



Universidad de Sevilla

FACULTAD DE FÍSICA

**Aplicaciones del desarrollo de  
Magnus a la Mecánica Cuántica**

*Trabajo Fin de Grado*

GRADO EN FÍSICA

**Estudiante: Guillermo Martín Romero**

**Tutor: Jesús Casado Pascual**

Junio 2023

# Resumen

En este trabajo de fin de grado se aborda el estudio de los desarrollos perturbativos de Magnus y de Floquet-Magnus como herramientas para la resolución de problemas de evolución temporal en la Mecánica Cuántica. Estos procedimientos son ampliamente utilizados en diversos campos de la Física Cuántica, como la teoría de sistemas cuánticos abiertos y la Física de la Materia Condensada.

El primero que se muestra es el desarrollo perturbativo de Magnus. Con él, se presenta una descripción sistemática de la evolución temporal y puede ser utilizada para calcular soluciones aproximadas en situaciones donde los métodos convencionales no son aplicables o en casos donde su acción complica la resolución de manera considerable.

Por otro lado, el desarrollo de Floquet-Magnus se enfoca en la evolución de sistemas cuánticos sujetos a campos externos periódicos. El desarrollo de Floquet-Magnus es especialmente útil para describir sistemas cuánticos sometidos a campos electromagnéticos oscilantes, como sistemas de átomos y moléculas bajo la influencia de campos láser.

En este trabajo, se revisan los fundamentos teóricos de ambas técnicas y se exploran sus aplicaciones en la resolución de problemas de evolución temporal en Mecánica Cuántica. Se presentan ejemplos concretos de su uso, mostrándose además las ventajas y limitaciones de cada una de estas alternativas.

Estas técnicas ofrecen enfoques prometedores y poderosos para abordar diversos problemas en Física Cuántica y representan áreas de interés activo para la investigación en el campo de la Física Teórica.

# Abstract

This undergraduate thesis focuses on the study of the Magnus and the Floquet-Magnus perturbative expansions techniques for solving time evolution problems in Quantum Mechanics. These techniques are widely used in various fields of Quantum Physics, such as the theory of open Quantum Systems and Condensed Matter Physics.

The first one that is shown is the Magnus perturbative expansion. With it, a systematic description of temporal evolution is presented and can be used to calculate approximate solutions in situations where conventional methods are not applicable or in cases where their action significantly complicates the resolution.

On the other hand, the Floquet-Magnus expansion focuses on the evolution of quantum systems subjected to a periodic external field. This method, based on Floquet theory, provides a simplified and efficient description of the temporal evolution of periodic systems. The Floquet-Magnus expansion is particularly useful for describing quantum systems subjected to oscillating electromagnetic fields, such as atoms and molecules under the influence of laser field.

In this thesis, the theoretical foundations of both methods are reviewed, and their applications in solving time evolution problems in Quantum Mechanics are exposed. Concrete examples of their use in specific situations are presented so that we can compare the advantages and limitations of these techniques.

These techniques offer promising and powerful approaches to address various problems in quantum physics and represent actively researched areas in the field of Theoretical Physics.

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>I</b>
<b>Abstract</b>	<b>II</b>
<b>Índice general</b>	<b>III</b>
<b>1 Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2 Desarrollo de Magnus</b>	<b>3</b>
2.1 Motivación . . . . .	3
2.2 Notación . . . . .	4
2.3 Teorema de Magnus . . . . .	6
2.4 Términos del Desarrollo . . . . .	10
<b>3 Floquet-Magnus</b>	<b>15</b>
3.1 Teoría de Floquet . . . . .	15
3.2 Desarrollo de Floquet-Magnus . . . . .	19
3.3 Términos del desarrollo . . . . .	21
<b>4 Aplicaciones a la Mecánica Cuántica</b>	<b>24</b>
4.1 Modelo I. Modelo periódico. . . . .	24
4.1.1 Desarrollo de Magnus . . . . .	25
4.1.2 Desarrollo de Floquet-Magnus . . . . .	27
4.1.3 Resultados . . . . .	29
4.2 Modelo II. Hamiltoniano por partes. . . . .	32
4.2.1 Desarrollo de Magnus . . . . .	33
4.2.2 Resultados . . . . .	36

4.3	Transformación del problema. . . . .	38
4.3.1	Términos Floquet-Magnus . . . . .	38
4.3.2	Transformación del problema. . . . .	42
<b>5</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>45</b>
	<b>Apéndice I: Demostración de la ec.(2.14)</b>	<b>46</b>
	<b>Apéndice II: Deducción de los términos del desarrollo de Magnus</b>	<b>47</b>
	<b>Apéndice III: Cálculo del término general del desarrollo de Floquet-Magnus.</b>	<b>49</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>51</b>

# 1. Introducción

La evolución temporal de los sistemas cuánticos cerrados se describe mediante la ecuación

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}(t) |\Psi(t)\rangle, \quad (1.1)$$

donde  $|\Psi(t)\rangle$ <sup>1</sup> es el vector estado de un cierto sistema físico en el instante de tiempo  $t$ ,  $i$  es la unidad imaginaria y  $\hbar$  es la denominada constante de Planck<sup>2</sup>. Por otro lado,  $\hat{H}(t)$  es el hamiltoniano del sistema en ese mismo instante que, en Mecánica Cuántica, es el operador que representa la energía total de un sistema cuántico.

La ecuación (1.1) es la conocida ecuación de Schrödinger, que fue descrita por primera vez por el físico austriaco Erwin Schrödinger en 1925 en su artículo [3]. A continuación, introducimos el operador de evolución temporal  $\hat{U}(t, t_0)$  tal que

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle. \quad (1.2)$$

Este operador transforma el vector estado del sistema en un instante de tiempo  $t_0$  en el correspondiente en cualquier otro instante  $t$ . De forma análoga a la ecuación (1.1), existe una ecuación diferencial que rige el comportamiento del operador de evolución temporal. Se obtiene de forma directa introduciendo la definición (1.2) en la ecuación (1.1). Se llega a

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0). \quad (1.3)$$

Evidentemente, el operador de evolución temporal debe verificar que su actuación entre dos instantes de tiempos idénticos debe ser dejar invariante el vector estado. Por ello, la condición inicial que se debe imponer a (1.3) es

$$|\Psi(t_0)\rangle = \hat{U}(t_0, t_0) |\Psi(t_0)\rangle \rightarrow \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}, \quad (1.4)$$

---

<sup>1</sup>Se está utilizando la notación de Dirac, introducida por el físico británico Paul Dirac (1902-1984) en 1939 en su artículo [1].

<sup>2</sup>Introducida por el físico alemán Max Planck (1858-1947) en su artículo [2].

donde  $\hat{I}$  denota al operador identidad en el espacio de Hilbert <sup>3</sup> donde trabajemos. Por tanto, resolviendo el problema (1.3) con la condición inicial (1.4) quedaría totalmente determinada la evolución de un sistema cuántico. Este no es un problema sencillo en absoluto y, en general, no existen soluciones analíticas para problemas con un hamiltoniano que dependa de forma arbitraria del tiempo.

La solución del problema para un hamiltoniano que sea independiente del tiempo  $\hat{H}$  es prácticamente trivial y quedaría como

$$i\hbar \frac{d\hat{U}(t)}{dt} = \hat{H}\hat{U}(t) \rightarrow \hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t},$$

donde aquí hemos usado ya la notación que usaremos en la mayor parte del documento que es tomar el origen arbitrario de tiempos  $t_0 = 0$  y denotar  $\hat{U}(t, 0) \equiv \hat{U}(t)$  para simplificar la notación.

Los métodos perturbativos tradicionales para aproximar la solución de (1.3) presentan el problema de que, al truncar la serie, se pierde la unitariedad del operador evolución  $\hat{U}(t)$ . Sin embargo, mediante el método de Magnus, para cualquier orden de aproximación se preserva esta propiedad, de la forma que describiremos en las siguientes secciones. Este trabajo se va a centrar, en primer lugar, en utilizar el denominado desarrollo de Magnus <sup>4</sup> en el que se propone una solución tipo exponencial para la ecuación (1.3) y se procede a desarrollar el argumento de la exponencial obteniéndose, en general, mejores resultados.

Por otro lado, se va a tratar también el método de Floquet-Magnus que es especialmente útil cuando buscamos una aproximación del operador de evolución temporal en sistemas cuánticos sometidos a campos externos periódicos. Como se verá en su sección, sólo necesitaremos obtener la aproximación para un periodo temporal, siendo extendible a cualquier instante de tiempo. Este último punto es donde recae principalmente la utilidad y la potencia de este método.

A continuación, introduciremos el desarrollo de Magnus y obtendremos la forma general que presentan los términos de la serie. Asimismo, lo aplicaremos a la resolución de algunos problemas de la Mecánica Cuántica comparando la solución analítica obtenida con la numérica.

---

<sup>3</sup> En resumen es un espacio vectorial completo con producto interno. Véase el artículo [4] para profundizar más acerca de espacios de Hilbert.

<sup>4</sup> Desarrollado por Wilhelm Magnus (1907-1990), un matemático germano-americano, en [5].

## 2. Desarrollo de Magnus

### 2.1. Motivación

Los métodos perturbativos tradicionales buscan descomponer, de forma aproximada, el operador de evolución temporal como una suma donde cada término de orden menor tenga una influencia más importante sobre los resultados. Como ya se comentó en la introducción, este tipo de desarrollos presentan un problema notable. El dilema recae en la pérdida de unitariedad a la hora de truncar la serie. Cuando realizamos un desarrollo perturbativo del operador evolución de la forma

$$\hat{U}(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{U}_k(t),$$

y truncamos la serie en algún término (no podemos trabajar con infinitos términos en la práctica por limitaciones técnicas) no tendremos garantizada la unitariedad del operador evolución temporal aproximado.

Wilhelm Magnus hizo importantes contribuciones a varios campos de las matemáticas, principalmente a la teoría de grupos. En este trabajo nos vamos a centrar en su artículo original [5], donde se recoge la, muy posiblemente, mayor aportación científica de su carrera. En él, propuso otra forma de abordar el problema de encontrar la solución de la ecuación diferencial (1.3) que consistía principalmente en expresarla como

$$\hat{U}(t) = e^{\hat{\Omega}(t)}. \tag{2.1}$$

Concretamente, buscaremos un desarrollo en serie de  $\hat{\Omega}(t)$ , siendo más fácil de garantizar la antihermiticidad de los términos del desarrollo que la unitariedad según métodos perturbativos tradicionales. De esta forma, si el operador  $\hat{\Omega}(t)$  es antihermítico <sup>1</sup> se veri-

---

<sup>1</sup> Un operador  $\hat{A}$  antihermítico debe verificar que  $\hat{A}^\dagger = -\hat{A}$ , donde  $\hat{A}^\dagger$  denota el operador adjunto de  $\hat{A}$ .

ficaría que el operador evolución sería unitario ya que

$$\hat{U}^\dagger(t) \cdot \hat{U}(t) = e^{\hat{\Omega}^\dagger(t)} e^{\hat{\Omega}(t)} = e^{-\hat{\Omega}(t)} e^{\hat{\Omega}(t)} = \hat{U}(t) \cdot \hat{U}^\dagger(t) = \hat{I}.$$

Uno de los principales retos que plantea esta propuesta de Magnus es encontrar una forma analítica para el cálculo de la derivada de una exponencial del tipo (2.1). Motivemos el problema recordando el procedimiento a seguir con funciones no matriciales.

En principio, cuando trabajamos con funciones la respuesta a la pregunta acerca del cálculo de una derivada de una exponencial es trivial y se calcula como

$$\frac{de^{f(t)}}{dt} = \frac{df}{dt} e^{f(t)} = e^{f(t)} \frac{df}{dt},$$

siendo  $f$  una función derivable definida  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ . Sin embargo, esto no se puede aplicar para el caso en el que tenemos en la exponencial un operador ya que, en general,  $\hat{\Omega}(t)$  y su derivada temporal no conmutan. Por lo que habría que buscar otra forma de encontrar la derivada con respecto al tiempo de la exponencial de un operador con una cierta dependencia temporal.

La introducción de la propuesta de Magnus supone un esfuerzo matemático mayor a priori en la forma que las expresiones matemáticas que aparecen son más complejas que aplicar un método perturbativo usual. Sin embargo, los resultados que produce junto con la propiedad de conservación de la unitariedad del operador evolución hacen que sea un método muy usado en la resolución de problemas de este tipo actualmente.

## 2.2. Notación

Todo este tratamiento requiere del uso de una notación que simplifique las expresiones que aparecen. Vamos a introducir algunos operadores y otros conceptos que usaremos en el desarrollo.

**Definición 1.** Operador  $\text{ad}_{\hat{A}}[\cdot]$ . Su acción sobre un operador cualquiera  $\hat{B}$  es la siguiente

$$\text{ad}_{\hat{A}}[\hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}], \quad (2.2)$$

donde  $[\cdot, \cdot]$  define el conmutador de dos operadores, es decir,  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ . También se define su acción sucesiva del modo

$$\text{ad}_{\hat{A}}^0[\hat{B}] = \hat{B} \quad (2.3)$$

$$\text{ad}_{\hat{A}}^n[\hat{B}] = [\hat{A}, \text{ad}_{\hat{A}}^{n-1}[\hat{B}]], \quad (2.4)$$

donde entendemos  $n$  como números naturales, es decir,  $n \in \mathbb{N}$ .

**Definición 2.** Operador  $\text{Ad}_{\hat{A}}[\cdot]$ . Se define como la exponencial del operador  $\text{ad}_{\hat{A}}$ , es decir,

$$\text{Ad}_{\hat{A}}[\hat{B}] = e^{\text{ad}_{\hat{A}}[\hat{B}]} = e^{[\hat{A}, \hat{B}]}.$$
 (2.5)

**Definición 3.** Operador  $\text{dexp}_{\hat{A}}[\cdot]$ . Su actuación se define como sigue

$$\text{dexp}_{\hat{A}}[\hat{B}] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+1)!} \text{ad}_{\hat{A}}^n[\hat{B}] \equiv \frac{\text{Ad}_{\hat{A}} - \hat{I}}{\text{ad}_{\hat{A}}}[\hat{B}].$$
 (2.6)

Continuamos introduciendo los números de Bernoulli, que fueron introducidos por Jakub Bernoulli (1654-1705), hermano mayor del conocido matemático Jean Bernoulli (1667-1748). Fue Abraham de Moivre (1667-1754) quien atribuiría este nombre a la serie de números con la que trabajó Jakub en muchas aportaciones. De los artículos [6] y [7] podemos sacar la siguiente definición.

**Definición 4.** Números de Bernoulli,  $B_n$ . Hay varios criterios disponibles para definir estos números, pero en este trabajo se seguirá el siguiente. Se definen los números de Bernoulli como los coeficientes del desarrollo en serie de la función  $\frac{x}{e^x-1}$ . De esta forma queda que

$$G(x) = \frac{x}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{x^n}{n!}.$$
 (2.7)

Los primeros números de Bernoulli son  $B_0 = 1$ ,  $B_1 = -\frac{1}{2}$ ,  $B_2 = \frac{1}{6}$ ,  $B_3 = 0$ , etc. También será útil enunciar las siguientes propiedades

$$B_m = -m! \sum_{k=0}^{m-1} \frac{B_k}{(m+1-k)!k!},$$
 (2.8)

$$\frac{e^x - 1}{x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{(n+1)!}.$$
 (2.9)

La primera es una relación de recurrencia entre los números de Bernoulli y la segunda es una expresión que nos servirá más adelante<sup>2</sup>.

Con todas estas definiciones y la idea del desarrollo motivada pasamos a obtener la forma de la ecuación que debe de cumplir el operador  $\hat{\Omega}(t)$  que aparece en el argumento de la exponencial de la expresión (2.1). Viene recogida en el teorema de Magnus, que lo enunciaremos al final de la sección siguiente. Se realizará un desarrollo constructivo donde iremos demostrando y motivando simultáneamente cada paso.

<sup>2</sup>Se puede extraer de [7].

### 2.3. Teorema de Magnus

Como hemos comentado, realizaremos un desarrollo constructivo del teorema hasta finalizar enunciándolo. Para ello vamos a partir de la ecuación (1.3) y vamos a introducir en ella la propuesta de Magnus, (2.1). Nos queda la expresión

$$i\hbar \frac{de^{\hat{\Omega}(t)}}{dt} = \hat{H}(t)e^{\hat{\Omega}(t)} \rightarrow \frac{de^{\hat{\Omega}(t)}}{dt} = -\frac{i\hat{H}(t)}{\hbar}e^{\hat{\Omega}(t)}.$$

Vamos a renombrar al operador  $-\frac{i\hat{H}(t)}{\hbar} \equiv \hat{\Lambda}(t)$ . Cabe destacar que  $\hat{\Lambda}(t)$  es antihermítico y esto se puede comprobar de una forma muy sencilla partiendo del conocimiento de que el operador  $\hat{H}(t)$  hamiltoniano del sistema tiene que ser hermítico<sup>3</sup>, ya que

$$\hat{\Lambda}^\dagger(t) = -\frac{i^*\hat{H}^\dagger(t)}{\hbar} = \frac{i\hat{H}(t)}{\hbar} = -\hat{\Lambda}(t).$$

Este operador  $\hat{\Lambda}(t)$  es conocido en nuestro problema, entonces queremos encontrar una ecuación para  $\hat{\Omega}(t)$  a partir de la cual podamos calcular una expresión analítica o, al menos en forma de serie, para  $\hat{\Omega}(t)$ . Quedaría de la siguiente forma

$$\frac{de^{\hat{\Omega}(t)}}{dt} = \hat{\Lambda}(t)e^{\hat{\Omega}(t)}. \quad (2.10)$$

Comenzamos enunciando el siguiente lema que nos va indicar la forma que adopta la derivada temporal del operador de evolución de Magnus.

