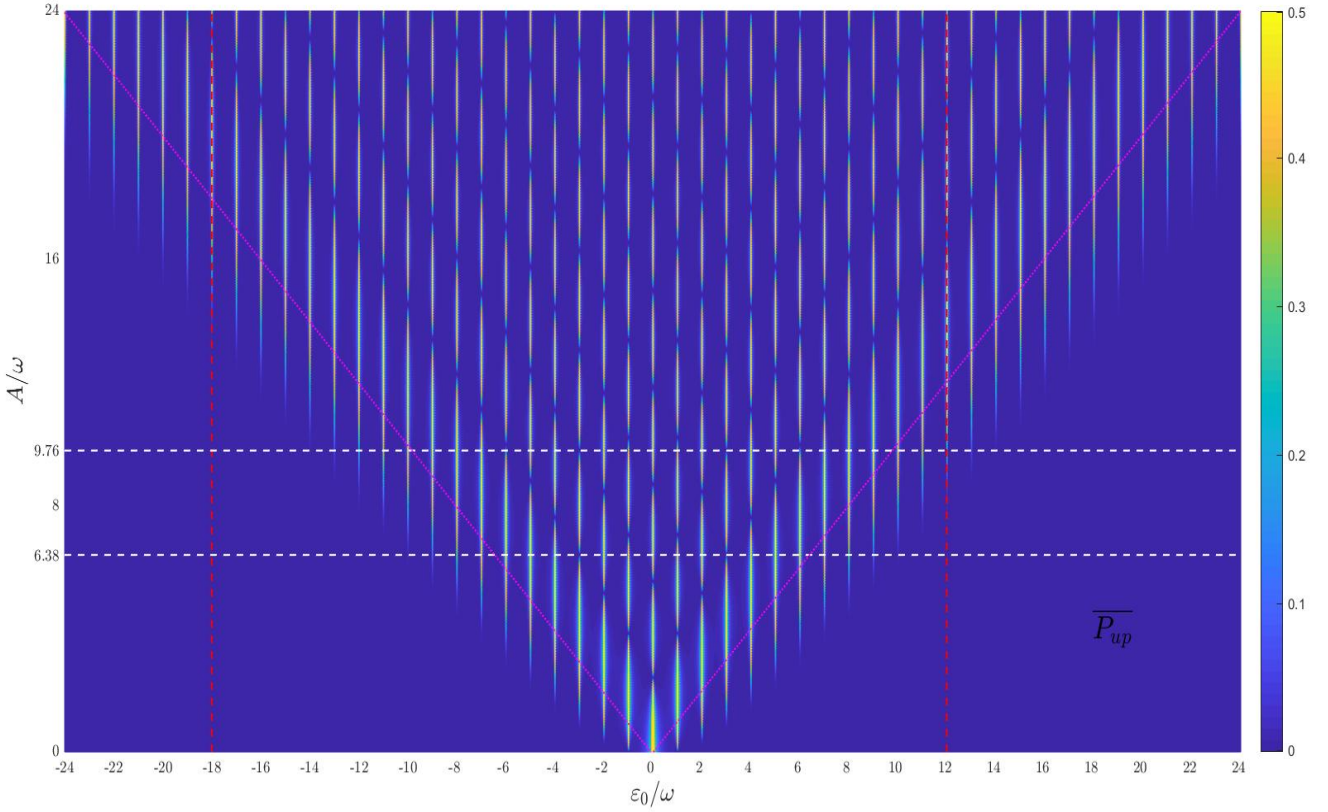


Figura 3.2: $\overline{P_{up}}$ (3.28) frente a A/ω y ε_0/ω , con $\omega/\Delta = 300$, $T_1\Delta = 500$, $T_2\Delta = 0,5$.

cual da lugar a los máximos $\overline{P_{up}} \approx 0,5$, que se alternan con regiones de mínimos (de longitud apreciablemente constante en todo el plano) de forma que el valor de A/ω sobre el que se encuentra centrado el n -ésimo mínimo (contando en A/ω creciente a partir de $A/\omega = \varepsilon_0/\omega$) de la recta de modo z coincide con el n -ésimo cero de J_z ; como se observa con las dos rectas blancas, las cuales marcan concretamente los dos primeros ceros de J_3 (que son también los de J_{-3}). Los primeros máximos se aprecian más largos que los siguientes y, especialmente los de las rectas de modos más pequeños, también más anchos. Por otra parte, las dos rectas rosas vienen dadas por $A = \varepsilon_0$, condición límite para la aplicación del modelo de impulso adiabático en el capítulo 2, pero a priori sin especial significado en el presente contexto; aunque se observa que $\overline{P_{up}}$ cae rápidamente a 0 por debajo de ellas (a consecuencia del comportamiento de las funciones de Bessel).

En las figuras 3.3 y 3.4 se observa que la anchura de los máximos es inversamente proporcional a ω/Δ , o más precisamente; la anchura de las regiones de probabilidad mínima es directamente proporcional a este parámetro. El valor de los máximos se mantiene en 0,5, pues estos vienen determinados por una frecuencia de sintonía nula o muy pequeña.

El comportamiento de $\overline{P_{up}}$ en $T_1\Delta$ se observa cualitativamente similar, pero invertido, a aquél en ω/Δ ; de acuerdo a las figuras 3.5 y 3.6. La presencia de $1/T_1^*$ en el primer término de los denominadores de (3.28) implica que este parámetro sí afecta a los sumandos para los que la frecuencia de sintonía se anula, especialmente al reducirse ya que tiende a disminuir notablemente dichos sumandos; como se aprecia en la figura 3.5 donde

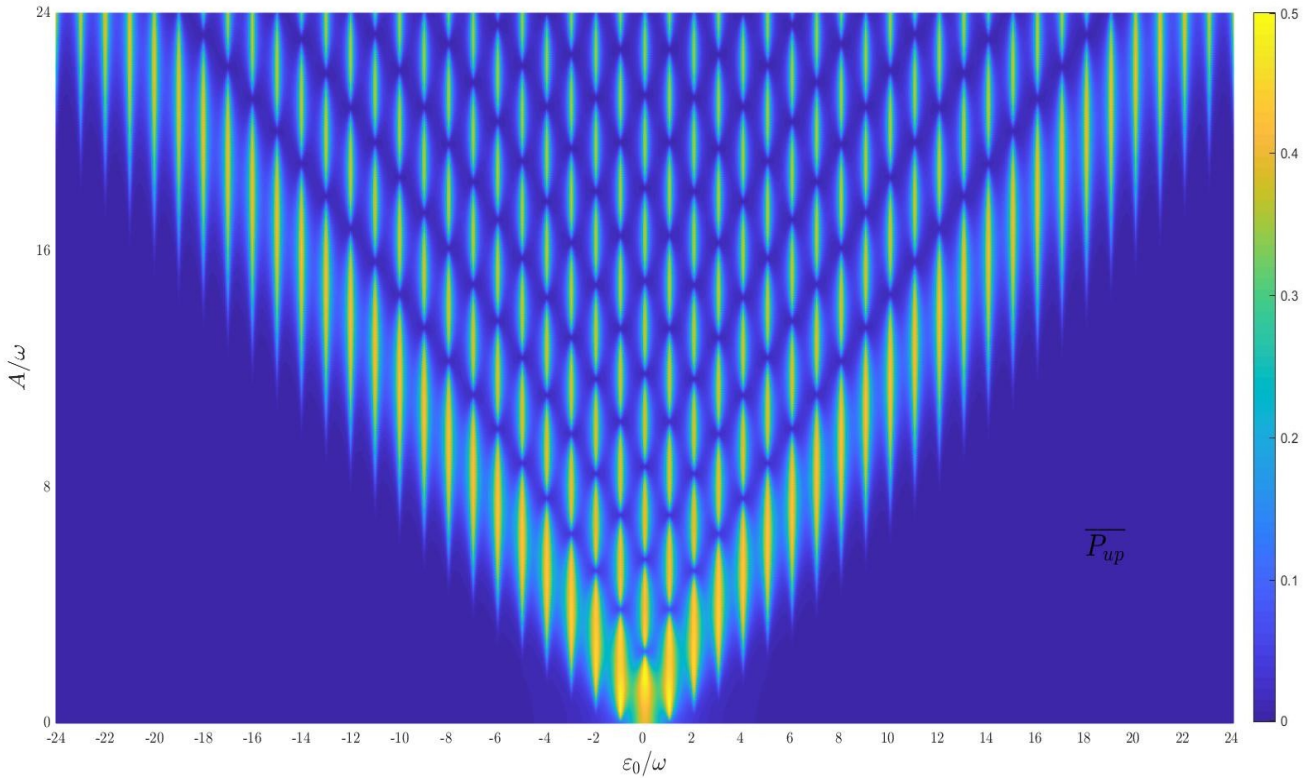


Figura 3.3: $\overline{P_{up}}$ (3.28) frente a A/ω y ε_0/ω , con $\omega/\Delta = 50$, $T_1\Delta = 500$, $T_2\Delta = 0,5$.

los máximos disminuyen su altura.

Por último, los resultados respecto a $T_2\Delta$ constituyen dos situaciones interesantes. En la figura 3.7 se observa una difuminación del patrón interferométrico habitual: los máximos menguan y no se sitúan claramente sobre las rectas $\varepsilon_0/\omega \in \mathbb{Z}$. Aquí resulta satisfactorio contemplar el significado físico del periodo de desfase T_2 , que al ser pequeño implica que el sistema comienza a comportarse clásicamente al cabo de poco tiempo, atenuando el impacto cuántico de las interferencias. La figura 3.8 corresponde, como se dijo previamente, al caso en que (3.28) tiende a (3.22), ya que $T_1^* = T_2^*$ y son suficientemente elevados. Sin embargo, las zonas $A \ll \varepsilon_0$, donde $\overline{P_{up}} = 0$; son aún un reducto de los efectos de relajación y decoherencia (a medida que $T_1^* = T_2^*$ aumenten, los máximos irán bajando, eventualmente todos hasta $A/\omega = 0$, en el infinito).