**Lema 1.** *Sea un operador  $\hat{\Omega}(t)$  que depende de un parámetro  $t$ . Entonces la derivada con respecto a  $t$  de la exponencial del operador, es decir, de  $e^{\hat{\Omega}(t)}$ , vendrá dada por*

$$\frac{de^{\hat{\Omega}(t)}}{dt} = \text{dexp}_{\hat{\Omega}(t)}[\hat{\Omega}'(t)]e^{\hat{\Omega}(t)}, \quad (2.11)$$

$$\frac{de^{\hat{\Omega}(t)}}{dt} = e^{\hat{\Omega}(t)}\text{dexp}_{-\hat{\Omega}(t)}[\hat{\Omega}'(t)], \quad (2.12)$$

$$\frac{de^{\hat{\Omega}(t)}}{dt} = \int_0^1 e^{t\hat{\Omega}(t)}\hat{\Omega}'(t)e^{(1-t)\hat{\Omega}(t)}dt, \quad (2.13)$$

donde  $\hat{\Omega}'(t) = \frac{d\hat{\Omega}(t)}{dt}$ . Pasamos a la demostración del lema.

*Demostración.* Vamos a comenzar la demostración introduciendo la función de dos parámetros

$$\hat{Y}(\sigma, t) \equiv \frac{\partial}{\partial t} \left( e^{\sigma\hat{\Omega}(t)} \right) e^{-\sigma\hat{\Omega}(t)}.$$

<sup>3</sup>Si un operador  $\hat{A}$  es hermítico entonces cumple que  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ .

Ahora derivamos esta expresión con respecto a  $\sigma$ , quedando

$$\frac{\partial}{\partial \sigma} \hat{Y}(\sigma, t) = \frac{\partial}{\partial t} \left( e^{\sigma \hat{\Omega}(t)} \hat{\Omega}(t) \right) e^{-\sigma \hat{\Omega}(t)} - \frac{\partial}{\partial t} \left( e^{\sigma \hat{\Omega}(t)} \right) \hat{\Omega}(t) e^{-\sigma \hat{\Omega}(t)}.$$

Cabe destacar que en este caso no tenemos problemas a la hora de derivar con respecto a  $\sigma$  la exponencial ya que  $\hat{\Omega}$  conmuta sin problemas con  $e^{\sigma \hat{\Omega}}$ . De aquí en adelante, vamos a omitir escribir la dependencia en  $t$  de  $\hat{\Omega}(t)$ , para evitar expresiones excesivamente grandes. Pasamos a desarrollar ahora la derivada temporal del primer término de la diferencia, quedando

$$\frac{\partial}{\partial \sigma} \hat{Y}(\sigma, t) = \frac{\partial}{\partial t} \left( e^{\sigma \hat{\Omega}} \right) \hat{\Omega} e^{-\sigma \hat{\Omega}} + e^{\sigma \hat{\Omega}} \hat{\Omega}' e^{-\sigma \hat{\Omega}} - \frac{\partial}{\partial t} \left( e^{\sigma \hat{\Omega}} \right) \hat{\Omega} e^{-\sigma \hat{\Omega}} = e^{\sigma \hat{\Omega}} \hat{\Omega}' e^{-\sigma \hat{\Omega}}.$$

Llegamos, por tanto, a la expresión

$$\frac{\partial}{\partial \sigma} \hat{Y}(\sigma, t) = e^{\sigma \hat{\Omega}} \hat{\Omega}' e^{-\sigma \hat{\Omega}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sigma^k}{k!} \text{ad}_{\hat{\Omega}}^k(\hat{\Omega}') \equiv e^{\text{ad}_{\sigma \hat{\Omega}}(\hat{\Omega}')}, \quad (2.14)$$

donde el paso de la segunda igualdad se ha derivado en el Apéndice I. A partir de este resultado se puede comprobar de una forma sencilla (2.13),

$$\int_0^1 d\sigma \frac{\partial}{\partial \sigma} \hat{Y}(\sigma, t) = \hat{Y}(1, t) - \hat{Y}(0, t) \stackrel{\hat{Y}(0,t)=0}{=} \hat{Y}(1, t) = \int_0^1 d\sigma e^{\sigma \hat{\Omega}} \hat{\Omega}' e^{-\sigma \hat{\Omega}}.$$

Escribiendo ahora la forma de  $\hat{Y}(1, t)$ ,

$$\hat{Y}(1, t) = \frac{d}{dt} \left( e^{\hat{\Omega}} \right) e^{-\hat{\Omega}} = \int_0^1 d\sigma e^{\sigma \hat{\Omega}} \hat{\Omega}' e^{-\sigma \hat{\Omega}}, \quad (2.15)$$

y multiplicando ambos lados de la igualdad por  $e^{\hat{\Omega}}$  por la derecha se obtiene el tercero de los resultados del lema, (2.13).

Vamos a obtener ahora (2.11). Para ello, partimos de la ecuación (2.15) y, en la integral, sustituimos el integrando por su valor expresado en forma de serie según (2.14),

$$\frac{d}{dt} \left( e^{\hat{\Omega}} \right) e^{-\hat{\Omega}} = \int_0^1 d\sigma \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sigma^k}{k!} \text{ad}_{\hat{\Omega}}^k(\hat{\Omega}').$$

Integrando primero con respecto a  $\sigma$  (intercambiamos sumando e integral, asumiendo que lo podemos hacer sin problema) llegamos a

$$\frac{d}{dt} \left( e^{\hat{\Omega}} \right) e^{-\hat{\Omega}} = \sum_{k=0}^{\infty} \left( \int_0^1 d\sigma \sigma^k \right) \frac{1}{k!} \text{ad}_{\hat{\Omega}}^k(\hat{\Omega}') = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k+1)!} \text{ad}_{\hat{\Omega}}^k(\hat{\Omega}') = \text{dexp}_{\hat{\Omega}}(\hat{\Omega}').$$

De nuevo, multiplicando la expresión anterior a ambos lados por  $e^{\hat{\Omega}}$  por la derecha se obtiene (2.11).

Podemos llegar a la expresión (2.12) a partir de (2.13). Para ello vamos a hacer el cambio de variables  $x' = 1 - x$  de esta forma quedará que

$$\frac{de^{\hat{\Omega}(t)}}{dt} = \int_0^1 dx' e^{(1-x')\hat{\Omega}} \hat{\Omega}' e^{x'\hat{\Omega}} = e^{\hat{\Omega}} \int_0^1 dx' e^{-x'\hat{\Omega}} \hat{\Omega}' e^{x'\hat{\Omega}}.$$

Si nos fijamos, el integrando se puede entender cómo la misma expresión (2.14) pero cambiando  $\hat{\Omega}$  por  $-\hat{\Omega}$ . Así queda

$$\frac{de^{\hat{\Omega}(t)}}{dt} = e^{\hat{\Omega}} \int_0^1 dx' \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x'^k}{k!} \text{ad}_{-\hat{\Omega}}^k(\hat{\Omega}') = e^{\hat{\Omega}} \text{dexp}_{-\hat{\Omega}}(\hat{\Omega}').$$

□

Hasta este punto hemos encontrado tres formas equivalentes de expresar la derivada de la exponencial que interesaba. Si utilizamos, por ejemplo, la expresión (2.11) entonces la ecuación (2.10) se escribiría como

$$\text{dexp}_{\hat{\Omega}(t)}[\hat{\Omega}'(t)]e^{\hat{\Omega}(t)} = \hat{\Lambda}(t)e^{\hat{\Omega}(t)}, \quad (2.16)$$

que, multiplicando por  $e^{-\hat{\Omega}(t)}$  por la derecha a ambos lados quedaría

$$\text{dexp}_{\hat{\Omega}(t)}[\hat{\Omega}'(t)] = \hat{\Lambda}(t). \quad (2.17)$$

El siguiente paso será encontrar las condiciones para las que exista la inversa del operador  $\text{dexp}_{\hat{\Omega}}$  ya que, si lo encontramos, podríamos llegar a una ecuación diferencial para  $\hat{\Omega}(t)$  que podríamos intentar resolver haciendo algún desarrollo perturbativo. Es por ello que enunciamos el siguiente lema.

**Lema 2.** *Si los autovalores del operador lineal  $\text{ad}_{\hat{\Omega}}$  (llamémoslos  $\nu$ ) son distintos de  $2m\pi$  con  $m = [\pm 1, \pm 2, \dots]$ , entonces el operador  $\text{dexp}_{\hat{\Omega}}$  tiene inversa y la inversa tiene la forma*

$$\text{dexp}_{\hat{\Omega}}^{-1}(\hat{C}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} \text{ad}_{\hat{\Omega}}^k(\hat{C}) \equiv \frac{\text{ad}_{\hat{\Omega}}}{e^{\text{ad}_{\hat{\Omega}}} - \hat{I}}(\hat{C}). \quad (2.18)$$

*Demostración.* De la forma que tiene el operador  $\text{dexp}_{\hat{\Omega}}$  se puede ver cómo serán sus autovalores en función de los autovalores de  $\text{ad}_{\hat{\Omega}}$ ,  $\nu$ . Sea  $\hat{D}$  un autovector del operador  $\text{ad}_{\hat{\Omega}}$  asociado al autovalor  $\nu$ , entonces se cumple que

$$\text{ad}_{\hat{\Omega}}(\hat{D}) = \nu\hat{D}.$$

Por tanto, si aplicamos el operador  $\text{dexp}_{\hat{\Omega}}$  al autovector de  $\text{ad}_{\hat{\Omega}}$  se tiene que

$$\text{dexp}_{\hat{\Omega}}(\hat{D}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k+1)!} \text{ad}_{\hat{\Omega}}^k(\hat{D}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\nu^k}{(k+1)!} \hat{B} = \mu \hat{D},$$

donde

$$\mu = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\nu^k}{(k+1)!} = \frac{e^{\nu} - 1}{\nu},$$

son los autovalores de  $\text{dexp}_{\hat{\Omega}}$ . Para obtenerlo hemos usado la propiedad (2.9).

De esta última expresión se puede comprobar cómo, si los autovalores de  $\text{ad}_{\hat{\Omega}}$  son distintos de  $2m\pi i$  (con  $m = \pm 1, \pm 2, \dots$ ) entonces los autovalores de  $\text{dexp}_{\hat{\Omega}}$  serán distintos de cero. Si los autovalores de un operador son distintos de cero, entonces existirá siempre una inversa para el mismo. Por lo tanto existe  $\text{dexp}_{\hat{\Omega}}^{-1}$ . Además, usando las propiedades (2.7) y (2.9), y comparando con las definiciones de los operadores  $\text{dexp}_{\hat{\Omega}}$  y  $\text{dexp}_{\hat{\Omega}}^{-1}$ , (2.6) y (2.18), respectivamente, se comprueba que esta última es la inversa de la primera ya que aplicadas sucesivamente dan la identidad.

Pese a no ser problemático para la demostración, puede resultar al lector un caso extraño aquel en el que el autovalor del operador  $\text{ad}_{\hat{\Omega}}$  sea nulo, es decir,  $\nu = 0$ . Resulta de interés comentar este caso por separado ya que de la definición (2.7) podría no dejar claro a primera vista al lector cuál sería el autovalor de  $\text{dexp}_{\hat{\Omega}}$  asociado. Obviamente este autovalor existe y está asociado al autovector  $\hat{\Omega}$  ( $[\hat{\Omega}, \hat{\Omega}] = 0$ )<sup>4</sup>. Entonces a partir de la expresión de  $\text{dexp}_{\hat{\Omega}}$  se llega a que el autovalor  $\mu$  asociado a  $\nu = 0$  será

$$\text{dexp}_{\hat{\Omega}}(\hat{\Omega}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k+1)!} \text{ad}_{\hat{\Omega}}^k(\hat{\Omega}) = \hat{\Omega} \rightarrow \mu = 1, \quad (2.19)$$

es decir, sólo sobrevive el término  $k = 0$ . Como hemos comentado, este no era un caso problemático en la demostración formal y, por tanto, para la existencia de la inversa del operador  $\text{dexp}_{\hat{\Omega}}$  pero, a modo ilustrativo, se ha considerado conveniente analizar este caso. □

Estamos llegando al final de la deducción del teorema de Magnus. Continuamos nuestra labor de encontrar una expresión cerrada de una ecuación diferencial para  $\hat{\Omega}(t)$ . Para ello, una vez hemos obtenido la inversa del operador  $\text{dexp}_{\hat{\Omega}}$  se aplica a (2.17) y se obtiene que

$$\text{dexp}_{\hat{\Omega}}^{-1} \left[ \text{dexp}_{\hat{\Omega}}(\hat{\Omega}') \right] = \text{dexp}_{\hat{\Omega}}^{-1}(\hat{\Lambda}) \rightarrow \hat{\Omega}'(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} \text{ad}_{\hat{\Omega}(t)}^k(\hat{\Lambda}(t)).$$

---

<sup>4</sup>El autovalor  $\nu = 0$ , además de estar asociado al autovector  $\hat{\Omega}$ , se corresponde con todos los operadores que conmutaran con  $\hat{\Omega}$ , sin embargo, lo que nos interesa indicar es que ese autovalor existe y es por eso que hemos tomado este ejemplo de autovector  $\hat{\Omega}$ .

Nos damos cuenta que hemos obtenido lo que buscábamos, una ecuación diferencial para el operador  $\hat{\Omega}(t)$ . En general esta será una ecuación sin solución cerrada analítica pero podremos usar desarrollos perturbativos para obtener los términos de un desarrollo en serie de  $\hat{\Omega}$ . Pasamos, como último paso en esta sección a enunciar el Teorema de Magnus.

**Teorema 3 (Teorema de Magnus).** *Sea  $\hat{\Lambda}(t)$   $[\hat{\Lambda}(t) = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)]$  un operador conocido que depende de una variable  $t$ , y sea  $\hat{U}(t)$  un operador desconocido que satisfaga (1.3) con la condición inicial (1.4) entonces, si se verifican ciertas condiciones de convergencia, se puede escribir la solución como*

$$\hat{U}(t) = e^{\hat{\Omega}(t)}, \quad (2.20)$$

donde  $\hat{\Omega}(t)$  verifica la ecuación diferencial

$$\frac{d\hat{\Omega}}{dt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} \text{ad}_{\hat{\Omega}}^n(\hat{\Lambda}(t)), \quad (2.21)$$

con la condición inicial

$$\hat{\Omega}(0) = 0. \quad (2.22)$$

## 2.4. Términos del Desarrollo

Como ya hemos comentado, la ecuación (2.21) no tiene una solución analítica cerrada. Es por ello que vamos a buscar la solución en forma de serie, es decir,

$$\hat{\Omega}(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{\Omega}_k(t), \quad (2.23)$$

de forma que, introduciéndola en la ecuación (2.21) se encuentre una forma general que sigan los términos. Para realizar esta labor, vamos a suponer que  $\hat{\Lambda}(t)$  es de primer orden en un parámetro arbitrario  $\varepsilon$ , es decir,

$$\hat{\Lambda}(t; \varepsilon) = \varepsilon \hat{\Lambda}(t). \quad (2.24)$$

Por otro lado, en el desarrollo (2.23), vamos a asignar a cada término  $k$ , un orden  $k$  del parámetro  $\varepsilon$

$$\hat{\Omega}(t; \varepsilon) = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \hat{\Omega}_k(t), \quad (2.25)$$

de esta forma estamos realizando un desarrollo perturbativo en un parámetro  $\varepsilon$ . Vamos a buscar una expresión general para la forma que tienen los términos  $\hat{\Omega}_k(t)$ .

Antes de comenzar vamos a ver fácilmente que el primer término de la serie es nulo, es decir,  $\hat{\Omega}_0 = 0$ . Esto es relativamente sencillo de comprobar si insertamos (2.25) y (2.24) en la ecuación (2.21). Vemos que, en la parte derecha de la ecuación, el hecho de introducir  $\varepsilon\hat{\Lambda}$  hace que no existan términos de orden 0 en  $\varepsilon$ . Por lo que tendremos la ecuación para  $\hat{\Omega}_0(t)$  siguiente

$$\frac{d\hat{\Omega}_0(t)}{dt} = 0, \quad (2.26)$$

donde, usando la condición inicial que viene dada en (2.22) se llega a que el término de orden 0 de  $\hat{\Omega}$  es nulo,

$$\hat{\Omega}_0(t) = \hat{0}, \quad (2.27)$$

por lo que podemos restringir nuestro desarrollo de  $\hat{\Omega}$  a los términos superiores a 0, esto es

$$\hat{\Omega}(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \hat{\Omega}_k(t). \quad (2.28)$$

Pasamos a obtener la expresión general de los términos del desarrollo, para ello, procedemos a introducir (2.24) y (2.25) en (2.21). Llegamos a

$$\sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^k \frac{d\hat{\Omega}_k(t)}{dt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} \text{ad}_{\hat{\Omega}(t;\varepsilon)}^n (\varepsilon\hat{\Lambda}).$$

Si desarrollamos más la expresión introduciendo de forma explícita los conmutadores se obtiene que

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} \text{ad}_{\hat{\Omega}}^n (\hat{\Lambda}) = \varepsilon\hat{\Lambda} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B_n}{n!} \left[ \sum_{i_1=1}^{\infty} \varepsilon^{i_1} \hat{\Omega}_{i_1}, \dots, \left[ \sum_{i_n=1}^{\infty} \varepsilon^{i_n} \hat{\Omega}_{i_n}, \varepsilon\hat{\Lambda} \right] \right].$$

Vamos a definir ahora  $J = \sum_{j=1}^n i_j$  y vamos a introducir una delta de Kronecker <sup>5</sup> del tipo  $\delta_{J, \sum_{j=1}^n i_j}$  de forma que se puede escribir que

$$\varepsilon^{\sum_{j=1}^n i_j} = \sum_{J=0}^{\infty} \varepsilon^J \delta_{J, \sum_{j=1}^n i_j} = \sum_{J=n}^{\infty} \varepsilon^J \delta_{J, \sum_{j=1}^n i_j},$$

ya que el mínimo valor del  $J$  debe ser  $n$  porque los índices  $i_j$  varían entre 1 e  $\infty$ . Si introducimos este último resultado en la expresión del desarrollo queda

$$\sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^k \frac{d\hat{\Omega}_k(t)}{dt} = \varepsilon\hat{\Lambda} + \varepsilon \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B_n}{n!} \sum_{J=n}^{\infty} \varepsilon^J \delta_{J, \sum_{j=1}^n i_j} \left[ \sum_{i_1=1}^{\infty} \varepsilon^{i_1} \hat{\Omega}_{i_1}, \dots, \left[ \sum_{i_n=1}^{\infty} \varepsilon^{i_n} \hat{\Omega}_{i_n}, \hat{\Lambda} \right] \right].$$

<sup>5</sup> Recibe su nombre en honor al matemático alemán Leopold Kronecker quien, en uno de sus artículos principales [8], la definió en la forma  $\delta_{ij} = 0$  si  $i \neq j$  y  $\delta_{ij} = 1$  si  $i = j$ .

Ahora podemos intercambiar los sumatorios en  $J$  y  $n$  de la siguiente forma

$$\sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \frac{d\hat{\Omega}_k(t)}{dt} = \varepsilon \hat{\Lambda} + \varepsilon \sum_{J=1}^{\infty} \varepsilon^J \sum_{n=1}^J \frac{B_n}{n!} \delta_{J, \sum_{j=1}^n i_j} \left[ \sum_{i_1=1}^{\infty} \varepsilon^{i_1} \hat{\Omega}_{i_1}, \dots, \left[ \sum_{i_n=1}^{\infty} \varepsilon^{i_n} \hat{\Omega}_{i_n}, \hat{\Lambda} \right] \right]. \quad (2.29)$$

No perdamos la perspectiva de lo que buscamos con este desarrollo matemático planteado. Buscábamos una ecuación para cada término del desarrollo (2.23), para ello establecimos una dependencia de cada término con una potencia de un parámetro  $\varepsilon$  y fijamos que  $\hat{\Lambda}$  era de primer orden en ese parámetro. Introduciendo esto en la ecuación que cumple  $\hat{\Omega}$ , (2.21), hemos llegado a la expresión (2.29). Como las potencias distintas de  $\varepsilon$  son linealmente independientes, para que se cumpla la igualdad se deben verificar igualdades término a término. El último paso será, por tanto, igualar los términos con igual potencia de  $\varepsilon$ , lo cual nos lleva a la siguiente regla general que resume todo el desarrollo que hemos realizado

$$\frac{d\hat{\Omega}_k(t)}{dt} = \delta_{k,1} \hat{\Lambda} + \sum_{n=0}^{k-1} \frac{B_n}{n!} \delta_{k-1, \sum_{j=1}^n i_j} \left[ \sum_{i_1=1}^{\infty} \varepsilon^{i_1} \hat{\Omega}_{i_1}, \dots, \left[ \sum_{i_n=1}^{\infty} \varepsilon^{i_n} \hat{\Omega}_{i_n}, \hat{\Lambda} \right] \right], \quad (2.30)$$

válida para todo  $k \in \mathbb{N}$ .

Esta expresión se puede escribir de forma más compacta si, en lugar de introducir la delta de Kronecker, añadimos un sumatorio con una condición dada, por lo que una alternativa a (2.30) será

$$\frac{d\hat{\Omega}_k(t)}{dt} = \delta_{k,1} \hat{\Lambda} + \sum_{n=0}^{k-1} \frac{B_n}{n!} \sum_{\sum_{j=1}^n i_j = k-1} \left[ \sum_{i_1=1}^{\infty} \varepsilon^{i_1} \hat{\Omega}_{i_1}, \dots, \left[ \sum_{i_n=1}^{\infty} \varepsilon^{i_n} \hat{\Omega}_{i_n}, \hat{\Lambda} \right] \right], \quad (2.31)$$

donde aquí el sumatorio restringido incluye todas las posibles combinaciones de valores de  $i_j$  tales que su suma den el valor  $k - 1$ .

Analizando un poco las expresiones (2.30) y (2.31) se llega a que, en general para cualquier término  $k$  del desarrollo, su derivada se obtendrá como una suma de combinaciones otros términos  $i$ , evidentemente  $i < k$ , multiplicados por unos coeficientes que vienen dados por los números de Bernoulli.

Podemos observar además cómo hemos llegado a lo que deseábamos al comienzo de la sección, encontrar ecuaciones diferenciales cerradas para cada término del desarrollo que, en principio dependen de términos de órdenes inferiores. El procedimiento a seguir para obtener el desarrollo es ir construyendo los términos (de menor orden a mayor) resolviendo las sucesivas ecuaciones diferenciales.

Como aplicación de las fórmulas que acabamos de obtener, (2.30) y (2.31), vamos a calcular los primeros términos del desarrollo. Ya hemos visto que el término  $k = 0$  es nulo, pasamos por tanto con el término  $k = 1$ . Queda la ecuación diferencial para  $\hat{\Omega}_1(t)$  que sigue

$$\frac{d\hat{\Omega}_1(t)}{dt} = \hat{\Lambda}(t), \quad (2.32)$$

$$\hat{\Omega}_1(t = 0) = \hat{0}. \quad (2.33)$$

Integrando queda que

$$\hat{\Omega}_1(t) = \int_0^t \hat{\Lambda}(t_1) dt_1 \equiv \int_0^t dt_1 \hat{\Lambda}_1, \quad (2.34)$$

donde hemos introducido la siguiente notación,  $\hat{\Lambda}(t_i) \equiv \hat{\Lambda}_i$  que simplificará expresiones próximas. Pasamos ahora con el segundo término del desarrollo,  $\hat{\Omega}_2(t)$ , que satisface la ecuación diferencial

$$\frac{d\hat{\Omega}_2(t)}{dt} = -\frac{1}{2} [\hat{\Omega}_1(t), \hat{\Lambda}(t)], \quad (2.35)$$

$$\hat{\Omega}_2(t = 0) = \hat{0}. \quad (2.36)$$

Como previamente hemos obtenido el término de primer orden del desarrollo, nos encontramos preparados para integrar. De esta forma obtenemos

$$\hat{\Omega}_2(t) = -\frac{1}{2} \int_0^t dt_1 [\hat{\Omega}_1(t_1), \hat{\Lambda}_1] = \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 [\hat{\Lambda}_1, \hat{\Lambda}_2]. \quad (2.37)$$

Por último vamos a encontrar la expresión del término  $\hat{\Omega}_3(t)$  que se rige por la ecuación diferencial

$$\frac{d\hat{\Omega}_3(t)}{dt} = -\frac{1}{2} [\hat{\Omega}_2, \hat{\Lambda}] + \frac{1}{12} [\hat{\Omega}_1, [\hat{\Omega}_1, \hat{\Lambda}]], \quad (2.38)$$

$$\hat{\Omega}_3(t = 0) = \hat{0}, \quad (2.39)$$

donde, siguiendo los pasos que hemos realizado para los términos anteriores, se llega a que

$$\hat{\Omega}_3(t) = \frac{1}{6} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left\{ [\hat{\Lambda}_1, [\hat{\Lambda}_2, \hat{\Lambda}_3]] + [[\hat{\Lambda}_1, \hat{\Lambda}_2], \hat{\Lambda}_3] \right\}. \quad (2.40)$$

El procedimiento matemático completo sobre cómo se integran estas expresiones y la obtención final de estas igualdades para los términos se explica en el Apéndice II.

Vamos a acabar la sección recogiendo los resultados más relevantes y haciendo un breve resumen de la misma. Esta parte posiblemente sea la más laboriosa matemáticamente

pero, al mismo tiempo, es la que nos ha proporcionado los resultados más útiles para las aplicaciones prácticas.

Admitiendo un desarrollo de  $\hat{\Omega}(t)$  en función de un parámetro  $\varepsilon$ , del cual es dependiente en primer orden nuestro hamiltoniano, hemos llegado a ecuaciones diferenciales para cada término del desarrollo,  $\hat{\Omega}_k(t)$ . Estas expresiones vienen recogidas en las ecuaciones (2.30) y (2.31).

Para calcular los términos del desarrollo tendremos que la derivada de cada uno dependerá de términos de orden menor. Es por ello por lo que necesariamente en la práctica debemos seguir un orden lógico e ir calculando los términos en orden creciente de  $k$ . Hemos podido comprobar cómo la complejidad de estas expresiones aumenta de forma muy abrupta conforme lo hace  $k$ . Sin embargo, esto no es algo extraño cuando realizamos tratamientos perturbativos.

Además, hemos obtenido la expresión analítica de los primeros cuatro términos del desarrollo, es decir, los correspondientes a  $k = 0, 1, 2, 3$ . En próximas secciones usaremos principalmente estos primeros cuatro términos para aproximar el operador evolución del sistema y comprobaremos si su comportamiento es realmente bueno comparando con la resolución numérica del problema. El operador evolución aproximado será  $\hat{U}_{\text{aprox}}$ ,

$$\hat{U}_{\text{aprox}}(t) = e^{\hat{\Omega}_1(t) + \hat{\Omega}_2(t) + \hat{\Omega}_3(t)}. \quad (2.41)$$

Antes de pasar a las aplicaciones del desarrollo que hemos estudiado a ciertos problemas de la Mecánica Cuántica, vamos a estudiar otro procedimiento que se utiliza para obtener expresiones analíticas aproximadas de operadores evolución cuando el sistema es periódico en el tiempo. Es el desarrollo perturbativo de Floquet-Magnus, que ya comentamos anteriormente. Este método es especialmente útil en sistemas cuánticos que se encuentran sometidos a campos periódicos y su utilidad radica en que la aproximación basta con ser calculada en un periodo del sistema. Este hecho lo analizaremos con más profundidad en la siguiente sección.

## 3. Floquet-Magnus

### 3.1. Teoría de Floquet

Pasamos a analizar una serie de casos que son muy interesantes desde el punto de vista de la Mecánica Cuántica porque aparece en muchas situaciones prácticas. Nos referimos a el caso de sistemas que están sometidos a campos externos periódicos. Estos problemas se describen mediante un hamiltoniano  $\hat{H}(t)$  que es periódico en el tiempo con un periodo  $T > 0$ .

En esta sección, trataremos la teoría de Floquet <sup>1</sup> aplicada a este tipo de sistemas y, posteriormente, indicaremos cómo combinar la teoría de Floquet con el desarrollo de Magnus estudiado en la sección previa.

Comencemos tratando las principales ideas de la teoría que nos van a ser útiles en el trabajo. Cuando estamos ante ecuaciones diferenciales del tipo

$$\hat{y}'(t) = \hat{H}(t)\hat{y}(t), \tag{3.1}$$

con  $\hat{H}(t)$  periódico en el tiempo de cierto periodo  $T$ . Floquet encontró una forma de expresar las soluciones de la ecuación de forma que sea más fácil de encontrar sus componentes y, además, que pudiese converger mejor. Vamos a ir construyendo el teorema de Floquet paso a paso, para ello, como primer punto, vamos a enunciar y demostrar el siguiente lema.

**Lema 4.** *Sea  $\hat{H}(t)$  un hamiltoniano periódico de periodo  $T$ , tal que sea  $\hat{H}(t + T) = \hat{H}(t) \forall t$ . Entonces el operador evolución entre dos instantes de tiempo  $t$  y  $t_0$ ,  $\hat{U}(t, t_0)$ , cumple que*

$$\hat{U}(t + T, t_0 + T) = \hat{U}(t, t_0). \tag{3.2}$$

---

<sup>1</sup>Esta teoría recibe este nombre en honor al matemático francés Gaston Floquet (1847-1920), quien la mostró al mundo en el artículo [9].

*Demostración.* Para empezar con la demostración del lema 4 vamos a definir la función  $\hat{V}(t, t_0) = \hat{U}(t + T, t_0 + T)$ , que no es más que el operador de evolución temporal pero desplazado un periodo del sistema. Encontramos la ecuación diferencial que cumple el operador que acabamos de definir

$$i\hbar \frac{\partial \hat{V}(t, t_0)}{\partial t} = i\hbar \frac{d(t+T)}{dt} \left[ \frac{\partial \hat{U}(t', t_0 + T)}{\partial t'} \right]_{t'=t+T} = i\hbar \left[ \frac{\partial \hat{U}(t', t_0 + T)}{\partial t'} \right]_{t'=t+T},$$

donde hemos definido un nuevo parámetro  $t' = t + T$ . A su vez, el operador  $\hat{U}(t', t_0 + T)$  cumple la ecuación de Schrödinger para operadores de evolución. Si tenemos en cuenta la definición de  $t'$ , queda que

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t', t_0 + T)}{\partial t'} = \hat{H}(t') \hat{U}(t', t_0 + T) \rightarrow i\hbar \frac{\partial \hat{V}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t) \hat{V}(t, t_0),$$

donde se ha usado la premisa  $\hat{H}(t + T) = \hat{H}(t)$ . Podemos ver, entonces, que  $\hat{V}(t, t_0)$  cumple la misma ecuación diferencial que  $\hat{U}(t, t_0)$ . Además es fácil comprobar que también verifican la misma condición inicial ya que

$$\hat{V}(t_0, t_0) \equiv \hat{U}(t_0 + T, t_0 + T) = \hat{I}.$$

Por lo tanto, si suponemos que estamos en las condiciones para que se cumpla el Teorema de Existencia y Unicidad <sup>2</sup> se llega a que ambos operadores deben ser el mismo, es decir, que

$$\hat{V}(t, t_0) \equiv \hat{U}(t + T, t_0 + T) = \hat{U}(t, t_0),$$

y, de esta forma, queda demostrado el lema 4. □

Ahora vamos a considerar el operador  $\hat{U}(T, 0)$ , que es unitario, al igual que todos los operadores de evolución temporal. Por ende, será un operador normal <sup>3</sup>. Vamos a recurrir al Teorema de Descomposición Espectral <sup>4</sup> según el cual se puede encontrar una

<sup>2</sup> Este teorema establece condiciones bajo las cuales una ecuación diferencial tiene una única solución. Si bien no existe un artículo principal que lo enuncie, se desarrolla un análisis profundo del mismo en el libro [10] de Joseph-Louis Lagrange (1736-1813).

<sup>3</sup> Un operador normal  $\hat{A}$  es aquel que conmuta con su operador adjunto  $\hat{A}^\dagger$ , es decir,  $\hat{A}\hat{A}^\dagger = \hat{A}^\dagger\hat{A}$ .

<sup>4</sup> El Teorema de Descomposición Espectral, o simplemente Teorema Espectral, establece las condiciones bajo las cuales un operador puede ser diagonalizado, en el caso que nos concierne basta con asumir que si el operador es normal, se va a poder diagonalizar. Uno de los primeros artículos en abordar el tema es el del matemático polaco Stefan Banach (1892-1945), [11].

descomposición del operador  $\hat{U}(T, 0)$  en la forma

$$\hat{U}(T, 0) = \sum_j \lambda_j \hat{\Pi}_j, \quad (3.3)$$

donde los  $\lambda_j$  son los autovalores del operador  $\hat{U}(T, 0)$  y los operadores  $\hat{\Pi}_j$  son los proyectores sobre el subespacio asociado a cada autovalor.

Del hecho de que el operador es unitario, se debe verificar que el módulo de los autovalores deben ser la unidad, es decir,  $|\lambda_j| = 1$ . Esto se puede comprobar de forma sencilla tomando un autovalor  $\lambda$  genérico asociado a un autovector  $|\lambda\rangle$ . Si partimos de estados normalizados, entonces se tiene que

$$\langle \lambda | \lambda \rangle = 1 = \langle \lambda | \hat{I} | \lambda \rangle.$$

Ahora bien, el operador identidad se puede obtener como  $\hat{I} = \hat{U}^\dagger(T, 0)\hat{U}(T, 0)$ . Si introducimos esta forma de escribir el operador identidad en la expresión anterior llegamos a que

$$\langle \lambda | \hat{U}^\dagger(T, 0)\hat{U}(T, 0) | \lambda \rangle = \lambda^* \lambda \langle \lambda | \lambda \rangle = |\lambda|^2 = 1.$$

Con este resultado podemos escribir una forma, lo más general para los autovalores de  $\hat{U}(T, 0)$  como

$$\lambda_j = e^{-i\varphi_j} \rightarrow \hat{U}(T, 0) = \sum_j e^{-i\varphi_j} \hat{\Pi}_j,$$

donde los valores de  $\varphi_j$  son reales y se pueden escoger  $\varphi_j \in [-\pi, \pi)$ , que se conoce como Primera Zona de Brillouin. Ahora estamos en disposición de definir un operador  $\hat{\varphi}$  de la forma

$$\hat{\varphi} = \sum_j \varphi_j \hat{\Pi}_j. \quad (3.4)$$

Este es un operador hermítico evidentemente ya que

$$\hat{\varphi}^\dagger = \sum_j \varphi_j^* \hat{\Pi}_j^\dagger = \sum_j \varphi_j \hat{\Pi}_j = \hat{\varphi},$$

donde hemos usado que  $\varphi_j^* = \varphi_j$  porque  $\varphi_j$  es real y que  $\hat{\Pi}_j^\dagger = \hat{\Pi}_j$ , una propiedad de los operadores proyectores del hecho de ser hermíticos. Podemos definir ahora, a partir de  $\hat{\varphi}$ , un operador también hermítico

$$\hat{H}_F = \frac{\hbar}{T} \hat{\varphi}. \quad (3.5)$$

Evidentemente es un operador hermítico porque tanto,  $T$  como  $\hbar$  son reales. Entonces, si introducimos la definición (3.5) en (3.3) se llega a una expresión para  $\hat{U}(T, 0)$  que queda

$$\hat{U}(T, 0) = \exp\left(-i \sum_j \varphi_j \hat{\Pi}_j\right) = e^{-i\hat{\varphi}} = e^{-i\frac{T}{\hbar}\hat{H}_F}. \quad (3.6)$$

A continuación vamos a usar el resultado anterior para definir otro operador que aparecerá en el teorema de Floquet que enunciaremos por último. Este operador  $\hat{p}(t)$  tendrá la forma

$$\hat{p}(t) = \hat{U}(t, 0)e^{i\frac{t}{\hbar}\hat{H}_F}. \quad (3.7)$$

Además, verifica la propiedad enunciada en el siguiente lema.