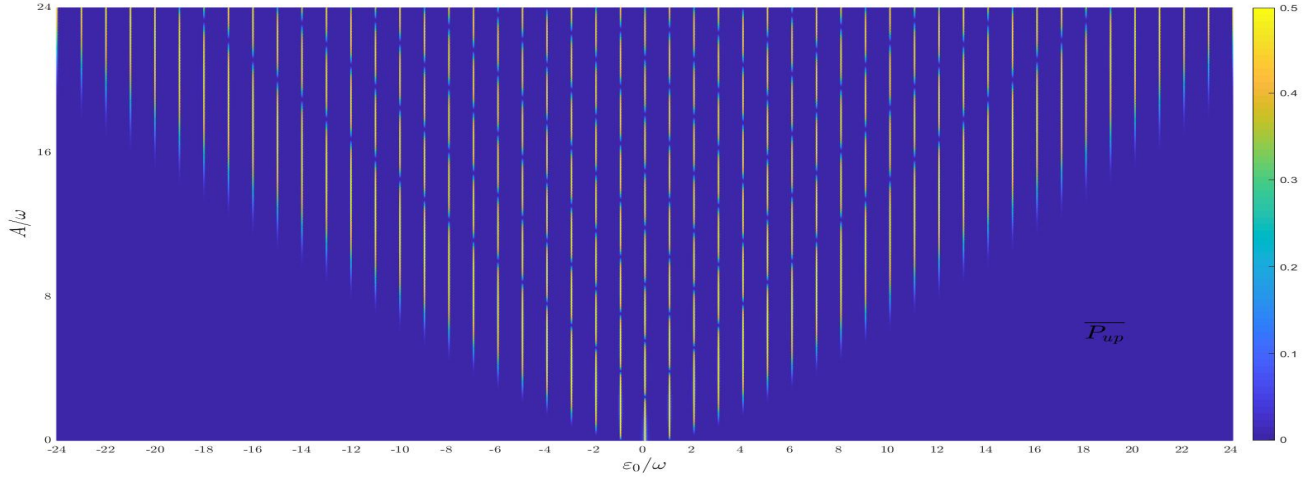


Figura 3.4: $\overline{P_{up}}$ (3.28) frente a A/ω y ε_0/ω , con $\omega/\Delta = 1200$, $T_1\Delta = 500$, $T_2\Delta = 0,5$.

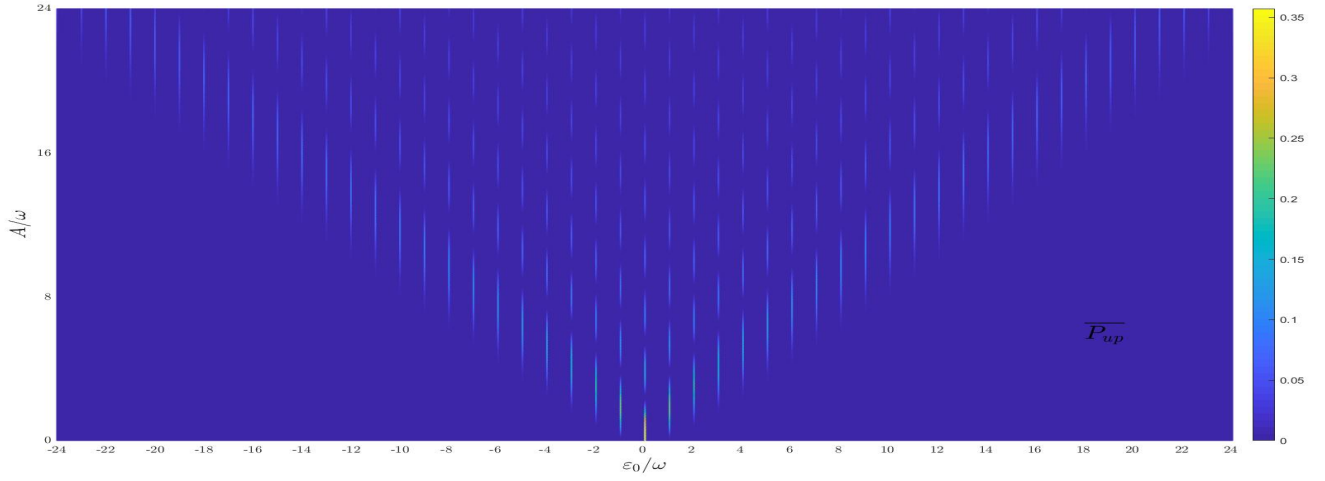


Figura 3.5: $\overline{P_{up}}$ (3.28) frente a A/ω y ε_0/ω , con $\omega/\Delta = 300$, $T_1\Delta = 5$, $T_2\Delta = 0,5$.

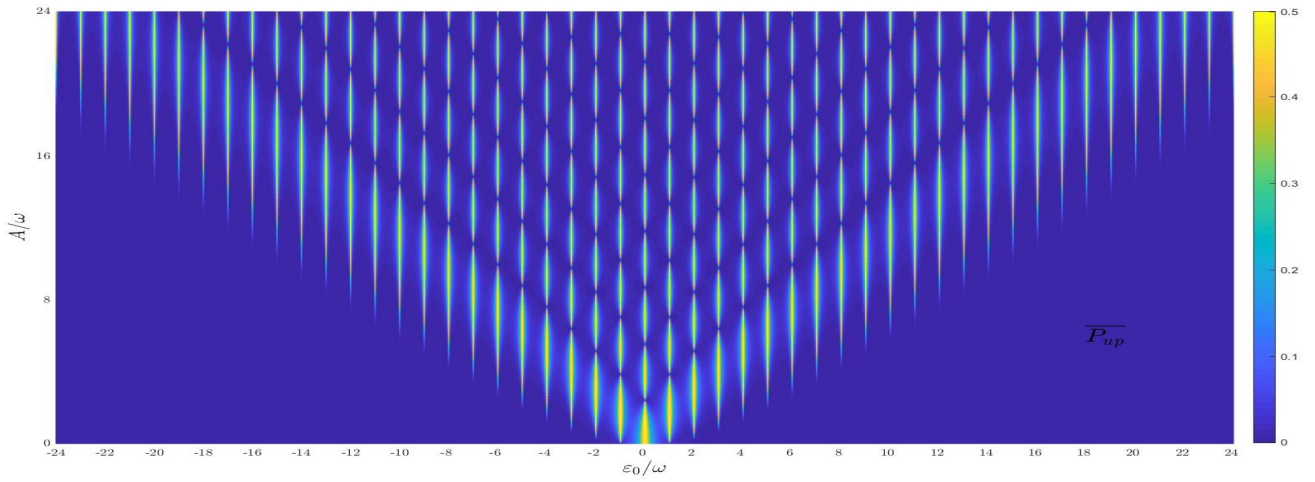


Figura 3.6: $\overline{P_{up}}$ (3.28) frente a A/ω y ε_0/ω , con $\omega/\Delta = 300$, $T_1\Delta = 2500$, $T_2\Delta = 0,5$.

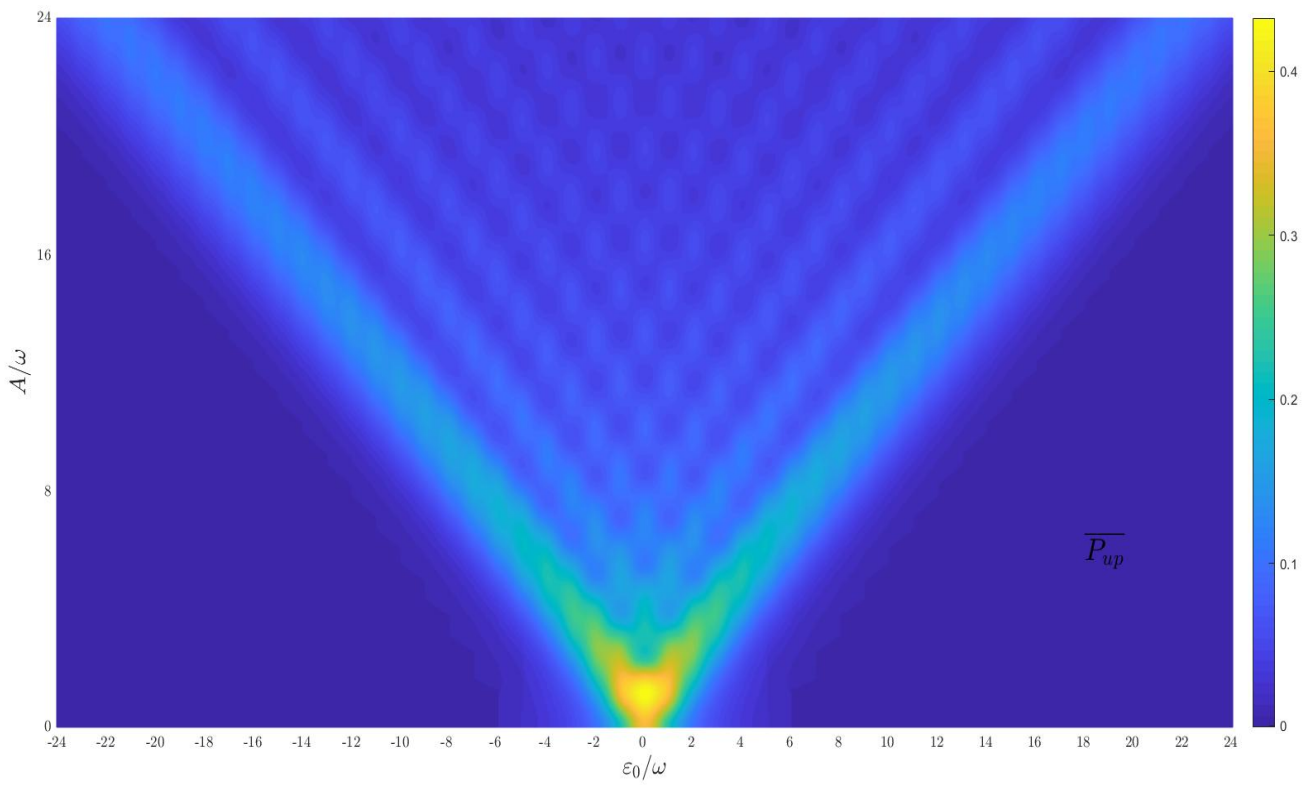


Figura 3.7: \overline{P}_{up} (3.28) frente a A/ω y ε_0/ω , con $\omega/\Delta = 300$, $T_1\Delta = 500$, $T_2\Delta = 0,005$.