**Lema 5.** *Sea el operador  $\hat{p}(t)$  definido en (3.7). Se verifica la siguiente propiedad a partir de la definición de  $\hat{H}_F$  dada en (3.6),*

$$\hat{p}(t + T) = \hat{p}(t). \quad (3.8)$$

*Demostración.* Para la demostración del lema, vamos a necesitar la siguiente propiedad que cumplen los operadores de evolución temporal,

$$\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0). \quad (3.9)$$

Empezamos sustituyendo la forma explícita de  $\hat{p}(t + T)$  y usando la propiedad (3.9)

$$\hat{p}(t + T) = \hat{U}(t + T, 0)e^{i\frac{t+T}{\hbar}\hat{H}_F} = \hat{U}(t + T, T)\hat{U}(T, 0)e^{i\frac{t}{\hbar}\hat{H}_F}e^{i\frac{T}{\hbar}\hat{H}_F}.$$

Ahora, sustituyendo la forma de  $\hat{U}(T, 0)$  por la que vimos en (3.6) llegamos a

$$\hat{p}(t + T) = \hat{U}(t + T, T)e^{-i\frac{T}{\hbar}\hat{H}_F}e^{i\frac{T}{\hbar}\hat{H}_F}e^{i\frac{t}{\hbar}\hat{H}_F} = \hat{U}(t + T, T)e^{i\frac{t}{\hbar}\hat{H}_F}.$$

Por último, usaremos el lema 4 para usar la propiedad de periodicidad el operador evolución cuando estamos con hamiltonianos periódicos y se llega a

$$\hat{p}(t + T) = \hat{U}(t + T, T)e^{i\frac{t}{\hbar}\hat{H}_F} = \hat{U}(t, 0)e^{i\frac{t}{\hbar}\hat{H}_F} = \hat{p}(t).$$

□

Resumiendo todo lo que hemos visto en esta sección, partimos de la expresión de un hamiltoniano periódico en el tiempo de cierto periodo  $T > 0$ , y definimos una serie de operadores que cumplen algunas propiedades que hemos demostrado. Todo esto culmina con la enunciación del siguiente teorema.

**Teorema 6 (Teorema de Floquet).** *Sea un problema periódico en el tiempo, de cierto periodo  $T$ , se tiene entonces que el operador de evolución temporal del sistema,  $\hat{U}(t, 0) \equiv \hat{U}(t)$  se puede escribir como*

$$\hat{U}(t) = \hat{p}(t)e^{-i\frac{t}{\hbar}\hat{H}_F}, \quad (3.10)$$

*donde el operador  $\hat{p}(t)$  es periódico en el tiempo también de periodo  $T$ , es decir,  $\hat{p}(t+T) = \hat{p}(t)$ . Por otro lado el operador  $\hat{H}_F$  es hermítico y no depende del tiempo.*

Este teorema es el cénit del apartado y recoge la idea principal de Floquet, escribir las soluciones de problemas como (1.3), con hamiltonianos periódicos, como el producto de dos componentes, una periódica,  $\hat{p}(t)$ , y otra que no lo es pero involucra en la exponencial un hamiltoniano constante en el tiempo.

El tratamiento que propone Floquet tiene una ventaja computacional muy clara y es que no es necesario calcular la solución para todo instante de tiempo  $t$ , basta con calcularla en un periodo  $T$  ya que el operador  $\hat{p}(t)$  es periódico de ese periodo justamente. Por otro lado, el otro operador hamiltoniano que aparece en la solución,  $\hat{H}_F$ , es constante en el tiempo por lo que es innecesario calcularlo en más de un instante de tiempo. Esto supone un gran avance de cálculo y una mejora evidente de la labor computacional del problema.

En la siguiente sección vamos a buscar unas expresiones aproximadas para estos operadores  $\hat{p}(t)$  y  $\hat{H}_F$  tal y cómo lo hicimos para el caso del desarrollo de Magnus. Para ello, encontraremos primero unas ecuaciones cerradas que deben cumplir los mismos e introduciremos los desarrollos, de nuevo dependientes de un parámetro, para finalmente calcular ecuaciones para cada uno de los términos. Uno de los artículos que tratan este tema es [12], una revisión donde se fusiona de forma clarividente las teorías de Magnus y Floquet en el marco de la Mecánica Cuántica.

## 3.2. Desarrollo de Floquet-Magnus

Como hemos comentado anteriormente, en esta sección vamos a ver en qué consiste la idea de aplicar el desarrollo de Magnus a la propuesta de Floquet para la resolución de problemas con hamiltonianos periódicos. Vamos a obtener expresiones cerradas para los términos que aparecen en el desarrollo de Floquet-Magnus y podremos obtener las ventajas y desventajas que presenta esta vía de resolución del problema de evolución temporal de los sistemas cuánticos.

Ya vimos que la ecuación que rige el comportamiento del operador de evolución temporal en un sistema cuántico cualquiera es

$$\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = \hat{\Lambda}(t)\hat{U}(t), \quad (3.11)$$

donde  $\hat{\Lambda}(t)$  es un operador antihermítico que se relacionaba con el hamiltoniano del problema  $\hat{H}(t)$  mediante  $\hat{\Lambda}(t) = -\frac{i\hat{H}(t)}{\hbar}$ . Procedemos, entonces, a introducir en (3.11) el resultado del Teorema de Floquet, es decir, (3.10) y, desarrollando las derivadas se llega a la ecuación siguiente

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left[ \hat{p}(t)e^{-i\frac{t}{\hbar}\hat{H}_F} \right] &= \hat{\Lambda}(t)\hat{p}(t)e^{-i\frac{t}{\hbar}\hat{H}_F} \rightarrow \\ \frac{d\hat{p}(t)}{dt}e^{t\hat{F}} + \hat{p}(t)\hat{F}e^{t\hat{F}} &= \hat{\Lambda}(t)\hat{p}(t)e^{t\hat{F}}, \end{aligned}$$

donde hemos introducido la notación  $\hat{F} \equiv -\frac{i}{\hbar}\hat{H}_F$ . Si ahora multiplicamos por la derecha por  $e^{-t\hat{F}}$  llegaremos a la siguiente ecuación para  $\hat{p}(t)$  y  $\hat{F}$ ,

$$\frac{d\hat{p}(t)}{dt} = \hat{\Lambda}(t)\hat{p}(t) - \hat{p}(t)\hat{F}, \quad \hat{p}(0) = \hat{I}. \quad (3.12)$$

La condición inicial proviene de que se debe verificar que

$$\hat{U}(0) = \hat{U}(0,0) = \hat{I} = \hat{p}(0)e^{\hat{0}}.$$

Ahora vamos a introducir la propuesta de Magnus combinada con la de Floquet, que consiste principalmente en buscar el operador  $\hat{p}(t)$  como una exponencial del tipo Magnus, es decir, buscar

$$\hat{p}(t) = e^{\hat{\Sigma}(t)}, \quad (3.13)$$

a partir de la cuál deberemos encontrar una ecuación para  $\hat{\Sigma}(t)$ . Para ello, procedemos de forma similar a como hicimos en la sección de los términos de Magnus. Realizaremos también un desarrollo en series tanto para  $\hat{\Sigma}(t)$  como para  $\hat{F}$  y encontraremos una fórmula general que deberán cumplir todos los términos de los desarrollos

$$\hat{\Sigma}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{\Sigma}_n(t), \quad (3.14)$$

$$\hat{F} = \sum_{j=0}^{\infty} \hat{F}_j. \quad (3.15)$$

### 3.3. Términos del desarrollo

Comenzamos de nuevo con una sección de una densidad de cálculo muy elevada. Para hacerla menos tediosa, algunos desarrollos matemáticos no aparecen explícitamente. En su lugar, se destinará al lector a un apéndice si quiere ahondar en el cálculo para comprenderlo en su completitud.

El procedimiento que vamos a seguir, será muy similar al que seguimos en la sección 2.4. Primero introduciremos la propuesta de Floquet-Magnus (3.13) en (3.12), llegando a la ecuación

$$\frac{de^{\hat{\Sigma}(t)}}{dt} = \hat{\Lambda}(t)e^{\hat{\Sigma}(t)} - e^{\hat{\Sigma}(t)}\hat{F},$$

y continuamos multiplicando por  $e^{-\hat{\Sigma}(t)}$  por la derecha. Se llega al resultado

$$\frac{de^{\hat{\Sigma}(t)}}{dt}e^{-\hat{\Sigma}(t)} = \hat{\Lambda}(t) - e^{\hat{\Sigma}(t)}\hat{F}e^{-\hat{\Sigma}(t)}.$$

Ahora vamos a hacer uso de resultados previos para expresar la derivada de la exponencial, que fue un apartado que tratamos con anterioridad y que recogimos en el lema 1. En particular, usaremos la ecuación (2.11), que da como resultado

$$\text{dexp}_{\hat{\Sigma}(t)} \left[ \hat{\Sigma}'(t) \right] = \hat{\Lambda}(t) - e^{\hat{\Sigma}(t)}\hat{F}e^{-\hat{\Sigma}(t)}.$$

Ya probamos que el operador  $\text{dexp}_A$  tiene inversa y vimos la forma que tenía la inversa del mismo. Esta venía dada por la expresión (2.18). Aplicando el operador  $\text{dexp}_{\hat{\Sigma}(t)}^{-1}$  a la expresión anterior se llega a lo siguiente

$$\hat{\Sigma}'(t) = \text{dexp}_{\hat{\Sigma}(t)}^{-1} \left[ \hat{\Lambda}(t) - e^{\hat{\Sigma}(t)}\hat{F}e^{-\hat{\Sigma}(t)} \right] = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^k \left[ \hat{\Lambda}(t) - e^{\hat{\Sigma}(t)}\hat{F}e^{-\hat{\Sigma}(t)} \right].$$

Seguiremos usando un resultado que se muestra en el Apéndice I que resulta en

$$e^{\hat{\Sigma}(t)}\hat{F}e^{-\hat{\Sigma}(t)} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^j(\hat{F}). \quad (3.16)$$

Introduciendo (3.16) en la expresión anterior se llega a que

$$\hat{\Sigma}'(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^k \left[ \hat{\Lambda}(t) - \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^j(\hat{F}) \right]. \quad (3.17)$$

Trabajando un poco con el segundo término (aparece en el Apéndice III) se puede escribir finalmente la expresión para la derivada temporal de  $\hat{\Sigma}(t)$  quedando

$$\frac{d\hat{\Sigma}(t)}{dt} = \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \frac{B_k}{k!} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^k \left[ \hat{\Lambda}(t) - \hat{F} \right] + \delta_{k-1,0} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^k(\hat{F}) \right\}, \quad \hat{\Sigma}(0) = 0. \quad (3.18)$$

Entonces, como ya comentamos anteriormente, lo siguiente será buscar  $\hat{\Sigma}(t)$  y  $\hat{F}$  como desarrollo en series, siguiendo el mismo procedimiento que en la sección 2.4, donde asumimos que  $\hat{\Lambda}$  dependía en primer orden en un cierto parámetro  $\varepsilon$ , es decir,

$$\hat{\Lambda}(t) \rightarrow \varepsilon \hat{\Lambda}(t),$$

y que, los términos de las series dependen en una cierta potencia de  $\varepsilon$ ,

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}(t) &= \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \hat{\Sigma}_k(t), \\ \hat{F} &= \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \hat{F}_n, \end{aligned}$$

de forma que la solución quedaría como

$$\hat{U}(t) = \exp \left[ \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \hat{\Sigma}_k(t) \right] \exp \left( t \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \hat{F}_n \right).$$

Ahora bien, los términos de  $\hat{F}_n$  se pueden relacionar de una forma muy sencilla con los términos que se obtuvieron para el desarrollo de Magnus ya que, si imponemos la condición de periodicidad que debe cumplir el operador  $\hat{p}(t)$ ,  $\hat{p}(t+T) = \hat{p}(t)$ , se tiene que  $\hat{p}(T) = \hat{p}(0) = \hat{I}$ . Por lo tanto, el operador evolución en el instante  $T$ , queda de la forma

$$\hat{U}(T) = \hat{p}(T) e^{T\hat{F}} = e^{T\hat{F}}.$$

Podemos, entonces, realizar una analogía directa con el desarrollo de Magnus que hacíamos directamente para el operador evolución (que consistía en escribir  $\hat{U}(t) = e^{\hat{\Omega}(t)}$ ) de manera que evaluándolo en el instante  $T$  e igualando los términos de mismo orden de los desarrollos se llega a que

$$\hat{F}_n = \frac{\hat{\Omega}_n(T)}{T}, \quad (3.19)$$

donde  $\hat{\Omega}_n(T)$  son los términos del desarrollo de Magnus del operador evolución temporal del problema evaluados en el instante  $T$ , que atienden a la fórmula (2.30) y donde los primeros términos tienen la forma dada por las ecuaciones (2.34), (2.37), (2.40).

Una vez hemos encontrado la forma que tienen los términos de  $\hat{F}$ , podemos hacer un análisis similar al realizado con los términos del desarrollo de Magnus para obtener los términos de  $\hat{\Sigma}(t)$ . Esto consistía en introducir los desarrollos en potencias de  $\varepsilon$  en la ecuación general de  $\hat{\Sigma}(t)$ , (3.18), y luego igualar términos con misma potencia del parámetro.

Ya comprobamos para el caso del desarrollo de Magnus que en general se obtiene una expresión algo compleja para los términos y que los cálculos pueden provocar que se pierda la noción de lo que buscamos.

Como realmente lo que nos interesa en la práctica son algunos términos, el número de elementos que tomemos en nuestra serie dependerá de la precisión con la que queramos resolver el problema. Lo que vamos a realizar para finalizar la sección será encontrar las expresiones de los primeros dos términos de  $\hat{\Sigma}(t)$ . En este caso vamos a calcular sólo los dos primeros términos al contrario de los tres que calculamos para el caso de Magnus porque uno de las desventajas del desarrollo de Floquet-Magnus frente al primero es que el cálculo de términos aumenta en complejidad como vamos a comprobar. Por tanto, nos quedaremos hasta el segundo término lo cual nos permitirá ejemplificar suficientemente bien el procedimiento sin realizar cálculos que resulten engorrosos.

El primer término  $\hat{\Sigma}_1(t)$  satisface la ecuación

$$\frac{d\hat{\Sigma}_1(t)}{dt} = \hat{\Lambda}(t) - \hat{F}_1, \quad (3.20)$$

cuya solución viene dada por

$$\hat{\Sigma}_1(t) = \int_0^t \hat{\Lambda}_1 dt_1 - t\hat{F}_1 \quad \text{con} \quad \hat{F}_1 = \frac{\int_0^T dt_1 \hat{\Lambda}_1}{T}, \quad (3.21)$$

donde de nuevo se está siguiendo la notación  $\hat{\Lambda}(t_i) \equiv \hat{\Lambda}_i$ . Por otro lado el segundo término sigue la ecuación

$$\frac{d\hat{\Sigma}_2(t)}{dt} = -\hat{F}_2 + \frac{1}{2} \left[ \hat{\Lambda}(t) + \hat{F}_1, \hat{\Sigma}_1(t) \right], \quad (3.22)$$

cuya solución vendrá dada por

$$\hat{\Sigma}_2(t) = \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \left[ \hat{\Lambda}_1 + \hat{F}_1, \hat{\Sigma}_1(t_1) \right] - t\hat{F}_2 \quad \text{con} \quad \hat{F}_2 = \frac{\frac{1}{2} \int_0^T dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \left[ \hat{\Lambda}_1, \hat{\Lambda}_2 \right]}{T}. \quad (3.23)$$

## 4. Aplicaciones a la Mecánica Cuántica

En esta sección usaremos los conceptos desarrollados en los apartados previos para intentar encontrar expresiones aproximadas analíticas de operadores de evolución temporal de ciertos sistemas cuánticos. El procedimiento a seguir será partir de un hamiltoniano cuántico y resolver el problema de evolución (1.3) de forma numérica usando el programa MATLAB. Este resultado nos servirá para comparar con nuestras aproximaciones realizadas a partir de desarrollos de Magnus o Floquet-Magnus, cuando corresponda. Trabajaremos en un espacio de Hilbert de dimensión dos y, lo que usaremos para comparar los resultados serán las evoluciones temporales de ciertos operadores hermíticos, que sabemos a priori que son valores reales. En concreto, evaluaremos los valores esperados de los operadores de Pauli <sup>1</sup>  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  a partir de un estado inicial genérico. Comenzamos con los modelos.

### 4.1. Modelo I. Modelo periódico.

Para este primer modelo vamos a partir de un hamiltoniano periódico en el tiempo que sigue la forma siguiente

$$\hat{H}(t) = \hbar \frac{\Delta}{2} \hat{\sigma}_x + \hbar \frac{A}{2} \sin(\omega t) \hat{\sigma}_z, \quad (4.1)$$

donde  $\Delta$ ,  $A$  y  $\omega$  son parámetros ajustables del sistema. Este último corresponde a la frecuencia del campo externo. A simple vista se puede observar cómo es un hamiltoniano

---

<sup>1</sup> Reciben su nombre por Wolfgang Ernst Pauli, físico austríaco del siglo XX, quien fue pionero en su uso para tratar temas relacionados con el espín en la Física Cuántica. Estos operadores aparecieron por primera vez en el artículo [13] donde el físico teórico austríaco desarrolla la teoría de los momentos magnéticos.

periódico, es más, la periodicidad es conocida y coincide con  $T = \frac{2\pi}{\omega}$ , siendo  $T$  el periodo del campo externo aplicado al sistema.

Podemos representar los operadores de Pauli en forma matricial. La elección más común de base en este tipo de espacios es escoger los autoestados del operador  $\hat{\sigma}_z$ ,  $|+\rangle$  y  $|-\rangle$ , que indican proyección de espín  $\frac{1}{2}$  positiva o negativa a lo largo del eje  $z$ , es decir,

$$\hat{\sigma}_z |+\rangle = \frac{1}{2}\hbar |+\rangle, \quad (4.2)$$

$$\hat{\sigma}_z |-\rangle = -\frac{1}{2}\hbar |-\rangle. \quad (4.3)$$

En esta base, la representación matricial de los operadores de Pauli queda como

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

donde  $i$  denota la unidad imaginaria.

Con todo esto podemos pasar a obtener los operadores evolución para el hamiltoniano (4.1). Lo obtendremos de tres formas distintas, primero mediante la resolución numérica anteriormente mencionada, para la cual se usará MATLAB, más en concreto su función ode45 que resuelve sistemas de ecuaciones diferenciales. Por otro lado, aproximaremos el operador evolución temporal haciendo uso del desarrollo de Magnus, y, por último, como el problema es periódico, también realizaremos una aproximación mediante el método de Floquet-Magnus.

#### 4.1.1. Desarrollo de Magnus

En esta sección vamos a obtener los términos del desarrollo de Magnus del hamiltoniano del primer modelo. Para ello definimos el operador  $\hat{\Lambda}(t)$  como

$$\hat{\Lambda}(t) = -\frac{i\hat{H}(t)}{\hbar} = -\frac{i}{2} (\Delta\hat{\sigma}_x + A \sin(\omega t)\hat{\sigma}_z). \quad (4.7)$$

Pasamos a calcular el primer término del desarrollo de Magnus  $\hat{\Omega}_1(t)$ , que sigue la ecuación (2.34),

$$\hat{\Omega}_1(t) = \int_0^t dt_1 \hat{\Lambda}_1 = -\frac{i}{2} \left\{ \Delta t \hat{\sigma}_x - \frac{A}{\omega} [\cos(\omega t) - 1] \hat{\sigma}_z \right\}. \quad (4.8)$$

Cabe recordar que estamos siguiendo la notación,  $\hat{\Lambda}(t_i) \equiv \hat{\Lambda}_i$ . Sigamos ahora con el segundo término,  $\hat{\Omega}_2(t)$ , que viene dado por la fórmula (2.37)

$$\hat{\Omega}_2(t) = \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 [\hat{\Lambda}_1, \hat{\Lambda}_2],$$

introduciendo los valores de  $\hat{\Lambda}$  pero evaluados en  $t_1$  y  $t_2$  se llega a que

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}_2(t) &= \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \left\{ -\frac{1}{4} [\Delta \hat{\sigma}_x + A \sin(\omega t_1) \hat{\sigma}_z, \Delta \hat{\sigma}_x + A \sin(\omega t_2) \hat{\sigma}_z] \right\}, \\ &= -\frac{1}{8} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \{ A \Delta \sin(\omega t_2) [\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_z] + A \Delta \sin(\omega t_1) [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] \}. \end{aligned}$$

Ahora usaremos la propiedad de conmutación de los operadores de Pauli, que viene dada por

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k, \quad (4.9)$$

donde  $\epsilon_{ijk}$  es el Símbolo de Levi-Civita <sup>2</sup>, que se define como sigue

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, & \text{si } (i, j, k) \text{ es } (1,2,3), (3,1,2), (2,3,1) \\ -1, & \text{si } (i, j, k) \text{ es } (3,2,1), (1,3,2), (2,1,3) \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (4.10)$$

En esta relación de conmutación de los operadores de Pauli también se hace uso del convenio de índices repetidos introducido por Einstein <sup>3</sup>. Usando (4.9) y la definición (4.10) se llega a que

$$[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y = -[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_z],$$

por lo que, introduciendo esto último en la expresión de  $\hat{\Omega}_2(t)$  se llega a que

$$\hat{\Omega}_2(t) = -\frac{A\Delta}{8} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \{ 2i\hat{\sigma}_y [\sin(\omega t_1) - \sin(\omega t_2)] \},$$

donde, realizando la integral doble que nos queda, llegamos a que

$$\hat{\Omega}_2(t) = -\frac{iA\Delta\hat{\sigma}_y}{4\omega^2} [2\sin(\omega t) - t\omega \cos(\omega t) - t\omega]. \quad (4.11)$$

Por lo que, podemos expresar nuestro operador evolución temporal aproximado por Magnus,  $\hat{U}_{\text{Magnus}}(t)$ , de la siguiente forma

$$\hat{U}_{\text{Magnus}}(t) = e^{\hat{\Omega}_1(t) + \hat{\Omega}_2(t)} \quad (4.12)$$

<sup>2</sup> Recibe su nombre por el matemático italiano Tullio Levi-Civita, quién realizó numerosas contribuciones al campo del cálculo tensorial. Se enunció por primera vez por el matemático italiano en su artículo [14] en 1901.

<sup>3</sup> Albert Einstein (1879-1955) es conocido como uno de los científicos más influyentes del siglo XX. En su artículo [15], introdujo por primera vez su convenio de índices repetidos, que consiste en sumar para todo posible valor del índice cuando este aparezca repetido en alguna expresión sin necesidad de escribir explícitamente el símbolo del sumatorio.

### 4.1.2. Desarrollo de Floquet-Magnus

En esta sección vamos a pasar a realizar los cálculos para obtener los términos del desarrollo de Floquet-Magnus del problema. Para ello, recordamos la forma que tenía el operador evolución de Floquet-Magnus. Esta venía dada por

$$\hat{U}_{\text{F-M}}(t) = \hat{p}(t)e^{t\hat{F}},$$

con  $\hat{p}(t)$  un operador periódico. Vamos a comenzar obteniendo los términos del desarrollo en serie del operador  $\hat{F}$ , que vienen dado por la fórmula general (3.19). Como ya hemos obtenido los primeros dos términos del desarrollo de Magnus, su obtención es prácticamente trivial teniendo en cuenta que el periodo del campo externo aplicado es  $T = \frac{2\pi}{\omega}$ , quedan los términos

$$\begin{aligned}\hat{F}_1 &= \frac{\hat{\Omega}_1(T)}{T} = \frac{\omega}{2\pi} \hat{\Omega}_1\left(\frac{2\pi}{\omega}\right) \\ &= -\frac{i\omega}{4\pi} \left\{ \Delta \frac{2\pi}{\omega} \hat{\sigma}_x - \frac{A}{\omega} [\cos(2\pi) - 1] \hat{\sigma}_z \right\},\end{aligned}$$

por lo que se llega a

$$\hat{F}_1 = -\frac{i\Delta}{2} \hat{\sigma}_x. \quad (4.13)$$

De la misma forma se puede obtener el segundo término del desarrollo de  $\hat{F}$ ,  $\hat{F}_2$ . Para ello usamos la expresión a la que llegamos para  $\hat{\Omega}_2(t)$  como

$$\begin{aligned}\hat{F}_2 &= \frac{\hat{\Omega}_2(T)}{T} = \frac{\omega}{2\pi} \hat{\Omega}_2\left(\frac{2\pi}{\omega}\right) \\ &= -\frac{\omega i A \Delta \hat{\sigma}_y}{8\pi\omega^2} [2 \sin(2\pi) - 2\pi \cos(2\pi) - 2\pi],\end{aligned}$$

que nos lleva a que

$$\hat{F}_2 = -\frac{iA\Delta\hat{\sigma}_y}{2\omega}. \quad (4.14)$$

Una vez hemos obtenido los primeros términos del desarrollo de  $\hat{F}$ , pasamos con los de  $\hat{p}(t)$ , que tienen en sus expresiones los términos de  $\hat{F}$ . Empezamos con  $\hat{\Sigma}_1(t)$ , que sigue la ecuación

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_1(t) &= \int_0^t dt_1 \hat{\Lambda}_1 - t\hat{F}_1 \\ &= -\frac{i}{2} \left\{ \Delta t \hat{\sigma}_x - \frac{A}{\omega} [\cos(\omega t) - 1] \hat{\sigma}_z \right\} + \frac{i\Delta\hat{\sigma}_x t}{2},\end{aligned}$$

lo cual nos da como resultado el siguiente valor para  $\hat{\Sigma}_1(t)$

$$\hat{\Sigma}_1(t) = \frac{iA}{2\omega} [\cos(\omega t) - 1] \hat{\sigma}_z. \quad (4.15)$$

Pasamos al segundo término  $\hat{\Sigma}_2(t)$ . Este sigue la fórmula (3.23). Lo primero que haremos será evaluar el conmutador que aparece dentro de la integral, que podemos escribir como

$$\begin{aligned} \hat{\Lambda}_1 + \hat{F}_1 &= -i\Delta\hat{\sigma}_x - \frac{iA}{2\omega} \sin(\omega t)\hat{\sigma}_z \rightarrow \\ [\hat{\Lambda}_1 + \hat{F}_1, \hat{\Sigma}_1(t_1)] &= \frac{\Delta A}{2\omega} [\cos(\omega t_1) - 1] [\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_z] \\ &= -\frac{iA\Delta\hat{\sigma}_y}{\omega} [\cos(\omega t_1) - 1]. \end{aligned}$$

Una vez hemos realizado este cálculo previo, podemos obtener directamente el valor de  $\hat{\Sigma}_2(t)$  queda como

$$\hat{\Sigma}_2(t) = \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \left\{ -\frac{iA\Delta\hat{\sigma}_y}{\omega} [\cos(\omega t_1) - 1] \right\} - t \frac{iA\Delta\hat{\sigma}_y}{2\omega}.$$

El término que está fuera de la integral se anula con uno de los términos que aparecen tras integrar dejando el siguiente valor de  $\hat{\Sigma}_2(t)$

$$\hat{\Sigma}_2(t) = -\frac{i\hat{\sigma}_y\Delta A}{2\omega^2} \sin(\omega t). \quad (4.16)$$

Por tanto, con el cálculo hasta el segundo orden de estos desarrollos de  $\hat{\Sigma}(t)$  y de  $\hat{F}$ , llegamos a la siguiente expresión analítica aproximada para  $\hat{U}_{F-M}(t)$ ,

$$\hat{U}_{F-M}(t) = e^{\hat{\Sigma}_1(t) + \hat{\Sigma}_2(t)} e^{t(\hat{F}_1 + \hat{F}_2)}. \quad (4.17)$$

Para comprobar cómo de buenas son nuestras aproximaciones (4.12) y (4.17), vamos a partir de un estado genérico inicial,  $|y_0\rangle$ , por lo que el estado en cualquier instante de tiempo vendrá dado por

$$|y(t)\rangle = \hat{U}(t) |y_0\rangle.$$

Tomaremos el estado inicial como

$$|y_0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

y, por tanto, la evolución temporal de los valores esperados de los operadores de Pauli vendrán dadas por

$$\langle \hat{\sigma}_i(t) \rangle = \langle y(t) | \hat{\sigma}_i | y(t) \rangle = \langle y_0 | \hat{U}^\dagger(t) \hat{\sigma}_i \hat{U}(t) | y_0 \rangle. \quad (4.18)$$

### 4.1.3. Resultados

En esta sección vamos a presentar los resultados de la simulación de la evolución de los valores esperados de los tres operadores de Pauli en el tiempo. Para ello vamos a darles a los parámetros del sistema unos ciertos valores que serán los siguientes

$$\frac{A}{\omega} = \frac{1}{2\pi} \quad \text{y} \quad \frac{\Delta}{\omega} = \frac{1}{4\pi},$$

donde usamos unidades adimensionales del problema. Cabe destacar que se podría haber utilizado cualquier pareja de valores para los parámetros en la simulación. Representaremos primero en un periodo los valores esperados usando el operador evolución calculado numéricamente, el obtenido mediante el desarrollo de Magnus y el resultante de aplicar Floquet-Magnus. Se muestran los resultados en la Fig. 4.1.

Se puede comprobar que, aun habiendo usado sólo dos términos en cada desarrollo, tanto de Magnus como de Floquet-Magnus, las soluciones aproximadas siguen muy bien el comportamiento de la resolución numérica del programa. Esto es para un periodo únicamente. Podemos realizar la simulación para cinco periodos del problema y llegaríamos al resultado que se muestra en la Fig. 4.2.

Se puede ver en la imagen cómo, principalmente si nos enfocamos en el valor esperado de  $\hat{\sigma}_x$ , se ve una diferencia más marcada entre el desarrollo de Magnus y el de Floquet-Magnus. El método de Floquet-Magnus aplicado a hamiltonianos periódicos de este tipo en general da mejores resultados y en un intervalo temporal más amplio. De nuevo podemos comprobar que simplemente habiendo tomado dos términos de los desarrollos, lo cual conlleva un cálculo analítico moderado, podemos emular con muy buena precisión el comportamiento de la solución numérica del problema.

En la siguiente sección trataremos otro caso de hamiltoniano, en ese caso, será un hamiltoniano definido por partes.

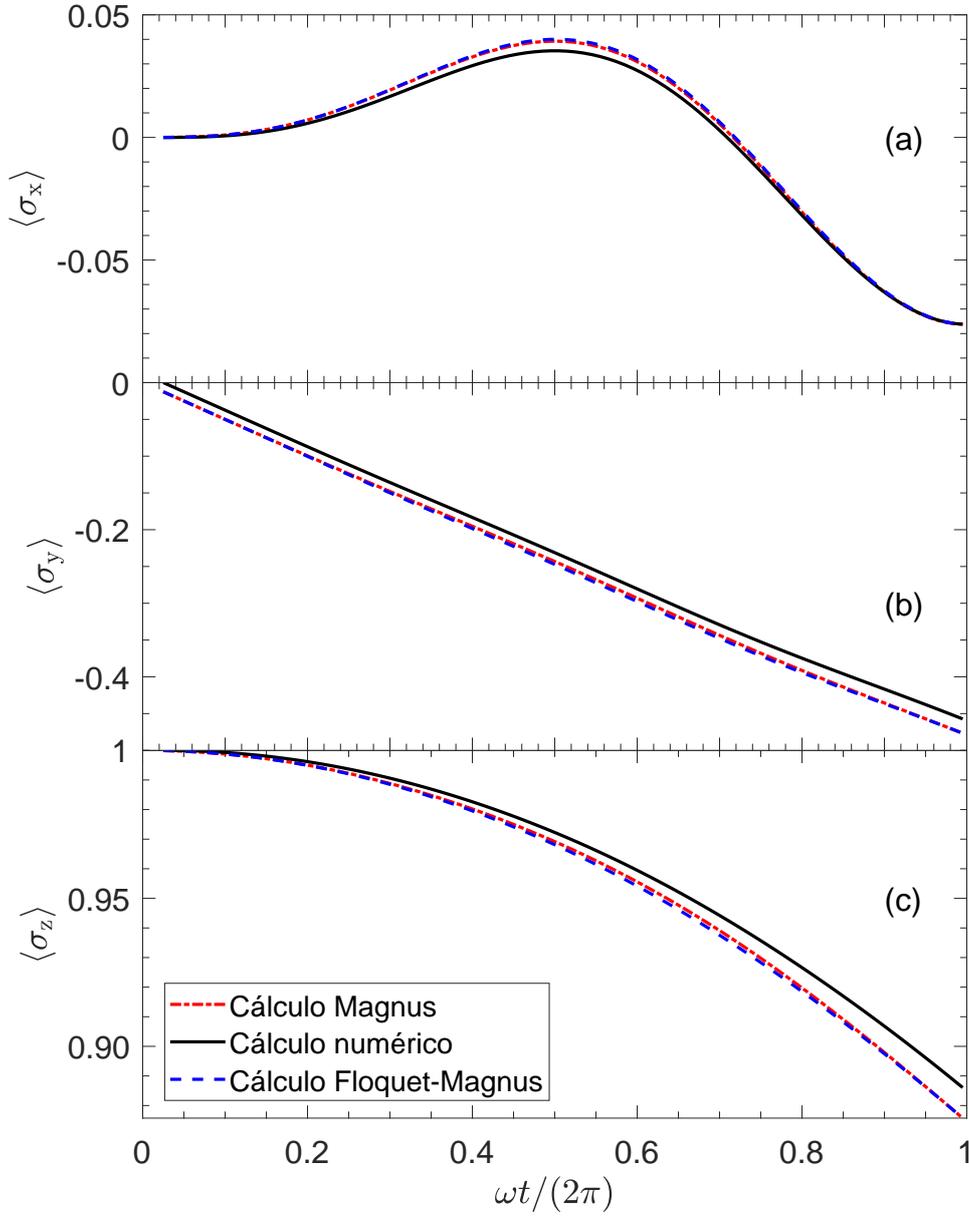


Figura 4.1: Valores esperados de los operadores de Pauli en el tiempo (unidades adimensionales). El valor de los parámetros empleados es  $A/\omega = 1/(2\pi)$  y  $\Delta/\omega = 1/(4\pi)$ . Se representa con una línea continua negra el valor esperado de los operadores usando la resolución numérica del problema, con una línea punteada roja la solución usando el método de Magnus y con una línea discontinua la solución tras aplicar Floquet-Magnus. Todo esto para un periodo del hamiltoniano. (a) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_x$ . (b) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_y$ . (c) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_z$ .