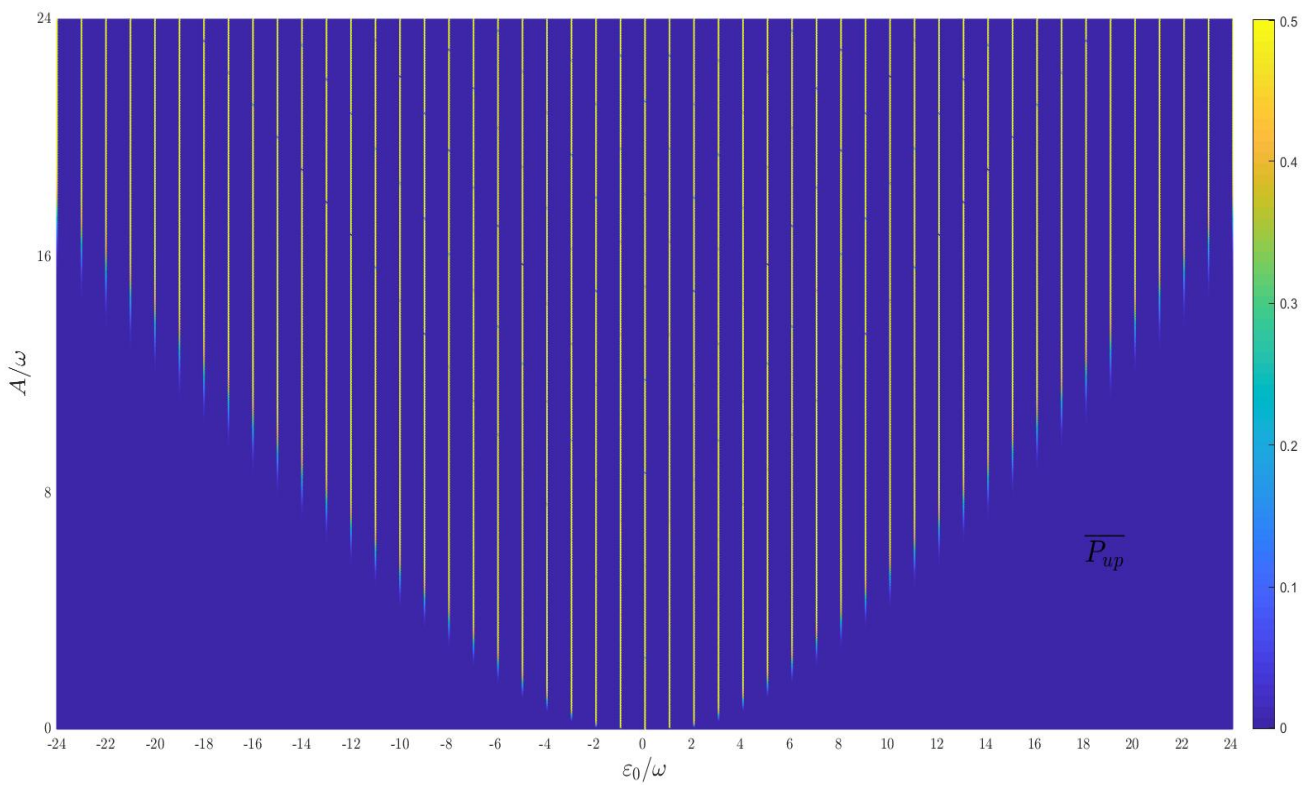


Figura 3.8: \overline{P}_{up} (3.28) frente a A/ω y ε_0/ω , con $\omega/\Delta = 300$, $T_1\Delta = T_2\Delta = 500$.

Capítulo 4

Resolución Numérica

En este capítulo vamos a computar la evolución temporal de la probabilidad de transición para el sistema de dos niveles, así como su promedio, y a comparar con los resultados de los modelos de impulso adiabático y de onda rotatoria. En general, el enfoque analítico de este problema puede no ser trivial, como se ha visto en los capítulos 3 y (principalmente) 2; siendo inviable la obtención de una solución exacta para el hamiltoniano armónico utilizado. Sin embargo, dado que estamos tratando con un sistema de dimensión finita, es posible emplear métodos de la teoría de ecuaciones diferenciales para calcular numéricamente la solución de la ecuación de Schrödinger. Además, es posible aprovechar la periodicidad temporal del hamiltoniano para agilizar los cálculos, de acuerdo a la teoría de Floquet.

4.1. Método de Floquet

Supongamos que el sistema de dos niveles está descrito por el hamiltoniano (1.1) con cualquiera de los estímulos (1.2) o (1.3). En ese caso, se cumple que $\hat{\mathcal{H}}(t)$ es un operador hermítico y $(\frac{2\pi}{\omega} = T)$ - periódico:

$$\hat{\mathcal{H}}(t + T) = \hat{\mathcal{H}}(t), \quad \forall t \in \mathbb{R}. \quad (4.1)$$

Consideremos el operador de evolución del sistema respecto a un tiempo inicial $t_0 \in \mathbb{R}$ fijo, i.e., tal que $\hat{U}(t, t_0) |\psi, t_0\rangle = |\psi, t\rangle, \forall t \geq t_0$, ψ solución de la ecuación de Schrödinger. Por definición, debe cumplirse que $\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}$, operador identidad; y tomando derivadas temporales:

$$i\hbar \frac{d\hat{U}(t, t_0)}{dt} |\psi, t_0\rangle = i\hbar \frac{d|\psi, t\rangle}{dt} = \hat{\mathcal{H}}(t) |\psi, t\rangle = \hat{\mathcal{H}}(t) \hat{U}(t, t_0) |\psi, t_0\rangle.$$

Por tanto, el operador de evolución satisface el siguiente sistema diferencial:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\hat{U}(t, t_0)}{dt} = \hat{\mathcal{H}}(t) \hat{U}(t, t_0), \quad \forall t \geq t_0 \\ \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}. \end{cases} \quad (4.2)$$

Notemos además que se trata de un operador unitario, ya que:

$$\frac{d\hat{U}^\dagger\hat{U}}{dt} = \frac{d\hat{U}^\dagger}{dt}\hat{U} + \hat{U}^\dagger\frac{d\hat{U}}{dt} \stackrel{(4.2)}{=} \frac{i}{\hbar}\hat{U}^\dagger\hat{\mathcal{H}}\hat{U} + \hat{U}^\dagger\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\hat{\mathcal{H}}\hat{U} = 0 \Rightarrow \hat{I} = \hat{U}^\dagger(t_0, t_0)\hat{U}(t_0, t_0) =$$

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) \Rightarrow \det U^\dagger(t, t_0) \det U(t, t_0) = \det I = 1 \Rightarrow \det U^\dagger(t, t_0), \det U(t, t_0) \neq 0,$$

donde hemos tomado determinantes sobre las matrices 2 x 2 que representan a los operadores que actúan sobre los estados del sistema. De esta forma, $\hat{U}(t, t_0)$ es invertible, y su inversa es $\hat{U}^{-1}(t, t_0) = \hat{U}^\dagger(t, t_0)$.

Es conocido del álgebra lineal que todos los autovalores de las matrices unitarias tienen módulo 1, lo cual se extiende a operadores unitarios con el análisis funcional. Sean λ_j , con $j = 1, 2$ los (dos) autovalores de $\hat{U}(T + t_0, t_0)$, de forma que $\hat{U}(T + t_0, t_0)|\phi_j\rangle = \lambda_j|\phi_j\rangle$, con $|\phi_j\rangle$ sus autofunciones normalizadas. Podemos entonces expresar:

$$\lambda_j = e^{-i\varphi_j}, \varphi_j \in [-\pi, \pi) \forall j = 1, 2. \quad (4.3)$$

Definimos las **cuasienergías** como las siguientes magnitudes (con dimensiones de energía):

$$\varepsilon_j = \frac{\hbar\varphi_j}{T} \in [-\pi\hbar/T, \pi\hbar/T), \forall j = 1, 2. \quad (4.4)$$

Dado que $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle\}$ constituye una base ortonormal del espacio (independientemente de la degeneración de los λ_j , pues podrían tomarse así con el método de Gram-Schmidt), se satisface la relación de cierre $\sum_{j=1,2} |\phi_j\rangle\langle\phi_j| = I$, con lo que se tiene:

$$\hat{U}(T + t_0, t_0) = \hat{U}(T + t_0, t_0) \sum_{j=1,2} |\phi_j\rangle\langle\phi_j| = \sum_{j=1,2} \lambda_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|. \quad (4.5)$$

De esta forma definimos el **hamiltoniano efectivo** como el operador (independiente del tiempo) cuyos autovalores son las cuasienergías, y sus autovectores; los de $\hat{U}(T + t_0, t_0)$:

$$\hat{\mathcal{H}}_{ef} = \sum_{j=1,2} \varepsilon_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|, \quad (4.6)$$

con lo que, teniendo en cuenta que para una matriz arbitraria: $A = MDM^{-1} \Rightarrow e^A = Me^DM^{-1}$, con D la matriz diagonal de autovalores de A ; se satisface la relación:

$$\hat{U}(T + t_0, t_0) = e^{-i\frac{T}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_{ef}}. \quad (4.7)$$

Consideremos a continuación el operador:

$$\hat{P}(t) = \hat{U}(t, t_0)e^{i\frac{t}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_{ef}}, \quad (4.8)$$

que se comprueba que es T -periódico:

$$\hat{P}(t+T) = \hat{U}(t+T, t_0) e^{i\frac{(T+t)}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_{ef}} \stackrel{1)}{=} \hat{U}(t+T, t_0+T) \hat{U}(t_0+T, t_0) e^{i\frac{(T+t)}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_{ef}} \stackrel{(4.7)}{=} \\ \hat{U}(t+T, t_0+T) e^{i\frac{t}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_{ef}} \stackrel{2)}{=} \hat{U}(t, t_0) e^{i\frac{t}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_{ef}} = \hat{P}(t),$$

donde:

- 1) $\hat{U}(s, b) \hat{U}(b, t_0) = \hat{U}(s, t_0)$, $\forall s \geq b \geq t_0$, por actuar de la misma forma sobre todos los estados del sistema en t_0 .
- 2) Utilizando la periodicidad del hamiltoniano, es directo ver que $\hat{U}(t+T, t_0+T)$ satisface (4.2) al igual que $\hat{U}(t, t_0)$:

$$i\hbar \hat{\partial}_t \hat{U}(t+T, t_0+T) |\psi, t_0+T\rangle = i\hbar \hat{\partial}_t |\psi, t+T\rangle = i\hbar \hat{\partial}_{t+T} |\psi, t+T\rangle = \\ \hat{\mathcal{H}}(t+T) |\psi, t+T\rangle \stackrel{(4.1)}{=} \hat{\mathcal{H}}(t) \hat{U}(t+T, t_0+T) |\psi, t_0+T\rangle .$$

Por el teorema de Picard, la solución de dicho sistema diferencial de primer orden existe y es única, con lo que $\hat{U}(t+T, t_0+T) = \hat{U}(t, t_0)$.