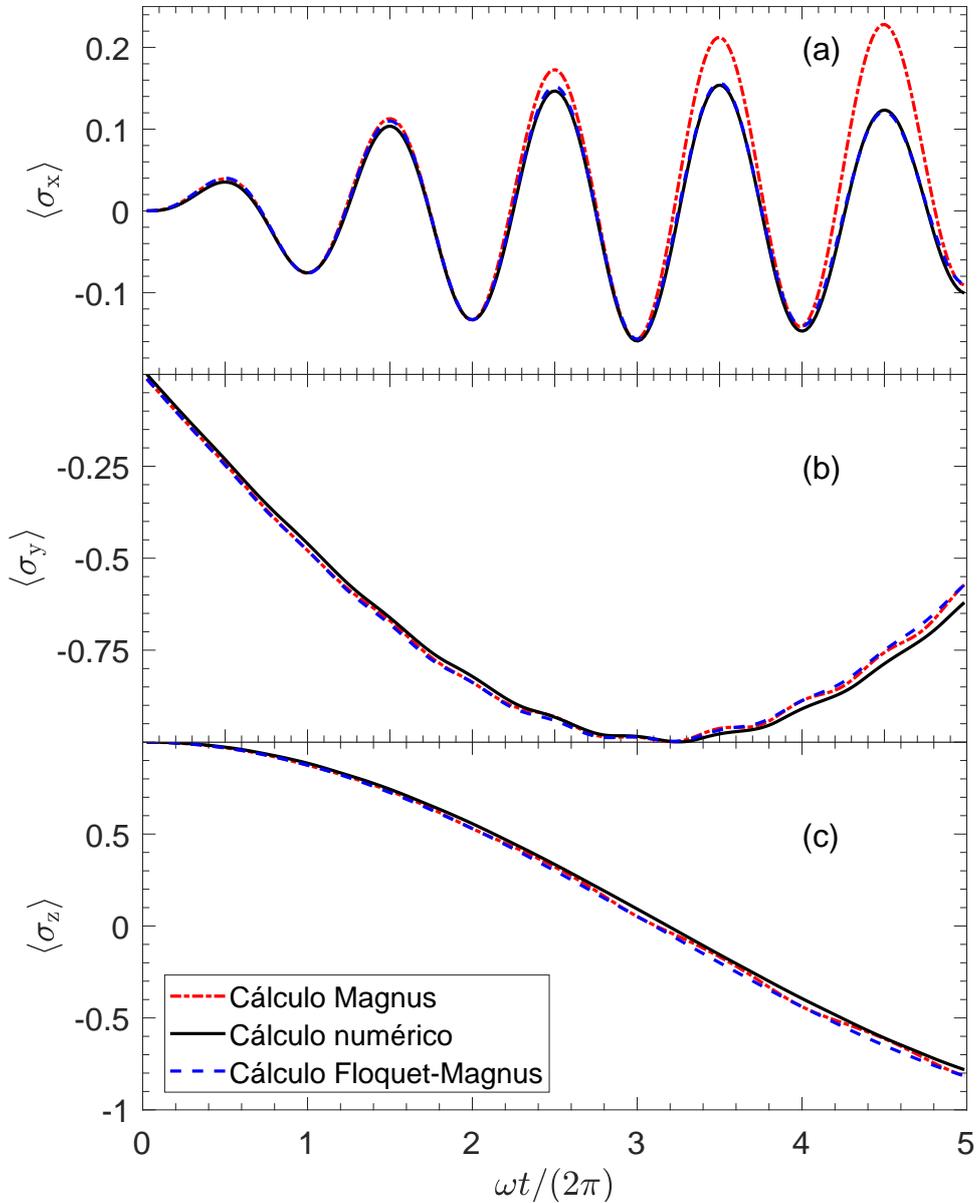


Figura 4.2: Valores esperados de los operadores de Pauli en el tiempo. El valor de los parámetros empleados es  $A/\omega = 1/(2\pi)$  y  $\Delta/\omega = 1/(4\pi)$ . Se representa con una línea continua negra el valor esperado de los operadores usando la resolución numérica del problema, con una línea punteada roja la solución usando el método de Magnus y con una línea discontinua la solución tras aplicar Floquet-Magnus. Todo esto para cinco periodos del hamiltoniano. (a) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_x$ . (b) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_y$ . (c) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_z$ .

## 4.2. Modelo II. Hamiltoniano por partes.

Como hemos comentado, en este segundo modelo vamos a considerar un hamiltoniano definido por partes, que viene dado por

$$\hat{H}(t) = \frac{\hbar}{2} [\Delta \hat{\sigma}_x + A(t) \hat{\sigma}_z], \quad (4.19)$$

donde  $A(t)$  se define a trozos en la forma

$$A(t) = \begin{cases} A_1 & \text{si } 0 < t \leq t_0 \\ A_2 & \text{si } t_0 < t \leq T. \end{cases} \quad (4.20)$$

Este modelo lo hemos propuesto para ilustrar el comportamiento del desarrollo de Magnus frente a la solución analítica del problema que, evidentemente para este problema se puede encontrar ya que el hamiltoniano por partes es independiente del tiempo en cada intervalo. Para ello, lo primero que vamos a hacer es encontrar la solución analítica del problema para el operador evolución, para el cual, tenemos dos problemas de hamiltonianos constantes en el tiempo. Estos exhiben la forma siguiente

$$\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t),$$

donde la solución se expresa como

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}.$$

Previo paso a expresar la solución vamos a hacer un cambio de notación en el problema para que las expresiones se simplifiquen. En concreto vamos a dividir nuestro hamiltoniano,  $-\frac{i}{\hbar} \hat{H}$  en dos hamiltonianos constantes que se escribirán como

$$\hat{\Lambda} = -\frac{i}{2} (\Delta \hat{\sigma}_x + A_1 \hat{\sigma}_z) \quad 0 < t \leq t_0 \quad (4.21)$$

$$\hat{\Lambda}' = -\frac{i}{2} (\Delta \hat{\sigma}_x + A_2 \hat{\sigma}_z) \quad t_0 < t \leq T. \quad (4.22)$$

Ahora, si usamos la propiedad de los operadores de evolución temporal (3.9) se llega a la siguiente solución para el operador evolución

$$\hat{U}(t) = \begin{cases} e^{\hat{\Lambda} t} & \text{si } 0 < t \leq t_0 \\ e^{\hat{\Lambda}'(t-t_0)} e^{\hat{\Lambda} t_0} & \text{si } t_0 < t \leq T, \end{cases} \quad (4.23)$$

donde el primer término es prácticamente trivial obtenerlo teniendo en cuenta la ecuación de Schrödinger para el operador evolución. El segundo término se obtiene utilizando que  $\hat{U}(t) = \hat{U}(t, t_0)\hat{U}(t_0)$ . Expresando completamente la solución analítica, teniendo en cuenta las expresiones de los operadores  $\hat{\Lambda}$  y  $\hat{\Lambda}'$  se llega a que

$$\hat{U}(t) = \begin{cases} \exp \left[ -\frac{i}{2} (\Delta\hat{\sigma}_x + A_1\hat{\sigma}_z) t \right] & \text{si } 0 < t \leq t_0 \\ \exp \left[ -\frac{i}{2} (\Delta\hat{\sigma}_x + A_2\hat{\sigma}_z) (t - t_0) \right] \exp \left[ -\frac{i}{2} (\Delta\hat{\sigma}_x + A_2\hat{\sigma}_z) t_0 \right] & \text{si } t_0 < t \leq T. \end{cases}$$

### 4.2.1. Desarrollo de Magnus

Para proseguir vamos a calcular los términos del desarrollo de Magnus para el problema. En primer lugar, calcularemos  $\hat{\Omega}_1(t)$ . Partimos de su expresión general (2.34), entonces obtenemos lo siguiente

$$\hat{\Omega}_1(t) = \int_0^t dt_1 \hat{\Lambda}_1 = \begin{cases} \int_0^t dt_1 \hat{\Lambda} & \text{si } 0 < t \leq t_0 \\ \int_0^{t_0} dt_1 \hat{\Lambda} + \int_{t_0}^t dt_1 \hat{\Lambda}' & \text{si } t_0 < t \leq T. \end{cases}$$

Resulta la siguiente expresión para  $\hat{\Omega}_1(t)$

$$\hat{\Omega}_1(t) = \begin{cases} \hat{\Lambda} t & \text{si } 0 < t \leq t_0 \\ \hat{\Lambda} t_0 + \hat{\Lambda}'(t - t_0) & \text{si } t_0 < t \leq T. \end{cases} \quad (4.24)$$

Pasamos con el caso de  $\hat{\Omega}_2(t)$ , cuya expresión viene dada por (2.37). Evidentemente, para  $t < t_0$ , el valor de  $\hat{\Omega}_2(t) = 0$  ya que el conmutador del integrando sería nulo. Para  $t > 0$  nos quedaría lo siguiente

$$\hat{\Omega}_2(t) = \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} [\hat{\Lambda}_1, \hat{\Lambda}_2] = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_0^{t_0} dt_2 [\hat{\Lambda}', \hat{\Lambda}] \quad (t_0 < t \leq T),$$

ya que es el único intervalo temporal de  $t_1$  y  $t_2$  donde el conmutador es distinto de cero.

Evaluamos el valor del conmutador que aparece en el integrando

$$\begin{aligned} [\hat{\Lambda}', \hat{\Lambda}] &= -\frac{1}{4} [\Delta\hat{\sigma}_x + A_2\hat{\sigma}_z, \Delta\hat{\sigma}_x + A_1\hat{\sigma}_z] \\ &= -\frac{1}{4} \{ \Delta A_1 [\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_z] + \Delta A_2 [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] \} \\ &= -\frac{i\Delta\hat{\sigma}_y}{2} (A_2 - A_1), \end{aligned}$$

donde de nuevo hemos usado las propiedades de conmutación de los operadores de Pauli (4.9). Queda entonces para el segundo término lo siguiente

$$\hat{\Omega}_2(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 < t \leq t_0 \\ -\frac{i\Delta}{2} (A_2 - A_1) \hat{\sigma}_y t_0 (t - t_0) & \text{si } t_0 < t \leq T. \end{cases} \quad (4.25)$$

Pasamos entonces con el tercer y último término que calcularemos para este caso. Su expresión viene dada por (2.40). Evidentemente, al igual que con el caso de  $\hat{\Omega}_2(t)$ , para  $t < t_0$ , se tiene que  $\hat{\Omega}_3(t) = 0$  ya que los conmutadores se anularían al ser el mismo operador el que se conmuta. Pasamos a estudiar el caso en el que  $t_0 < t \leq T$ .

Procedemos a dividir la integral en distintos intervalos temporales y obtenemos que las únicas partes de la integral que no se anulan son

$$\begin{aligned}\hat{\Omega}_3(t) &= \frac{1}{6} \int_{t_0}^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left\{ \left[ \hat{\Lambda}_1, \left[ \hat{\Lambda}_2, \hat{\Lambda}_3 \right] \right] + \left[ \left[ \hat{\Lambda}_1, \hat{\Lambda}_2 \right], \hat{\Lambda}_3 \right] \right\} \\ &= \frac{1}{6} \int_{t_0}^t dt_1 \int_0^{t_0} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left[ \left[ \hat{\Lambda}', \hat{\Lambda} \right], \hat{\Lambda} \right] + \frac{1}{6} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_0^{t_0} dt_3 \left[ \hat{\Lambda}', \left[ \hat{\Lambda}', \hat{\Lambda} \right] \right].\end{aligned}$$

Evaluamos ahora rápidamente los conmutadores que aparecen en los integrando teniendo el resultado anterior de  $\left[ \hat{\Lambda}', \hat{\Lambda} \right]$ . Queda que

$$\begin{aligned}\left[ \left[ \hat{\Lambda}', \hat{\Lambda} \right], \hat{\Lambda} \right] &= \frac{\Delta i}{2} (A_1 - A_2) (A_1 \hat{\sigma}_x - \Delta \hat{\sigma}_z), \\ \left[ \hat{\Lambda}', \left[ \hat{\Lambda}', \hat{\Lambda} \right] \right] &= \frac{\Delta i}{2} (A_1 - A_2) (\Delta \hat{\sigma}_z - A_2 \hat{\sigma}_x).\end{aligned}$$

Si, ahora, integramos teniendo en cuenta que los integrandos son independientes del tiempo se llega a la siguiente expresión para  $\hat{\Omega}_3(t)$

$$\hat{\Omega}_3(t) = 0, \quad 0 < t \leq t_0 \quad (4.26)$$

$$\hat{\Omega}_3(t) = \frac{\Delta i}{24} (A_1 - A_2) \left\{ t_0^2 (t - t_0) (A_1 \hat{\sigma}_x - \Delta \hat{\sigma}_z) + t_0 (t - t_0)^2 (\Delta \hat{\sigma}_z - A_2 \hat{\sigma}_x) \right\}, \quad t_0 < t \leq T. \quad (4.27)$$

Los objetivos principales que buscamos en este modelo calculando tres términos del desarrollo son, por un lado, comprobar cómo a partir del tercer término los cálculos se complican considerablemente y, por otra parte, introducir un método que nos permite verificar que nuestros cálculos son correctos. Esta técnica consiste en usar la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff<sup>4</sup>, que tiene la forma siguiente

$$e^{\hat{X}} e^{\hat{Y}} = e^{\hat{Z}}, \quad (4.28)$$

$$\hat{Z} = \hat{X} + \hat{Y} + \frac{1}{2} [\hat{X}, \hat{Y}] + \frac{1}{12} [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]] - \frac{1}{12} [\hat{Y}, [\hat{X}, \hat{Y}]] + \dots \quad (4.29)$$

Se puede ver a simple vista cómo esta fórmula tiene una aplicación directa a nuestro caso ya que, para el segundo intervalo temporal, conocemos la solución analítica que tiene

<sup>4</sup>Recibe su nombre por los tres matemáticos que la desarrollaron Henry Baker, Edward Campbell y Felix Hausdorff. Fue por primera vez introducida en el artículo [16], por Henri Poincaré (1854-1912) y posteriormente sería desarrollada por los matemáticos Henry Baker, Edward Campbell y Felix Hausdorff.

la forma del primer término de (4.28), es decir, un producto de exponenciales, y estamos buscando mediante el desarrollo de Magnus una expresión tipo exponencial. Entonces haciendo las siguientes analogías

$$\hat{X} = \hat{\Lambda}'(t - t_0), \quad \hat{Y} = \hat{\Lambda}t_0, \quad \hat{Z} = \hat{\Omega}(t),$$

podemos asociar a cada término de  $\hat{Z}$  términos del desarrollo de Magnus y comprobar que coincidan.

El primer término de  $\hat{\Omega}(t)$ , es decir,  $\hat{\Omega}_1(t)$  coincide claramente con  $\hat{X} + \hat{Y}$  ya que

$$\hat{\Omega}_1(t) = \hat{\Lambda}t_0 + \hat{\Lambda}'(t - t_0) = \hat{Y} + \hat{X} \quad (t_0 < t \leq T). \quad (4.30)$$

El segundo término de  $\hat{Z}$  también es sencillo comprobar que coincide con el segundo término del desarrollo de Magnus ya que

$$\frac{1}{2} [\hat{X}, \hat{Y}] = \frac{1}{2} t_0(t - t_0) [\hat{\Lambda}', \hat{\Lambda}] = -\frac{i\Delta\hat{\sigma}_y}{2} t_0(t - t_0)(A_2 - A_1) = \hat{\Omega}_2(t) \quad (t_0 < t \leq T). \quad (4.31)$$

Pasamos el tercer término de  $Z$ , el que involucra a los dobles conmutadores, vamos a comprobar que ese término coincide con  $\hat{\Omega}_3(t)$ . Para ello, vamos a hacer los cálculos previos siguientes

$$\begin{aligned} \frac{1}{12} [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]] &= \frac{i(t - t_0)^2 t_0 \Delta}{24} (A_1 - A_2) (\Delta\hat{\sigma}_z - A_2\hat{\sigma}_x), \\ \frac{1}{12} [\hat{Y}, [\hat{X}, \hat{Y}]] &= \frac{i(t - t_0) t_0^2 \Delta}{24} (A_1 - A_2) (\Delta\hat{\sigma}_z - A_1\hat{\sigma}_x), \end{aligned}$$

por lo que, si combinamos los términos tal y cómo aparecen en (4.29) se llega a que

$$\frac{1}{12} [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]] - \frac{1}{12} [\hat{Y}, [\hat{X}, \hat{Y}]] = \hat{\Omega}_3(t) \quad (t_0 < t \leq T). \quad (4.32)$$

De esta forma hemos obtenido los primeros términos que habíamos calculado usando el desarrollo de Magnus de manera alternativa.

Pasamos entonces a comprobar gráficamente los resultados analíticos exactos con los que nos proporciona la aproximación de Magnus. Para ello consideraremos de nuevo el mismo estado inicial que en el primer modelo

$$|y_0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

y veremos los valores esperados de los operadores de Pauli entre  $t = 0$  y  $t = T$ . Los valores que asignaremos a los parámetros del problema serán

$$A_1 T = 1; \quad A_2 T = \frac{3}{4}; \quad \frac{t_0}{T} = \frac{1}{2}; \quad \Delta T = \frac{1}{4}$$

### 4.2.2. Resultados

En esta sección presentaremos los resultados del cálculo de los valores esperados de los operadores de Pauli  $\hat{\sigma}_x$ ,  $\hat{\sigma}_y$ ,  $\hat{\sigma}_z$ . Se compararán las soluciones exacta y aproximada por Magnus del operador evolución. La solución calculada con el desarrollo de Magnus viene dada por

$$\hat{U}_{\text{Magnus}} = e^{\hat{\Omega}_1(t) + \hat{\Omega}_2(t) + \hat{\Omega}_3(t)}. \quad (4.33)$$

Los resultados se presentan en la Fig 4.3. En esta podemos ver cómo para el intervalo temporal  $0 < t \leq t_0$ , la solución de Magnus coincide con la resolución exacta, hecho que es evidente a partir de las expresiones que hemos calculados. Para el segundo intervalo temporal  $t_0 < t \leq T$ , la solución de Magnus aproxima razonablemente bien la solución exacta.

Es necesario hacer notar que, en la resolución del problema usando el teorema de Magnus, se ha realizado de forma que se pueda comparar bien un resultado exacto teórico con uno aproximado. Evidentemente el problema de evolución del sistema lo podríamos haber partido en dos subproblemas, uno antes del cambio de hamiltoniano y otro tras el mismo. En ese caso, si hubiésemos aproximado mediante Magnus ambos hamiltonianos habríamos obtenido exactamente la misma solución que la teórica. La aproximación de Magnus en ese caso coincidiría con la solución exacta y quedaría de la siguiente forma

$$\hat{U}_{\text{Magnus}}(t) = \begin{cases} \hat{U}_{\text{Magn},1} = e^{\hat{\Lambda}t} & \text{si } 0 < t \leq t_0 \\ \hat{U}_{\text{Magn},2}(t, t_0)\hat{U}_{\text{Magn},1}(t_0) = e^{\hat{\Lambda}'(t-t_0)}e^{\hat{\Lambda}t_0} & \text{si } t_0 < t \leq T, \end{cases} \quad (4.34)$$

donde  $\hat{U}_{\text{Magn},2}(t, t_0)$  es el operador de evolución aproximado mediante Magnus en los instantes de tiempos superiores a  $t_0$ . Podemos comprobar ahora como coincide con el operador teórico exacto dado que todos los conmutadores que aparecen en los términos del desarrollo de Magnus son nulos porque el hamiltoniano es constante en ese caso y coincide con  $\hat{\Lambda}'$ .

Evidentemente, si interpretamos  $T$  como un periodo temporal, este problema podría haber sido extendido a más periodos introduciendo así la posibilidad de obtener un desarrollo de Floquet-Magnus. Se ha preferido usar un modelo de este tipo para calcular hasta un orden más alto el desarrollo de Magnus e introducir un método alternativo para obtener un desarrollo aproximado de la solución en este caso como es la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff mostrada. Se ilustran a continuación los resultados.