Veamos, al igual que hicimos con el operador de evolución, el sistema diferencial que caracteriza a este operador:

$$i\hbar \frac{d\hat{P}(t)}{dt} \stackrel{(4.2)}{=} \hat{\mathcal{H}}(t) \hat{U}(t, t_0) e^{i\frac{t}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_{ef}} - \hat{U}(t, t_0) \hat{\mathcal{H}}_{ef} e^{i\frac{t}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_{ef}} = \hat{\mathcal{H}}(t) \hat{P}(t) - \hat{P}(t) \hat{\mathcal{H}}_{ef},$$

donde hemos hecho uso de las relaciones $\hat{\partial}_t e^{tA} = A e^{tA}$, y $[\hat{\mathcal{H}}_{ef}, e^{i\frac{t}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_{ef}}] = 0$. Por tanto, $\hat{P}(t)$ es la solución (única) del sistema:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\hat{P}(t)}{dt} = \hat{\mathcal{H}}(t) \hat{P}(t) - \hat{P}(t) \hat{\mathcal{H}}_{ef}, \quad \forall t \geq t_0 \\ \hat{P}(t_0) = e^{i\frac{t_0}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_{ef}} . \end{cases} \quad (4.9)$$

Podemos condensar el desarrollo anterior en el siguiente algoritmo numérico para determinar el operador de evolución del sistema (y por tanto toda la información física de interés) en cualquier intervalo temporal:

1. Fijar t_0 y hallar $\hat{U}(t_0+T, t_0)$ a partir de (4.2).
2. Calcular sus autovalores λ_1, λ_2 y sus autofunciones ortonormalizadas $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$. De existir degeneración ($\lambda_1 = \lambda_2$), puede emplearse por ejemplo el método de Gram-Schmidt.
3. Calcular $\varphi_j = -\text{Im}(\ln \lambda_j)$, $\forall j = 1, 2$, que está indeterminado bajo adición de un múltiplo entero de 2π . Por fijar ideas, nos restringimos al intervalo $\varphi_j \in [-\pi, \pi)$. Calcular las cuasienergías como $\varepsilon_j = \frac{\hbar}{T} \varphi_j$, $\forall j = 1, 2$.

4. Calcular el hamiltoniano efectivo con (4.6). Representando las autofunciones $|\phi_j\rangle$ como vectores columna, esto equivale a $\hat{\mathcal{H}}_{ef} = \sum_{j=1,2} \varepsilon_j \begin{pmatrix} \phi_{j1} \\ \phi_{j2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{j1}^* & \phi_{j2}^* \end{pmatrix}$.
5. Determinar $\hat{P}(t)$, $\forall t \geq t_0$ resolviendo (4.9) en un periodo completo, por ejemplo entre t_0 y $t_0 + T$, y empleando la periodicidad del operador ($\hat{P}(t) = \hat{P}(t + T)$).
6. Sea $\hat{V} = \begin{pmatrix} \phi_1 & \phi_2 \end{pmatrix}$ la matriz cuyas columnas son los autovectores de $\hat{\mathcal{H}}_{ef}$. Determinar la exponencial matricial en la base diabática: $e^{-i\frac{t}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_{ef}} = \hat{V} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{t}{\hbar}\varepsilon_1} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{t}{\hbar}\varepsilon_2} \end{pmatrix} \hat{V}^{-1}$ como matriz dependiente del tiempo.
7. Evaluar, por (4.8), $\hat{U}(t, t_0) = \hat{P}(t)e^{-i\frac{t}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_{ef}}$ para cada instante deseado.

Este procedimiento se conoce como **método de Floquet**, y es una aplicación de una teoría más general sobre ecuaciones diferenciales de primer orden con coeficientes periódicos, cuyos orígenes se remontan a finales siglo XIX. Su aplicación en mecánica cuántica para determinar el operador de evolución de un sistema permite expresar éste, de acuerdo al paso 7, como producto de un operador periódico ($\hat{P}(t)$) con otro que posee una forma funcional cerrada ($e^{-i\frac{t}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_{ef}}$). Esto supone por lo general una ventaja computacional para el cálculo numérico de $\hat{U}(t, t_0)$ en un intervalo de medida superior a T , debido a que como en general este operador no es periódico (independientemente de que el hamiltoniano lo sea), sería de otro modo necesario computar la solución del sistema diferencial (4.2) en un dominio extenso; mientras que con este método es necesario computar únicamente la solución de (4.2) en $T + t_0$, y la de (4.9) en $(t_0, t_0 + T)$. Es decir, estamos minimizando la resolución de sistemas diferenciales para dominios extensos, a cambio de introducir otros cálculos intermedios que en general son menos costosos de realizar.

Señalar que este procedimiento es aplicable para cualquier sistema cuántico cuya evolución esté determinada por la ecuación de Schrödinger, cuyo hamiltoniano sea periódico en el tiempo y tenga un número finito de autovalores (i.e., que sea un sistema de dimensión finita).

4.2. Evolución Temporal de la Probabilidad de Transición

Aplicando el método de Floquet obtenemos el operador de evolución $\hat{U}(t, t_0)$, $\forall t \in J \subset [t_0, \infty)$, intervalo arbitrario. La probabilidad de transición entre dos estados cualesquiera de la base diabática se obtiene entonces como:

$$P_{trans}(t) = \left| \langle \varphi_{\uparrow}, t | \varphi_{\downarrow}, t_0 \rangle \right|^2 = \left| \langle \varphi_{\uparrow}, t | \hat{U}^{\dagger}(t, t_0) | \varphi_{\downarrow}, t \rangle \right|^2 = \left| U_{2,1}^{\dagger}(t, t_0) \right|^2 = |U_{2,1}(t, t_0)|^2, \quad (4.10)$$

donde la última igualdad se sigue del siguiente cálculo matricial. Recordando la unitariedad del operador de evolución:

$$U^{-1} = \frac{1}{\det U} \begin{pmatrix} U_{2,2} & -U_{1,2} \\ -U_{2,1} & U_{1,1} \end{pmatrix} = U^\dagger = \begin{pmatrix} U_{1,1}^* & U_{2,1}^* \\ U_{1,2}^* & U_{2,2}^* \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} U_{1,2} = -\det(U)U_{2,1}^* \\ U_{2,1} = -\det(U)U_{1,2}^* \end{cases},$$

donde hemos omitido la dependencia temporal por aliviar la notación, pero lo anterior es obviamente válido $\forall t \geq t_0$. Además, las matrices unitarias tienen determinante de módulo 1, con lo que se tiene:

$$\left| \langle \varphi_\uparrow, t | \varphi_\downarrow, t_0 \rangle \right|^2 = |U_{2,1}|^2 = |\det U|^2 |U_{1,2}^*|^2 = |U_{1,2}|^2 = \left| \langle \varphi_\downarrow, t | \varphi_\uparrow, t_0 \rangle \right|^2.$$

Luego la probabilidad de transición entre estados de la base diabática no depende de la elección del estado inicial, siempre y cuando el estado final sea el restante. Esta propiedad es general para todos los sistemas de dos niveles que satisfagan la ecuación de Schrödinger con un hamiltoniano hermítico (esto excluye el tratamiento mediante las ecuaciones de Bloch, donde en general se hace necesario especificar los estados inicial y final). De esta forma, vamos a emplear (4.10) para calcular la probabilidad de la transición $|\varphi_\downarrow, t_0 = 0\rangle \rightarrow |\varphi_\uparrow, t\rangle$ (P_{up}). Consideramos el hamiltoniano (1.1) con el estímulo (1.3), correspondiendo entonces los cruces evitados a $t | \varepsilon(t) = 0 \Rightarrow \omega t_1 = \arccos(-\varepsilon_0/A)$, $\omega t_2 = 2\pi - \omega t_1$.

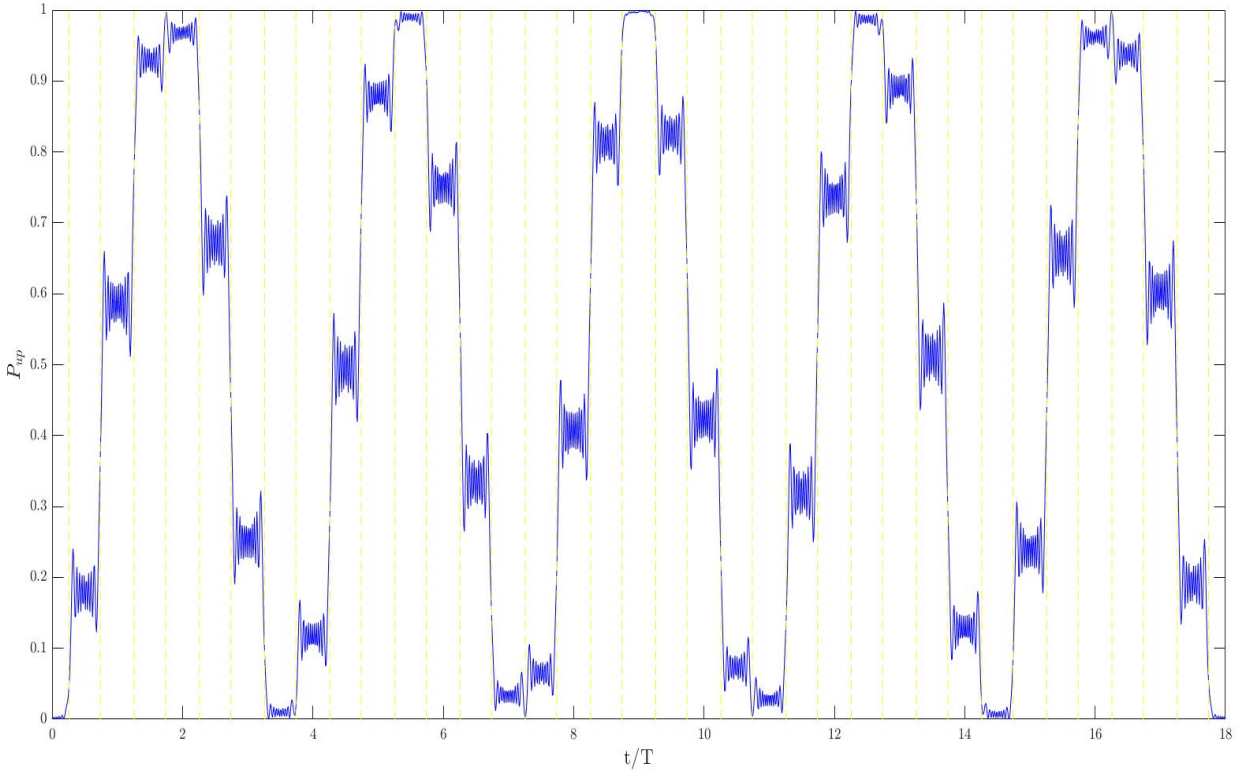


Figura 4.1: P_{up} frente a t/T , con $A/\Delta = 16$, $\varepsilon_0/\Delta = 1$ y $\omega/\Delta = 0,5$.

En la figura 4.1 se aprecia un comportamiento oscilatorio de P_{up} entre los valores 0 y 1. Las rectas amarillas marcan los valores $t/T = t_1/T + n$ y $t_2/T + n$ ($n \in \mathbb{N}$), con lo que se observa que la probabilidad de transición empieza a oscilar al acercarse un cruce evitado, con amplitud fuertemente creciente en los entornos de estos, y tras pasar uno; esta

función tiende a estabilizarse a un cierto valor, pero antes de conseguirlo la cercanía con el siguiente cruce provoca nuevas oscilaciones. Esto concuerda con el modelo de impulso adiabático (ver sección 2.1), ya que los cambios más significativos en la probabilidad de transición se dan en un entorno muy cercano a los cruces evitados. Lo mismo se aprecia en la figura 4.2, pero en esta ocasión P_{up} va alternando subidas con bajadas entre cruces consecutivos, similarmente al caso de la figura 4.3.

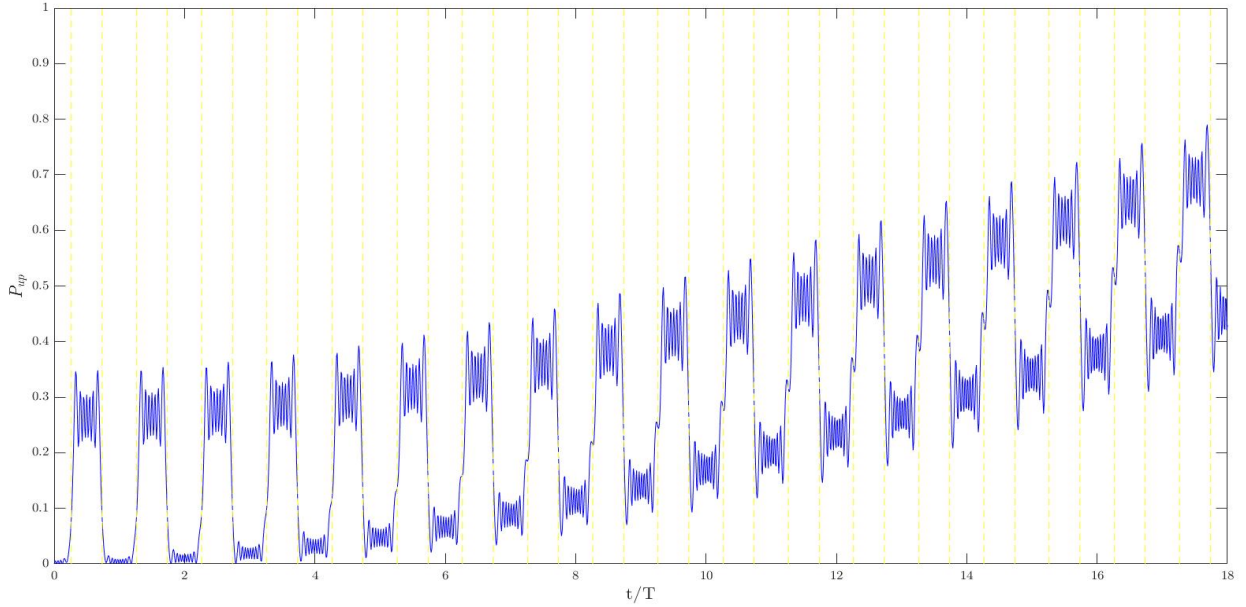


Figura 4.2: P_{up} frente a t/T , con $A/\Delta = 12$, $\varepsilon_0/\Delta = 1$ y $\omega/\Delta = 0,5$.

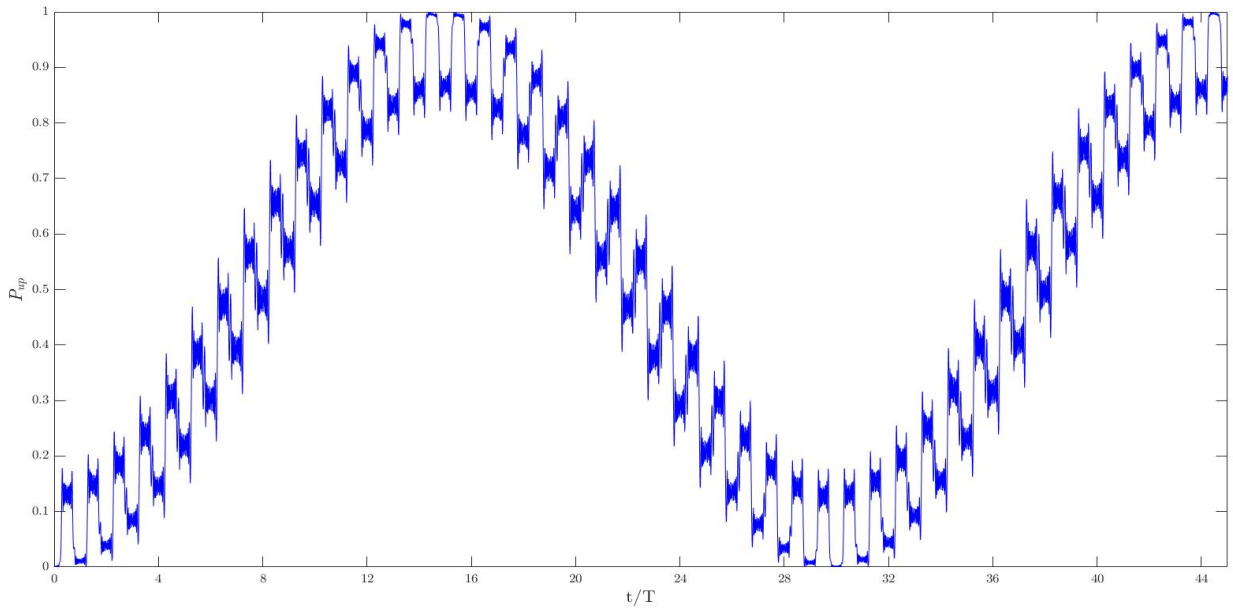


Figura 4.3: P_{up} frente a t/T , con $A/\Delta = 20$, $\varepsilon_0/\Delta = 1$ y $\omega/\Delta = 0,5$.

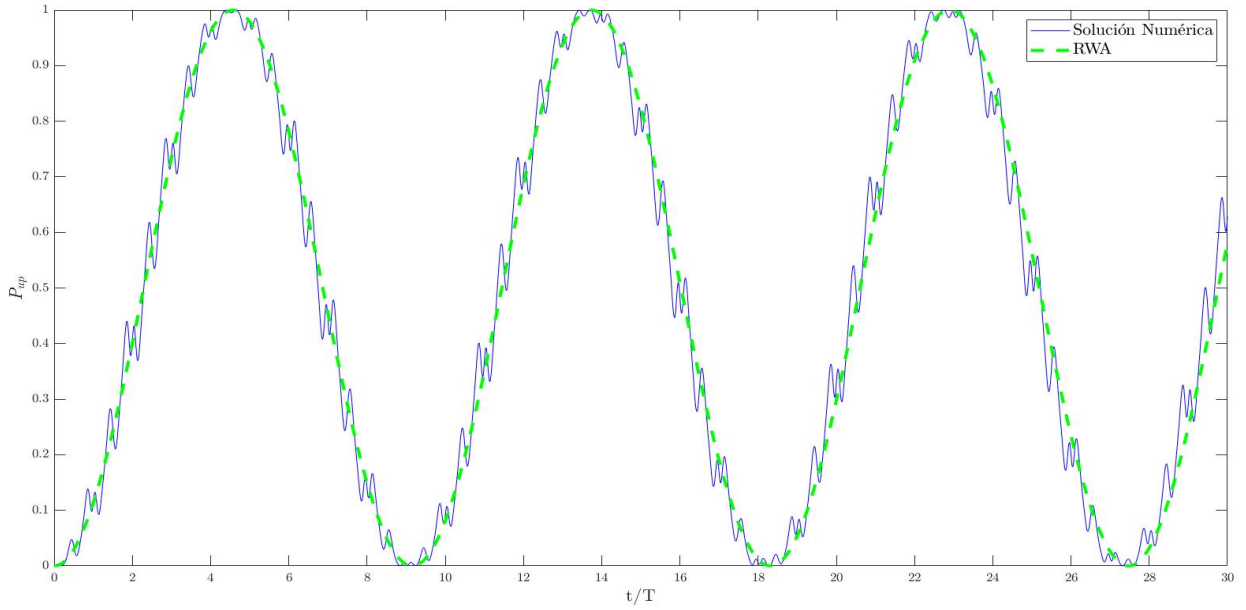


Figura 4.4: P_{up} frente a t/T , con $A/\Delta = 15$, $\varepsilon_0/\Delta = 3$ y $\omega/\Delta = 3$.

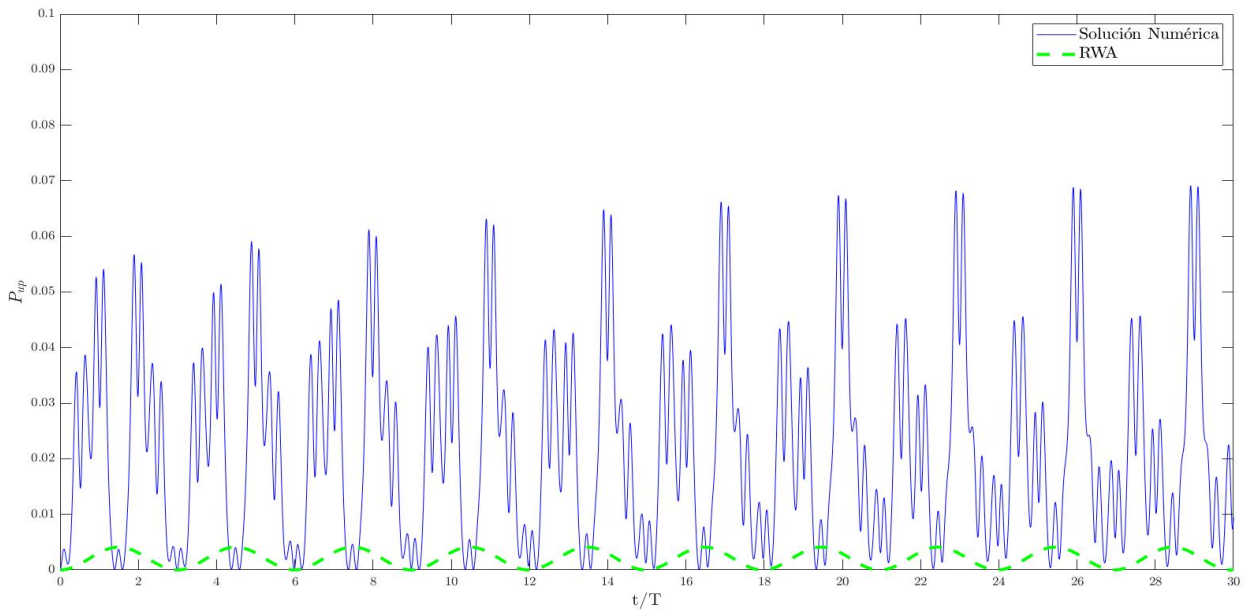


Figura 4.5: P_{up} frente a t/T , con $A/\Delta = 16$, $\varepsilon_0/\Delta = 1$ y $\omega/\Delta = 3$.