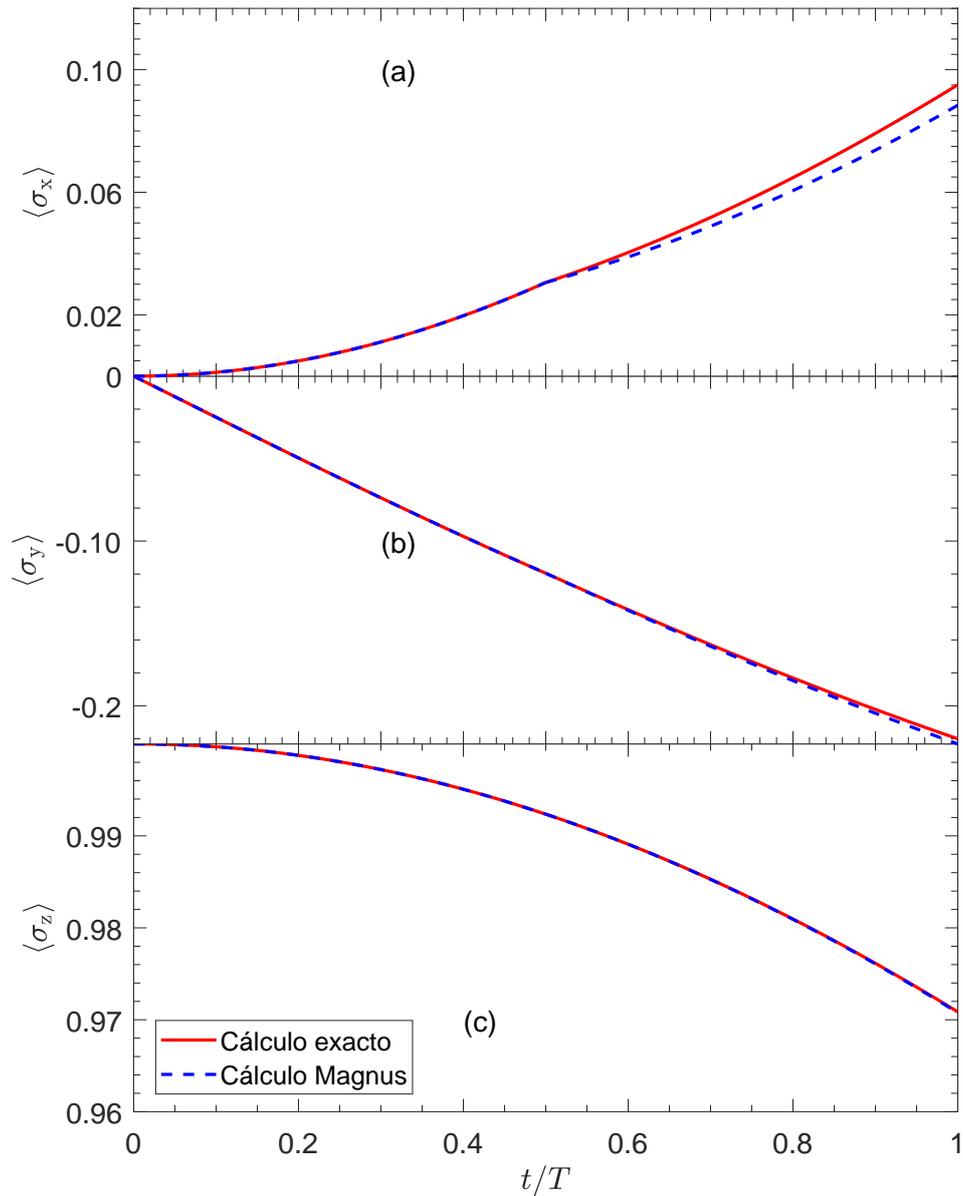


Figura 4.3: Valores esperados de los operadores de Pauli en el tiempo para el caso del problema a trozos. Los valores de los parámetros que se emplean en las simulación son  $A_1T = 1$ ,  $A_2T = 3/4$ ,  $\Delta T = 1/4$  y  $t_0/T = 1/2$ . Se representa con una línea continua roja el valor esperado de los operadores calculado de manera exacta teóricamente y con una línea discontinua azul los valores esperados calculados tras usar el método de Magnus. (a) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_x$ . (b) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_y$ . (c) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_z$

### 4.3. Transformación del problema.

Pasamos al último modelo de los que vamos a estudiar. En este vamos a utilizar otra técnica que se suele usar para encontrar la solución a ciertos problemas. Consiste en la transformación del problema inicial en otro equivalente, que en principio proporcione mejores resultados, de forma que resolviendo el problema derivado puedas encontrar fácilmente la solución al inicial. Vamos a considerar el siguiente hamiltoniano, muy similar al primer modelo

$$\hat{H}(t) = \frac{\hbar}{2} [\Delta \hat{\sigma}_x + A \cos(\omega t) \hat{\sigma}_z]. \quad (4.35)$$

En principio, para resolver el problema de forma aproximada podríamos calcular los términos del desarrollo de Floquet-Magnus para este caso, que ya vimos que proporciona mejores resultados en general que el desarrollo de Magnus para el caso de hamiltonianos periódicos, es decir, partiendo de

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{U}(t)}{dt} &= \hat{\Lambda}(t)\hat{U}(t) \quad \text{con} \\ \hat{\Lambda}(t) &= -\frac{i}{2} [\Delta \hat{\sigma}_x + A \cos(\omega t) \hat{\sigma}_z], \end{aligned}$$

obtener  $\hat{U}(t) = \hat{p}(t)e^{t\hat{F}}$  calculando los primeros términos de  $\hat{p}(t)$  y  $\hat{F}$  según (3.21), (3.23) y (3.19). Es lo primero que haremos en la siguiente sección.

#### 4.3.1. Términos Floquet-Magnus

Como primer paso, tenemos que calcular los términos del desarrollo de Magnus  $\hat{\Omega}_n(t)$  para posteriormente obtener  $\hat{F}_n$  usando (3.19). Pasamos a calcular  $\hat{\Omega}_1(t)$ . Usando (2.34), se tiene que

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}_1(t) &= \int_0^t dt_1 \hat{\Lambda}_1 = -\frac{i}{2} \left( \Delta \hat{\sigma}_x t + \frac{A}{\omega} \sin(\omega t) \hat{\sigma}_z \right) \rightarrow \\ \hat{\Omega}_1(T) &= \hat{\Omega} \left( \frac{2\pi}{\omega} \right) = -\frac{i}{2} \Delta \hat{\sigma}_x \frac{2\pi}{\omega}. \end{aligned}$$

Por lo que, el primer término de  $\hat{F}$ , es decir  $\hat{F}_1$ , será

$$\hat{F}_1 = \frac{\hat{\Omega}_1(T)}{T} = -\frac{i}{2} \Delta \hat{\sigma}_x. \quad (4.36)$$

Pasamos a calcular  $\hat{\Omega}_2(t)$ , que sigue la fórmula (2.37), y se obtiene lo siguiente

$$\begin{aligned}
 \hat{\Omega}_2(t) &= \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 [\hat{\Lambda}_1, \hat{\Lambda}_2] \\
 &= -\frac{1}{8} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \{A\Delta \cos(\omega t_2) [\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_z] + A\Delta \cos(\omega t_1) [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x]\} \\
 &= -\frac{1}{4} A\Delta i\hat{\sigma}_y \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 [\cos(\omega t_1) - \cos(\omega t_2)] \\
 &= -\frac{1}{4} A\Delta i\hat{\sigma}_y \frac{2 \cos(\omega t) - 2 + \omega t \sin(\omega t)}{\omega^2},
 \end{aligned}$$

por lo que el término  $\hat{F}_2$  queda como

$$\hat{F}_2 = \frac{\hat{\Omega}_2(T)}{T} = \hat{0} \quad (4.37)$$

Pasamos ahora a obtener los términos de  $\hat{\Sigma}(t)$  que aparece en la expresión de  $\hat{p}(t)$ , para ello vamos a empezar con  $\hat{\Sigma}_1(t)$ , que sigue la expresión (3.21). Resulta la siguiente expresión

$$\begin{aligned}
 \hat{\Sigma}_1(t) &= \int_0^t dt_1 \hat{\Lambda}_1 - t\hat{F}_1 \\
 &= -\frac{iA}{2\omega} \sin(\omega t) \hat{\sigma}_z + \frac{ti\Delta \hat{\sigma}_x}{2} - \frac{ti\Delta \hat{\sigma}_x}{2},
 \end{aligned}$$

de donde se llega a que

$$\hat{\Sigma}_1(t) = -\frac{iA}{2\omega} \sin(\omega t) \hat{\sigma}_z. \quad (4.38)$$

Prosigamos nuestro cálculo con la obtención de  $\hat{\Omega}_2(t)$ , que se rige mediante la fórmula ya vista (3.23), para ello primero evaluaremos el conmutador

$$[\hat{\Lambda}_1 + \hat{F}_1, \hat{\Sigma}_1(t_1)] = \left[ -i\Delta \hat{\sigma}_x - \frac{iA}{2} \cos(\omega t) \hat{\sigma}_z, -\frac{iA}{2\omega} \sin(\omega t) \hat{\sigma}_z \right] = \frac{A\Delta i}{\omega} \hat{\sigma}_y,$$

por lo que se obtiene que

$$\hat{\Sigma}_2(t) = \frac{itA\Delta}{2\omega} \hat{\sigma}_y. \quad (4.39)$$

De esta forma, obtenemos un operador evolución aproximado mediante el método de Floquet-Magnus en la forma.

$$\hat{U}_{\text{F-M}}(t) = e^{\hat{\Sigma}_1(t) + \hat{\Sigma}_2(t)} e^{t\hat{F}_1}. \quad (4.40)$$

Antes de mostrar los resultados para esta parte, debemos hacer notar que podríamos haber usado los cálculos del modelo I. Si nos fijamos en ambos hamiltonianos, estos coinciden salvo una traslación temporal. En concreto esta es de un cuarto de periodo,

es decir, de  $T/4$ . Partamos de la expresión del hamiltoniano de este modelo tercero y comparémosla tras realizar la traslación temporal con el hamiltoniano del primer modelo, que tenía la forma

$$\hat{H}(t)|_{\text{Modelo I}} = \hbar \frac{\Delta}{2} \hat{\sigma}_x + \hbar \frac{A}{2} \sin(\omega t) \hat{\sigma}_z.$$

Si realizamos la traslación temporal  $t \rightarrow t - \frac{T}{4}$ , que lleva a

$$\omega t \rightarrow \omega t - \frac{\pi}{2},$$

recuperaríamos el mismo hamiltoniano que el primer modelo. Esto se puede comprobar fácilmente usando la propiedad siguiente <sup>5</sup>

$$\cos(A \pm B) = \cos(A) \cos(B) \mp \sin(A) \sin(B). \quad (4.41)$$

Esta propiedad nos lleva a que

$$\cos\left(\omega t - \frac{\pi}{2}\right) = \sin(\omega t).$$

En este apartado se han calculado igualmente los desarrollos de nuevo para seguir un tratamiento sistemático de los problemas y que sean independientes.

Pasamos entonces con la simulación del problema, para ello, se han tomado los siguientes valores para los parámetros del sistema

$$A/\omega = \frac{1}{2\pi}, \quad \Delta/\omega = \frac{1}{8\pi},$$

junto con el mismo estado inicial que venimos usando

$$|y_0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

En un principio, con esta técnica tan potente como vimos en el primer ejemplo, deberíamos ser capaces de emular muy bien la resolución numérica del problema, veámoslo en la Fig. 4.4.

---

<sup>5</sup> Conocida comúnmente como ley del coseno de la suma o diferencia. Aparece por primera vez en un libro de Daniel Bernoulli en 1734, [17].

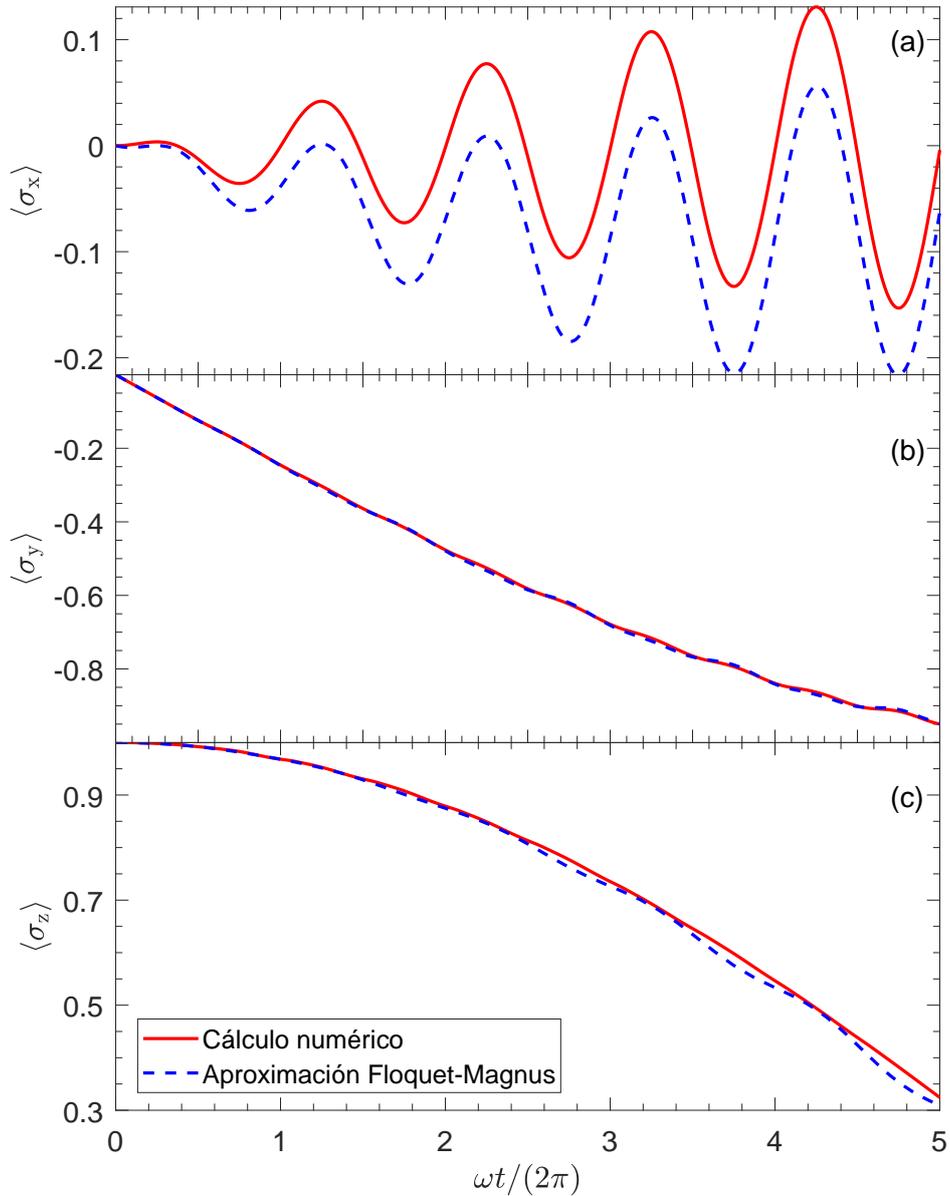


Figura 4.4: Valores esperados de los operadores de Pauli en el tiempo para para comparar el método de Floquet-Magnus con el resultado numérico. Los valores de los parámetros se han escogido como  $A/\omega = 1/(\pi)$  y  $\Delta/\omega = 1/(8\pi)$ . Se representa con una línea continua roja el valor esperado de los operadores calculado de manera numérica y con una línea discontinua azul los valores esperados calculados tras usar el método de Floquet. Se visualizan cinco periodos temporales. (a) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_x$ . (b) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_y$ . (c) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_z$

Como podemos comprobar, salvo en las oscilaciones que exhibe el valor esperado del operador  $\hat{\sigma}_x$  la aproximación de Floquet-Magnus con sólo dos términos funciona muy bien para este problema periódico. De nuevo reconocemos como representa una herramienta muy potente para resolver estos problemas de evolución ya que el cálculo que hemos realizado ha sido relativamente corto.

Sin embargo, si uno busca precisión no puede conformarse con estos resultados, sobre todo si nos fijamos en la gráfica (a) de la figura anterior. El calcular más términos del desarrollo para mejorar la aproximación es una tarea ardua y los resultados mejoran en gran cantidad una vez calcules muchos términos. En término de tiempo y cantidad de trabajo esta opción resulta menos ventajosa comparada con el método que veremos a continuación. Este problema se podría haber abordado desde un principio haciendo una transformación del hamiltoniano. Es una técnica que no es general, pero que dependiendo qué problemas conduce a mejores resultados que intentar abordar el problema inicial directamente. El procedimiento, paso por paso, se detalla en la siguiente sección. Por último, comprobaremos si esta transformación conduce a mejores resultados para este caso.