Al aumentar la frecuencia a niveles intermedios ($\omega \simeq \Delta$), se observa en la figura 4.4 cómo las oscilaciones de probabilidad provocadas por los cruces se ralentizan significativamente, con lo que la función se va asemejando localmente (en lugar de sólo globalmente) a una senoide, sin embargo existen combinaciones de amplitud y offset para los que se exhiben comportamientos más irregulares, de acuerdo con la figura 4.5. Si se sigue aumentando la frecuencia a niveles elevados ($\omega \gg \Delta$), P_{up} se convierte en una función trigonométrica completamente periódica, lo cual está en perfecto acuerdo con la predicción (3.20) de la aproximación de onda rotatoria del capítulo 3, tal y como se observa en las

figuras 4.6 y 4.7; de donde además se deduce que $\overline{P_{up}}$ es rápidamente decreciente cuando ε_0/ω se aleja de un número entero, característica también en acuerdo con los resultados de dicha aproximación. A frecuencias intermedias, como era de esperar se observa que esta aproximación en general no es adecuada, aunque en ciertos casos (particularmente, cuando $\varepsilon_0/\omega \in \mathbb{Z}$) sí puede serlo.

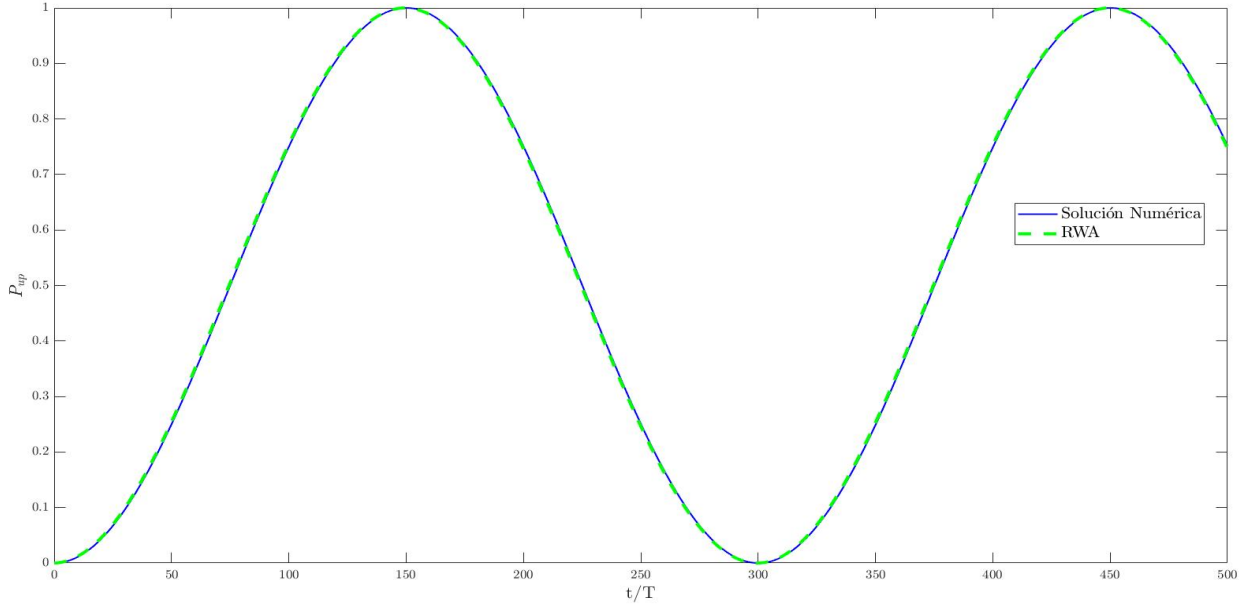


Figura 4.6: P_{up} frente a t/T , con $A/\Delta = 12$, $\varepsilon_0/\Delta = 0$ y $\omega/\Delta = 300$ ($\varepsilon_0/\omega = 0$).

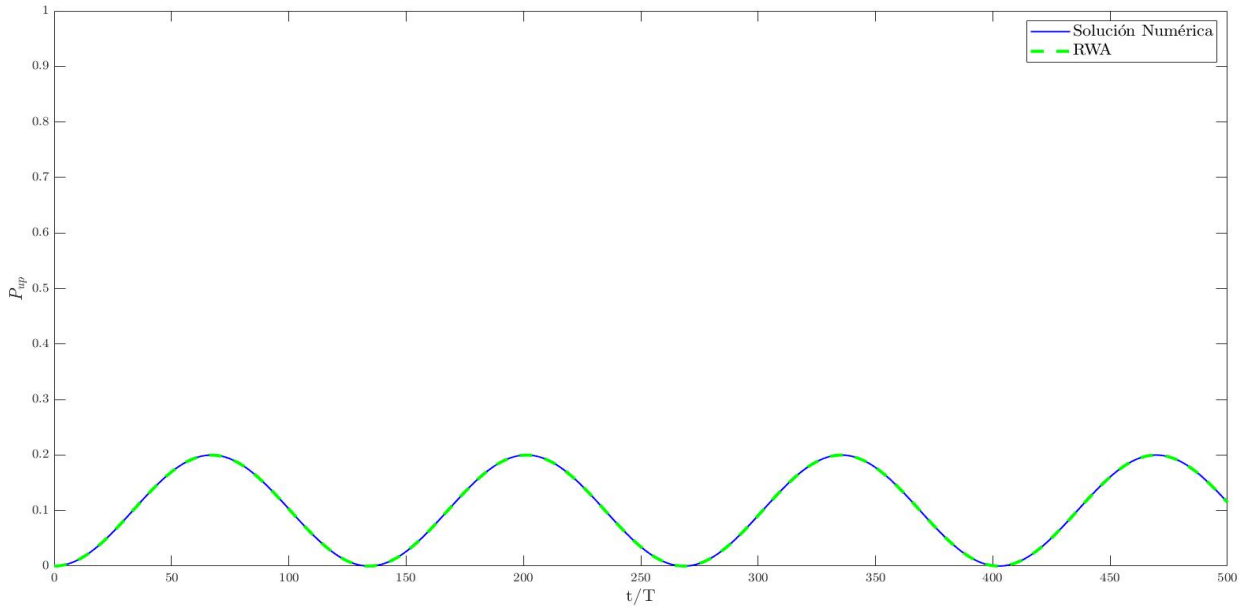


Figura 4.7: P_{up} frente a t/T , con $A/\Delta = 12$, $\varepsilon_0/\Delta = 2$ y $\omega/\Delta = 300$ ($\varepsilon_0/\omega = 0,0067$).

Por último, en la figura 4.8 se muestra el resultado para $\omega/\Delta \approx 0$. La probabilidad de transición en este caso es prácticamente nula (observar la escala del eje vertical) en todo

instante de tiempo. Nótese que en este caso el teorema adiabático no puede aplicarse ya que los niveles energéticos diabáticos sí se cruzan durante la evolución del sistema.

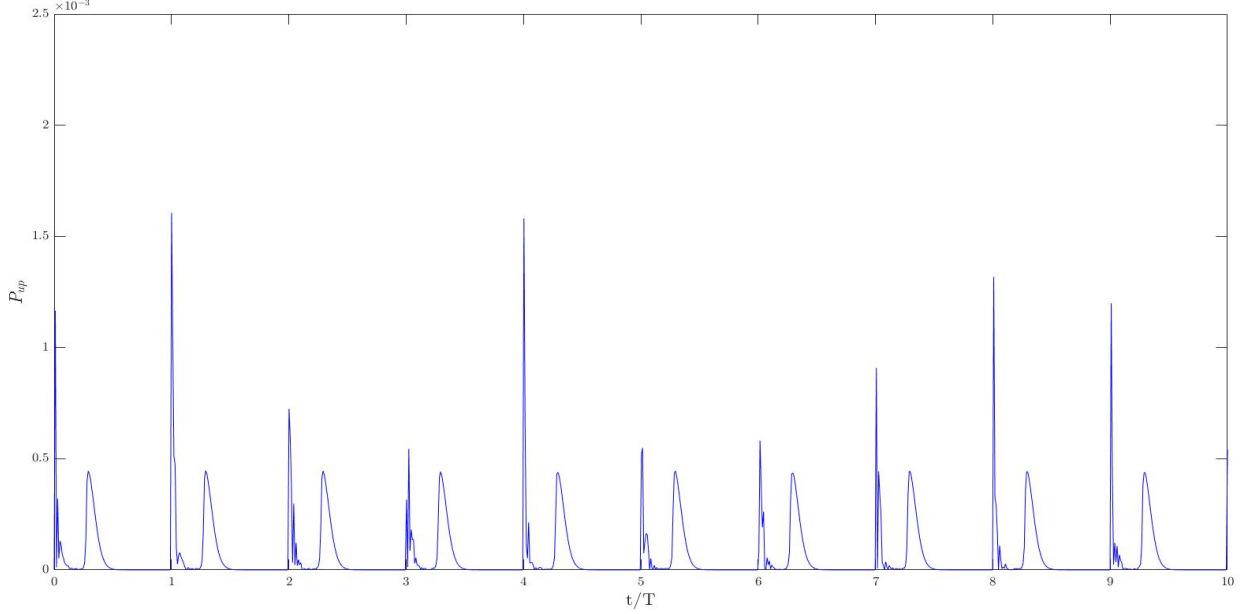


Figura 4.8: P_{up} frente a t/T , con $A/\Delta = 20$, $\varepsilon_0/\Delta = 3$ y $\omega/\Delta = 10^{-4}$.

4.3. Promediado de la Probabilidad de Transición

Extendemos la definición de promedio temporal de la probabilidad de transición entre estados de la base diabática (4.10) al caso en que ésta no es una función periódica como:

$$\overline{P_{up}} = \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{1}{s} \int_0^s \left| \langle \varphi_{\uparrow\downarrow}, (t_0 + \tau) | \hat{U}(t_0 + \tau, t_0) | \varphi_{\uparrow\downarrow}, t_0 \rangle \right|^2 d\tau. \quad (4.11)$$

De esta forma, podemos aplicar una aproximación de (4.11) sobre la probabilidad (4.10) obtenida numéricamente mediante el método de Floquet, calculando el área bajo la curva de probabilidad entre el tiempo inicial empleado en (4.2) y otro instante finito pero suficientemente grande. Consideraremos que un límite superior de integración s es adecuado si la diferencia con el promedio temporal empleando $5s$ es de orden 10^{-3} o inferior.

Por lo visto en la sección 4.2, el resultado numérico y el dado por la RWA para $\overline{P_{up}}$ deben coincidir (pues lo hacen las dependencias temporales) para frecuencias altas. Vamos a comparar en esta ocasión con el modelo de impulso adiabático, para lo cual consideramos el hamiltoniano (1.1) con el estímulo (1.2) en el método de Floquet. Vamos a comparar concretamente con las probabilidades promedio (2.58) y (2.59) correspondientes a las zonas 1 y 2 (ver sección 2.3), siendo la probabilidad promedio resultante la media ponderada según la medida de ambas zonas:

$$\overline{P_+} = \frac{1}{T} \left((t_2 - t_1) \overline{P_+^I} + (T + t_1 - t_2) \overline{P_+^{II}} \right), \quad (4.12)$$

donde t_1 y t_2 vienen dados por (2.4), y el tiempo inicial para el método de Floquet lo tomamos para coincidir con el tiempo de partida empleado en el desarrollo del modelo de impulso adiabático, es decir, $t_0 = t_1$. En favor de la exactitud, vamos a considerar el siguiente orden en la fase del teorema adiabático, siendo entonces el operador de evolución adiabático (2.13) (de acuerdo a ec. A.2a-[Shevchenko10]): $\hat{U}(t_f, t_i) = \exp\{-i(\zeta(t_f, t_i) + \frac{\pi}{4})\hat{\tau}_z\}$. Esto repercute en el análisis realizado únicamente en la fase de Stokes (2.38), que pasa a ser ((de acuerdo a ec. 25-[Shevchenko10])): $\theta_S = -\frac{\pi}{4} + \delta(\ln(\delta) - 1) + \arg(\Gamma(1 - i\delta))$; lo cual afecta a las probabilidades promedio (2.58) y (2.59) a través de los parámetros (2.43) y (2.44).

Lo último que debemos tener en cuenta para la comparativa es considerar la transición entre estados de la base adiabática, con lo que (4.10) ahora corresponde a:

$$P_{trans}(t) = P_+(t) = |\langle \varphi_+, t | \varphi_-, t_0 \rangle|^2 \stackrel{(2.3)}{=} \left| \left[\beta_-(t) \langle \varphi_\uparrow, t | - \beta_+(t) \langle \varphi_\downarrow, t | \right] \right. \\ \left. \left[\beta_+(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) | \varphi_\uparrow, t \rangle + \beta_-(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) | \varphi_\downarrow, t \rangle \right] \right|^2 = \left| \beta_-(t) \beta_+(t_0) U_{1,1}^*(t, t_0) \right. \\ \left. + \beta_-(t) \beta_-(t_0) U_{2,1}^*(t, t_0) - \beta_+(t) \beta_+(t_0) U_{1,2}^*(t, t_0) - \beta_+(t) \beta_-(t_0) U_{2,2}^*(t, t_0) \right|^2. \quad (4.13)$$

Empleando (4.12) para el cálculo con el modelo de impulso adiabático (calculando de forma exacta la fase de Stokes con el término de orden superior) y haciendo el cambio de base dado por (4.13) sobre el integrando de (4.11) para el cálculo del promediado con el método de Floquet, se obtienen los resultados de las figuras 4.9, 4.10 y 4.11.

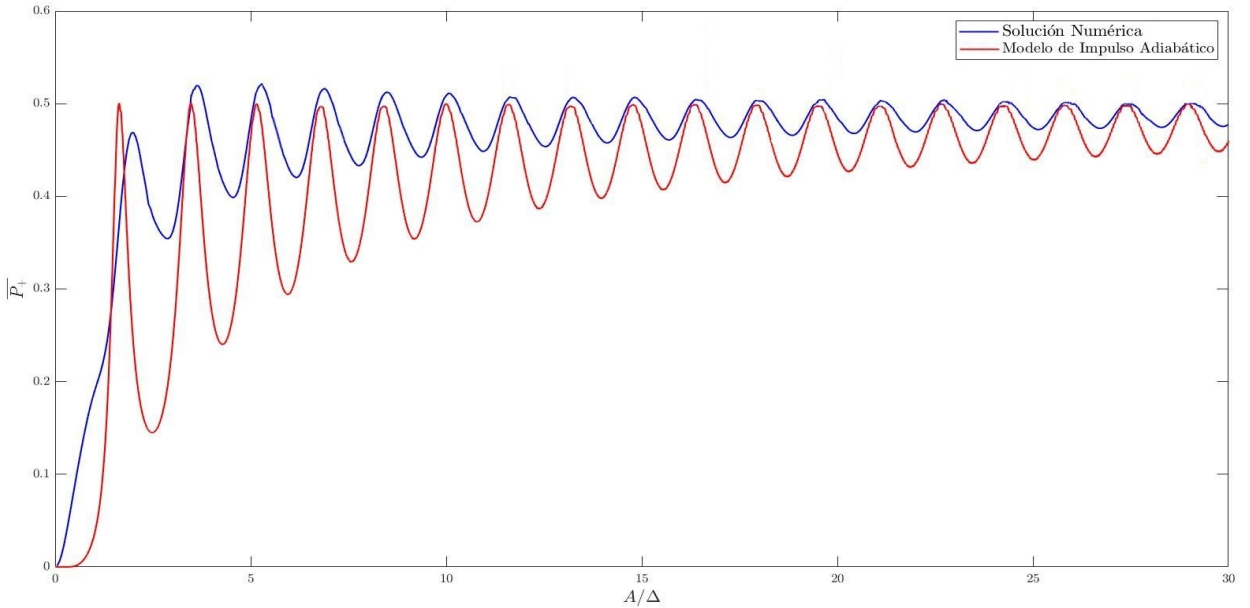


Figura 4.9: $\overline{P_+}$ frente a A/Δ , con $\varepsilon_0/\Delta = 0$, y $\omega/\Delta = 0,5$.

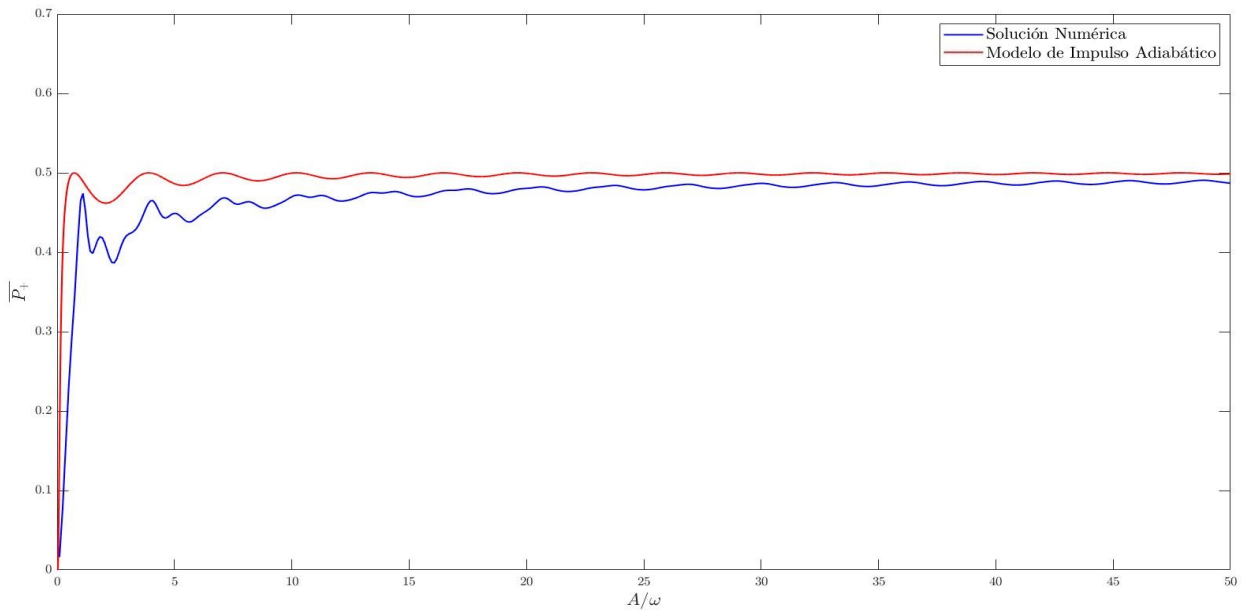


Figura 4.10: \overline{P}_+ frente a A/Δ , con $\varepsilon_0/\Delta = 0$, y $\omega/\Delta = 3$.

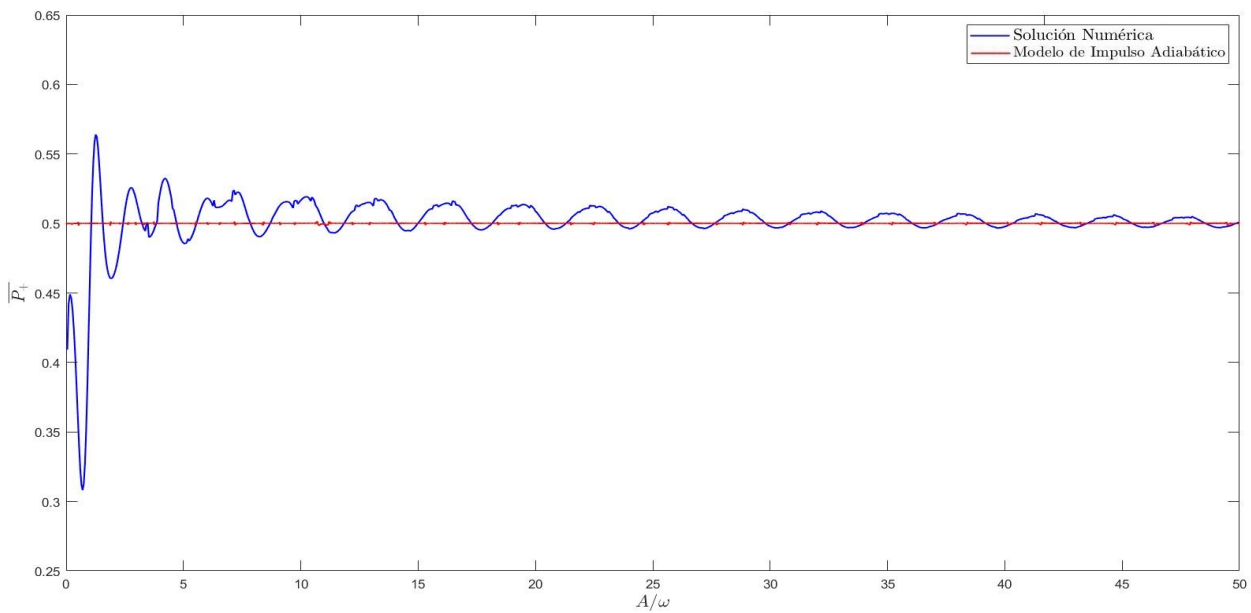


Figura 4.11: \overline{P}_+ frente a A/ω , con $\varepsilon_0/\omega = 0$, y $\omega/\Delta = 300$.

Se observa que las discrepancias entre las dos soluciones disminuyen con A . Además, cuando $A \rightarrow \infty$, ambos procedimientos tienden a $\overline{P}_+ = 0,5$ para todas las frecuencias. Se aprecia que las oscilaciones obtenidas mediante el modelo de impulso adiabático decrecen fuertemente al aumentar la frecuencia.

Conclusiones

El estudio realizado acerca de la probabilidad de transición entre los dos niveles del sistema pone de manifiesto los límites del teorema adiabático para describir un proceso real. Para la práctica totalidad del rango de frecuencias ω , existe una amplia región del espacio de parámetros (A, ε_0) donde dicha probabilidad (o su promedio temporal) entre estados adiabáticos es del orden de al menos 0,1, de acuerdo con los cálculos numéricos. Para altas frecuencias, dicha ruptura de la adiabaticidad era de esperar, pero para bajas; constituye un hecho remarcable. El modelo de impulso adiabático permite explicar este hecho mediante la adquisición de fases dinámicas en las regiones entre cruces evitados, pudiendo resultar en interferencias constructivas o destructivas según los valores de los tres parámetros anteriores, lo cual tiene un impacto importante en el comportamiento del sistema.

Los resultados teóricos predichos por la aproximación de onda rotatoria para la probabilidad de transición a frecuencias elevadas están en excelente acuerdo con los numéricos, pudiendo resultar adecuada su aplicación incluso para frecuencias intermedias en ciertas regiones paramétricas. Esto permite ejercer un control fiable sobre la evolución del sistema, en el sentido de que es posible fijar la amplitud y el offset del estímulo para impedir las transiciones de nivel; lo cual no es en general factible para frecuencias más reducidas.

Conocidos A , ε_0 y ω , los resultados obtenidos pueden utilizarse para estimar experimentalmente el parámetro Δ , propio en general del sistema. Para ello puede observarse el impacto en la probabilidad promedio de variar controladamente una de las tres magnitudes anteriores, manteniendo fijas las otras dos. Esto requiere medir repetidamente la energía del sistema en distintos instantes de tiempo, siempre tras haber preparado (o medido) el sistema en su estado fundamental. También sería posible estimar los parámetros de interacción del sistema con su entorno (fijado éste): T_1 y T_2 , una vez conocido Δ . Para ello podría medirse la longitud del tramo de probabilidad promedio nula fijados ω (suficientemente elevada) y $\varepsilon_0 = k\omega$ ($k \in \mathbb{Z}$), y variando A ; además de otras características como el valor de los máximos.

Apéndice A

Propiedades de las Matrices de Pauli

Empleando la notación introducida en la sección 1.3, los operadores de Pauli están representados en la base diabática $\{(1,0)^t, (0,1)^t\}$ por las siguientes matrices, que son las denominadas matrices de Pauli:

$$\hat{\tau}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

A partir de ellas se definen además:

$$\hat{\tau}_+ = \hat{\tau}_x + i\hat{\tau}_y = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_- = \hat{\tau}_x - i\hat{\tau}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

Se deduce directamente que estas matrices cumplen las siguientes propiedades:

- Toda matriz compleja 2 x 2 puede expresarse como combinación lineal con coeficientes complejos de \hat{I} (matriz identidad de orden 2), $\hat{\tau}_x$, $\hat{\tau}_y$, y $\hat{\tau}_z$.

▪

$$\hat{\tau}_i^2 = \hat{I}, \quad \hat{\tau}_i^\dagger = \hat{\tau}_i, \quad \forall i = x, y, z. \quad (\text{A.3})$$

▪

$$\hat{\tau}_m \hat{\tau}_n = \delta_{mn} \hat{I} + i \sum_{l=x,y,z} \varepsilon_{mnl} \hat{\tau}_l, \quad \forall m, n = x, y. \quad (\text{A.4})$$

donde ε_{ijk} es el denominado símbolo de Levi-Civita.

- Dado $\alpha \in \mathbb{R}$:

$$e^{i\alpha \hat{\tau}_z} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

Prueba: empleando la definición de exponencial de una matriz, se tiene:

$$e^{i\alpha\hat{\tau}_z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\alpha\hat{\tau}_z)^n}{n!} \stackrel{(A.3)}{=} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^{2k}}{(2k)!} \hat{I} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^{2l+1}}{(2l+1)!} \hat{\tau}_z = \hat{I} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \alpha^{2k}}{(2k)!} + \hat{\tau}_z \sum_{l=0}^{\infty} i \frac{(-1)^l (\alpha)^{2l+1}}{(2l+1)!} = \cos(\alpha) \hat{I} + i \operatorname{sen}(\alpha) \hat{\tau}_z = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix}.$$

■
$$e^{i\alpha\hat{\tau}_z} \hat{\tau}_z e^{-i\alpha\hat{\tau}_z} = \hat{\tau}_z. \quad (A.6)$$

■
$$e^{i\alpha\hat{\tau}_z} \hat{\tau}_x e^{-i\alpha\hat{\tau}_z} = \begin{pmatrix} 0 & e^{i2\alpha} \\ e^{-i2\alpha} & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (e^{i2\alpha} \hat{\tau}_+ + e^{-i2\alpha} \hat{\tau}_-). \quad (A.7)$$

■
$$e^{-i\alpha\hat{\tau}_z} \hat{\tau}_+ e^{i\alpha\hat{\tau}_z} = e^{-i2\alpha} \hat{\tau}_+. \quad (A.8)$$

■
$$e^{-i\alpha\hat{\tau}_z} \hat{\tau}_- e^{i\alpha\hat{\tau}_z} = e^{i2\alpha} \hat{\tau}_-. \quad (A.9)$$

Se define el **vector de Pauli** como:

$$\hat{\vec{\tau}} = \hat{\tau}_x \vec{u}_x + \hat{\tau}_y \vec{u}_y + \hat{\tau}_z \vec{u}_z, \quad (A.10)$$

siendo $\hat{\vec{\tau}} \in \mathcal{M}_2(\mathbb{C}) \otimes \mathbb{R}^3$ (\otimes denota el producto tensorial entre espacios vectoriales) y $\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z \in \mathbb{R}^3$ los elementos de una base cartesiana ortonormal. Definiendo el siguiente producto tensorial:

$$\begin{aligned} \circ : \mathbb{R}^3 \times (\mathcal{M}_2(\mathbb{C}) \otimes \mathbb{R}^3) &\longrightarrow \mathcal{M}_2(\mathbb{C}) \\ \vec{u}_n \circ \hat{\vec{\tau}} = (u_{n_x}, u_{n_y}, u_{n_z}) \circ \hat{\vec{\tau}} &\longmapsto u_{n_x} \hat{\tau}_x + u_{n_y} \hat{\tau}_y + u_{n_z} \hat{\tau}_z, \end{aligned} \quad (A.11)$$

se demuestra que (ec. 16.62-[Merzbacher]):

$$\exp\left(i\alpha(\vec{u}_n \circ \hat{\vec{\tau}})\right) = \cos(\alpha) \hat{I} + i \operatorname{sen}(\alpha) (\vec{u}_n \circ \hat{\vec{\tau}}), \quad (A.12)$$

siendo $\alpha \in \mathbb{R}$ y $\vec{u}_n \in \mathbb{R}^3$ unitario.

Referencias

- [Ashhab] Sahel Ashhab et Al. *Two-Level Systems Driven by Large-Amplitude Fields*. Physical Review A, Vol. 75, 2007.
- [Blum] Karl Blum. *Density Matrix Theory and Applications*, Third Edition. Springer, 2012.
- [Damski] Bogdan Damski, Wojciech Zurek. *Adiabatic-Impulse Approximation for Avoided Level Crossings: from Phase Transition Dynamics to Landau-Zener Evolutions and back again*. Physical Review A, Vol. 73, 2006
- [Delone] Nikolai Delone, Vladimir Krainov. *Atoms in Strong Light Fields*, First Edition. Springer Verlag, 1985.
- [Fujii] Kazuyuki Fujii. *Introduction to the Rotating Wave Approximation (RWA): Two Coherent Oscillations*. Journal of Modern Physics, 2013
- [Gradshteyn] Izrail Gradshteyn, Iosif Ryzhik. *Table of Integrals, Series and Products*, Seventh Edition. Academic Press, 2007.
- [Griffiths] David Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*, Second Edition. Pearson Prentice Hall, 2004.
- [Jansen] Sabine Jansen. *Bounds for the Adiabatic Approximation with Applications to Quantum Computation*. Journal of Mathematical Physics, Vol. 48, 2007.
- [Kato] Tosio Kato. *On the Adiabatic Theorem of Quantum Mechanics*. Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 5, 1950.
- [Kayanuma94] Yosuke Kayanuma. *Role of Phase Coherence in the Transition Dynamics of a Periodically Driven Two-Level System*. Physical Review A, Vol. 50, 1994
- [Kayanuma97] Yosuke Kayanuma. *Stokes Phase and Geometrical Phase in a Driven Two-Level System*. Physical Review A, Vol. 55, 1997.
- [Landau32] Lev Landau. *On the Theory of Transfer of Energy at Collisions I & II*. Physikalisches Zeitschrift der Sowjetunion, Vol. 1 & 2, 1932.
- [Landau77] Lev Landau, Evgeny Lifshitz. *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, Third Edition. Pergamon Press, 1977.
- [Majorana] Ettore Majorana. *Oriented Atoms in Variable Magnetic Field*. Il Nuovo Cimento, Vol. 9, 1932.

- [Merzbacher] Eugen Merzbacher. *Quantum Mechanics*, Third Edition. John Wiley & Sons, 1998.
- [Oliver] William Oliver et Al. *Mach-Zehnder Interferometry in a Strongly Driven Superconducting Qubit* Science, Vol. 310, Issue 5754, 2005.
- [Rynne] Brian Rynne, Martin Youngson. *Linear Functional Analysis*, Second Edition. Springer, 2008.
- [Shevchenko05] Sergey Shevchenko et Al. *Dynamic Behaviour of Josephson-Junction Qubits: Crossover between Rabi Oscillations and Landau-Zener Transitions*. Low Temperature Physics, Vol. 31, 2005
- [Shevchenko10] Sergey Shevchenko et Al. *Landau-Zener-Stückelberg Interferometry*. Physics Reports, Vol. 492, 2010
- [Stückelberg] Ernst Stückelberg. *Theory of Inelastic Collisions between Atoms*. Helvetica Physica Acta, Vol. 5, 1932.
- [Wolfram] The Wolfram Mathematical Functions Site: <http://functions.wolfram.com/Bessel-TypeFunctions/BesselJ/29/> (consultado en abril de 2019)
- [Zener] Clarence Zener. *Non-Adiabatic Crossing of Energy Levels*. Proceedings of the Royal Society of London A, Vol. 137, 1932.