### 4.3.2. Transformación del problema.

En esta parte del trabajo vamos a proceder a modificar el problema inicial (4.35) de la siguiente forma. Vamos a considerar una función  $\hat{V}(t)$  que se define como sigue

$$\hat{V}(t) = \exp \left[ \frac{iA}{2\omega} \sin(\omega t) \hat{\sigma}_z \right] \hat{U}(t). \quad (4.42)$$

La ecuación que sigue este operador  $\hat{V}(t)$  será la siguiente

$$i\hbar \frac{d\hat{V}(t)}{dt} = i\hbar \left[ \frac{iA\omega \cos(\omega t) \hat{\sigma}_z}{2\omega} \hat{V}(t) \right] + \exp \left[ \frac{iA}{2\omega} \sin(\omega t) \hat{\sigma}_z \right] \hat{H}(t) \hat{U}(t),$$

donde hemos usado la expresión de la ecuación de Schrödinger para el operador evolución, Ec. (1.3). Si ahora introducimos la expresión del hamiltoniano (4.35) en la ecuación anterior, vemos como los términos proporcionales a  $\hat{\sigma}_z$  se anulan y sólo sobrevive el siguiente término

$$i\hbar \frac{d\hat{V}(t)}{dt} = \exp \left[ \frac{iA}{2\omega} \sin(\omega t) \hat{\sigma}_z \right] \frac{\Delta\hbar}{2} \hat{\sigma}_x \exp \left[ -\frac{iA}{2\omega} \sin(\omega t) \hat{\sigma}_z \right] \hat{V}(t). \quad (4.43)$$

Esta expresión tiene la forma de una ecuación de Schrödinger para el operador  $\hat{V}(t)$

donde el hamiltoniano a pasado a ser  $\hat{H}'(t)$ , es decir,

$$i\hbar \frac{d\hat{V}(t)}{dt} = \hat{H}'(t)\hat{V}(t) \quad \text{con} \quad (4.44)$$

$$\hat{H}'(t) = \exp \left[ \frac{iA}{2\omega} \sin(\omega t) \hat{\sigma}_z \right] \frac{\Delta\hbar}{2} \hat{\sigma}_x \exp \left[ -\frac{iA}{2\omega} \sin(\omega t) \hat{\sigma}_z \right]. \quad (4.45)$$

Si nos fijamos bien, la expresión (4.45) se corresponde con una rotación alrededor del eje  $z$  de ángulo  $\frac{A}{\omega} \sin(\omega t)$ , queda entonces el hamiltoniano  $\hat{H}'(t)$  con la forma

$$\hat{H}'(t) = \frac{\Delta\hbar}{2} \left\{ \cos \left[ \frac{A}{\omega} \sin(\omega t) \right] \hat{\sigma}_x - \sin \left[ \frac{A}{\omega} \sin(\omega t) \right] \hat{\sigma}_y \right\}. \quad (4.46)$$

Nuestra labor ahora será tratar el problema para  $\hat{V}(t)$  con los métodos que hemos estudiado. En principio lo podremos calcular con Magnus o con Floquet-Magnus y luego aplicar la definición de  $\hat{V}(t)$ , (4.42), invirtiéndola para volver al operador de partida  $\hat{U}(t)$ . De aquí en adelante consideraremos el operador

$$\hat{\Lambda}' = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}'(t) = -\frac{i\Delta}{2} \left\{ \cos \left[ \frac{A}{\omega} \sin(\omega t) \right] \hat{\sigma}_x - \sin \left[ \frac{A}{\omega} \sin(\omega t) \right] \hat{\sigma}_y \right\}, \quad (4.47)$$

como el operador que introduciremos en la expresiones de los términos de los desarrollos (bien de Magnus o de Floquet-Magnus).

Ya que hemos realizado para este modelo un desarrollo de Floquet-Magnus, aquí vamos a realizar un desarrollo de Magnus para comprobar cómo de bien ajusta los valores esperados. Se obtendrán los términos  $\hat{\Omega}_1(t)$  y  $\hat{\Omega}_2(t)$  usando (2.34) y (2.37). De esta forma se encontrará una expresión aproximada para  $\hat{V}(t)$ , que nombraremos como  $\hat{V}_{\text{Magnus}}(t) = e^{\hat{\Omega}_1(t) + \hat{\Omega}_2(t)}$ . Podremos obtener el operador de evolución aproximado,  $\hat{U}_{\text{Magnus}}(t)$ , para el problema que nos interesa y del cual tenemos una resolución numérica como

$$\hat{U}_{\text{Magnus}}(t) = \exp \left[ -\frac{iA}{2\omega} \sin(\omega t) \hat{\sigma}_z \right] \hat{V}_{\text{Magnus}}(t),$$

es decir, invirtiendo (4.42).

A continuación, en la Fig. 4.5 se representa el resultado de este cálculo, comparándolo con la resolución numérica y al desarrollo de Floquet-Magnus obtenido en el apartado anterior. Se puede observar cómo aún haciendo un desarrollo menos potente que el de Floquet-Magnus, realizando previamente una transformación al problema se obtienen mucho mejores resultados. Este efecto es claro en la gráfica (a) sobre todo, donde se representa el valor esperado de  $\hat{\sigma}_x$ , que era prácticamente donde se apreciaba más diferencia entre el método de Floquet-Magnus y la resolución numérica.

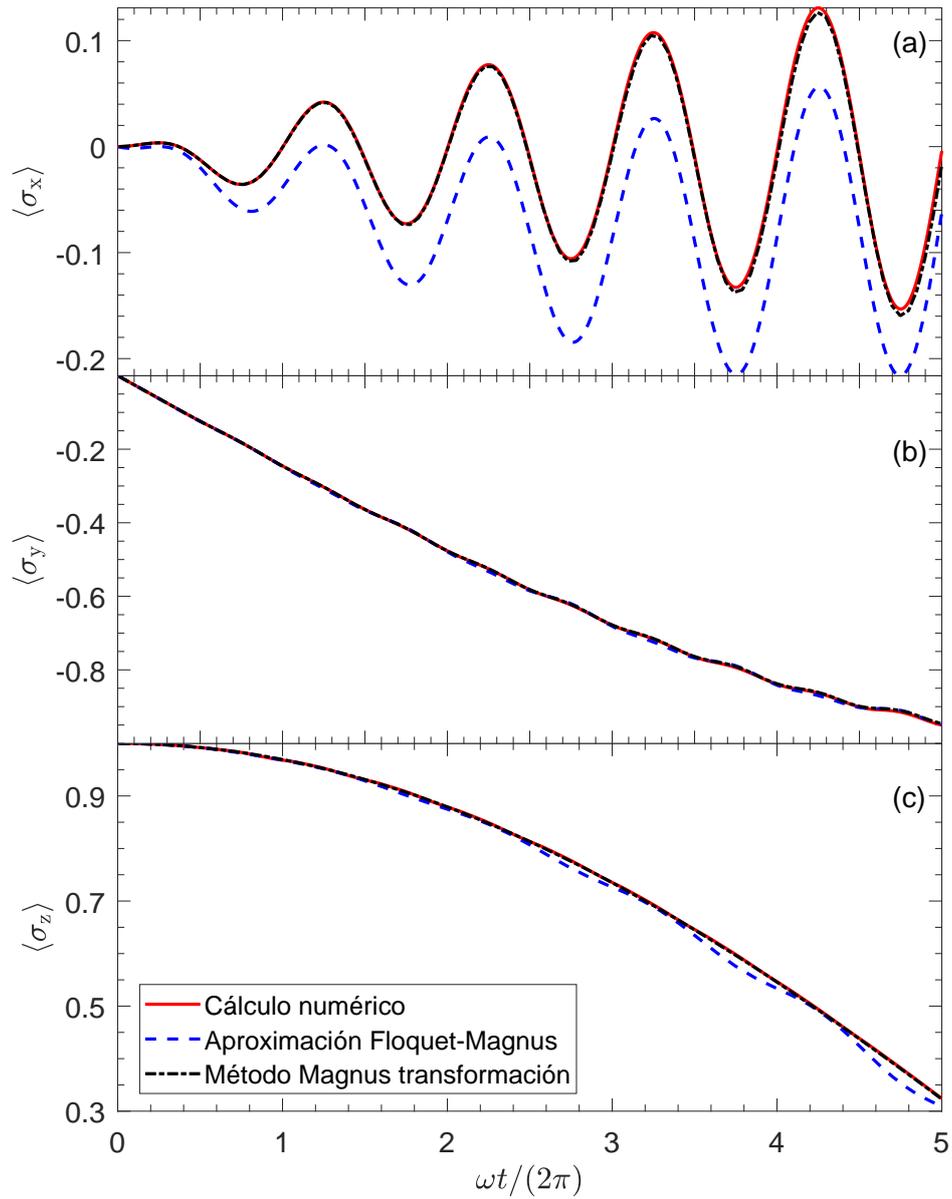


Figura 4.5: Valores esperados de los operadores de Pauli en el tiempo para para comparar el método modificar el problema inicial con la aplicación directa del método de Floquet-Magnus y el resultado numérico. Los valores de los parámetros son  $A/\omega = 1/(\pi)$  y  $\Delta/\omega = 1/(8\pi)$ . Se representa con una línea continua roja el valor esperado de los operadores calculado de manera numérica y con una línea discontinua azul los valores esperados calculados tras usar el método de Floquet-Magnus. Además, con una línea punteada negra se muestran los resultados obtenidos mediante la transformación del problema. Se visualizan cinco periodos temporales. (a) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_x$ . (b) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_y$ . (c) Valor esperado del operador de Pauli  $\hat{\sigma}_z$

## 5. Conclusiones

En conclusión, en este trabajo de fin de grado se ha abordado el estudio de las técnicas de los desarrollos perturbativos de Magnus y de Floquet-Magnus para la resolución de problemas de evolución en Mecánica Cuántica.

En primer lugar, se expuso el teorema de Magnus, que proporciona una vía para resolver de manera aproximada los problemas de cálculo del operador de evolución temporal de un sistema cuántico. Asimismo, se obtuvieron la fórmula cerrada de los términos en general, así como los primeros elementos del desarrollo.

Por otro lado, se introdujo parte de la teoría de Floquet que nos condujo hasta el desarrollo de Floquet-Magnus, que tiene gran utilidad para obtener la evolución de sistemas cuánticos sometidos a campos periódicos. Esta técnica simplifica y agiliza el cálculo de la evolución temporal en sistemas periódicos.

A lo largo de este trabajo, se han explorado aplicaciones de estas técnicas presentando ejemplos concretos que ilustran la utilidad y el potencial de estas herramientas en la resolución de problemas. En estos ejemplos, se han introducido puntualmente herramientas como la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff o un prototipo de problema en el que una transformación inicial conduce a mejores resultados.

Es importante mencionar que tanto el desarrollo de Magnus como el de Floquet-Magnus tienen limitaciones y áreas de mejora. La convergencia de los desarrollos puede ser problemática en casos de alta complejidad, y se requiere un análisis cuidadoso de la validez de las aproximaciones realizadas. Además, se abren oportunidades para explorar nuevas aplicaciones y extensiones de estas técnicas en diferentes contextos y sistemas físicos. Estas herramientas son valiosas en el arsenal del físico teórico y ofrecen perspectivas prometedoras para la comprensión y el análisis de sistemas cuánticos en diferentes situaciones. Se espera que este trabajo sirva como punto de partida para futuras investigaciones y avances en este fascinante campo de estudio.

## Apéndice I: Demostración de la ec.(2.14)

En esta sección vamos a demostrar que se verifica

$$\hat{f}(s) \equiv e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{-s\hat{A}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{s^k}{k!} \text{ad}_{\hat{A}}^k(\hat{B}).$$

Para ello vamos a hacer un desarrollo en serie del primer término alrededor de  $s = 0$  y, asumiendo que el desarrollo converge, se obtendría ese resultado. Partimos de la derivada del primer término respecto a  $s$ ,

$$\frac{d\hat{f}(s)}{ds} = e^{s\hat{A}}\hat{A}\hat{B}e^{-s\hat{A}} - e^{s\hat{A}}\hat{B}\hat{A}e^{-s\hat{A}} = e^{s\hat{A}}[\hat{A}, \hat{B}]e^{-s\hat{A}}.$$

Por lo que se tiene que

$$\left[ \frac{d\hat{f}(s)}{ds} \right]_{s=0} = [\hat{A}, \hat{B}] = \text{ad}_{\hat{A}}(\hat{B}).$$

Pasamos a demostrar que

$$\left[ \frac{d^n \hat{f}(s)}{ds^n} \right]_{s=0} = \text{ad}_{\hat{A}}^n(\hat{B}).$$

Lo haremos por inducción. Como hemos visto, para  $n = 1$  se cumple. Por lo tanto, asumimos por hipótesis que se cumple para  $n' = n$  y vemos si se cumple para  $n' = n + 1$ . Comenzamos derivando con respecto a  $s$  nuestra hipótesis de inducción, que es la siguiente

$$\frac{d^n \hat{f}(s)}{ds^n} = e^{s\hat{A}} \text{ad}_{\hat{A}}^n(\hat{B}) e^{-s\hat{A}}.$$

La derivada por tanto queda

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \left( \frac{d^n \hat{f}(s)}{ds^n} \right) &= e^{s\hat{A}} \hat{A} \text{ad}_{\hat{A}}^n(\hat{B}) e^{-s\hat{A}} - e^{s\hat{A}} \text{ad}_{\hat{A}}^n(\hat{B}) \hat{A} e^{-s\hat{A}} \\ &= e^{s\hat{A}} [\hat{A}, \text{ad}_{\hat{A}}^n(\hat{B})] e^{-s\hat{A}} = e^{s\hat{A}} \text{ad}_{\hat{A}}^{n+1}(\hat{B}) e^{-s\hat{A}}. \end{aligned}$$

Por lo que se demuestra lo que queríamos. Por último podemos realizar el desarrollo

$$\hat{f}(s) \equiv e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{-s\hat{A}} = \sum_{k=0}^{\infty} \left[ \frac{d^k \hat{f}(s)}{ds^k} \right]_{s=0} \frac{s^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{s^k}{k!} \text{ad}_{\hat{A}}^k(\hat{B}). \quad c.q.d$$

## Apéndice II: Deducción de los términos del desarrollo de Magnus

En este apéndice ahondaremos más en la obtención de los primeros términos del desarrollo. Los dos primeros son prácticamente triviales. Empezamos con el término  $\hat{\Omega}_0(t)$ , teníamos que

$$\frac{d\hat{\Omega}_0(t)}{dt} = \hat{\omega},$$

con la condición inicial que teníamos para  $\hat{\Omega}(t=0) = \hat{\omega}$  se debe cumplir que  $\hat{\Omega}_0 = \hat{\omega} \forall t$ .

Continuamos con el siguiente término,  $\hat{\Omega}_1(t)$ ,

$$\frac{d\hat{\Omega}_1(t)}{dt} = \hat{\Lambda}(t) \rightarrow \hat{\Omega}_1(t) - \hat{\Omega}_1(0) = \int_0^t dt_1 \hat{\Lambda}_1,$$

de nuevo tomando  $\hat{\Omega}_i(0) = \hat{\omega} \forall i$ , se llega a  $\hat{\Omega}_1(t) = \int_0^t dt_1 \hat{\Lambda}_1$ . Seguimos con el término  $\hat{\Omega}_2(t)$ ,

$$\frac{d\hat{\Omega}_2(t)}{dt} = -\frac{1}{2} [\hat{\Omega}_1, \hat{\Lambda}] \rightarrow \hat{\Omega}_2(t) = -\frac{1}{2} \int_0^t dt_1 [\hat{\Omega}_1(t_1), \hat{\Lambda}_1].$$

Insertando el valor de  $\hat{\Omega}_1$  que obtuvimos antes pero ahora evaluado en  $t_1$  queda

$$\hat{\Omega}_2(t) = -\frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \left[ \int_0^{t_1} dt_2 \hat{\Lambda}_2, \hat{\Lambda}_1 \right].$$

Como la integral es lineal y el conmutador también, se puede sacar la integral fuera del mismo, si le damos la vuelta al conmutador, este cambia de signo y se llega

$$\hat{\Omega}_2(t) = \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 [\hat{\Lambda}_1, \hat{\Lambda}_2].$$

Vamos ahora a ver la forma que tiene el tercer término

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\Omega}_3(t)}{dt} &= -\frac{1}{2} [\hat{\Omega}_2, \hat{\Lambda}] + \frac{1}{12} [\hat{\Omega}_1, [\hat{\Omega}_1, \hat{\Lambda}]], \\ \hat{\Omega}_3(t) &= \int_0^t dt_1 \left\{ -\frac{1}{2} [\hat{\Omega}_2, \hat{\Lambda}_1] + \frac{1}{12} [\hat{\Omega}_1, [\hat{\Omega}_1, \hat{\Lambda}_1]] \right\}. \end{aligned}$$

Introducimos ahora las formas que tienen  $\hat{\Omega}_1$  y  $\hat{\Omega}_2$  y se obtiene

$$\hat{\Omega}_3(t) = -\frac{1}{4} \int_0^t dt_1 \left[ \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left[ \hat{\Lambda}_2, \hat{\Lambda}_3 \right], \hat{\Lambda}_1 \right] + \frac{1}{12} \int_0^t dt_1 \left[ \int_0^{t_1} dt_2 \hat{\Lambda}_2, \left[ \int_0^{t_1} dt_3 \hat{\Lambda}_3, \hat{\Lambda}_1 \right] \right].$$

Evaluamos los términos (\*) y (\*\*) por separado. Empezamos por el término (\*). Usamos la linealidad de la integral y los conmutadores, también usamos que intercambiar los elementos del conmutador lo cambia de signo

$$(*) = \frac{1}{4} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left[ \hat{\Lambda}_1, \left[ \hat{\Lambda}_2, \hat{\Lambda}_3 \right] \right].$$

Pasamos con el término (\*\*), usamos primero la linealidad de la integral de nuevo y vamos a dividir la integral final en 2 integrales

$$\begin{aligned} (**) &= \frac{1}{12} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_1} dt_3 \left[ \hat{\Lambda}_2, \left[ \hat{\Lambda}_3, \hat{\Lambda}_1 \right] \right] \\ &= \frac{1}{12} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left[ \hat{\Lambda}_2, \left[ \hat{\Lambda}_3, \hat{\Lambda}_1 \right] \right] + \frac{1}{12} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_{t_2}^{t_1} dt_3 \left[ \hat{\Lambda}_2, \left[ \hat{\Lambda}_3, \hat{\Lambda}_1 \right] \right]. \end{aligned}$$

Ahora usamos la propiedad  $\int_0^\alpha dx \int_0^x dy f(x, y) = \int_0^\alpha dy \int_y^\alpha dx f(x, y)$ , que en nuestro caso se traducirá en

$$\int_0^{t_1} dt_2 \int_{t_2}^{t_1} dt_3 \left[ \hat{\Lambda}_2, \left[ \hat{\Lambda}_3, \hat{\Lambda}_1 \right] \right] = \int_0^{t_1} dt_3 \int_0^{t_3} dt_2 \left[ \hat{\Lambda}_2, \left[ \hat{\Lambda}_3, \hat{\Lambda}_1 \right] \right].$$

Por lo que, si ahora intercambiamos los índices 2 y 3 se llega a que (\*\*) tiene el valor

$$(**) = \frac{1}{12} \left\{ \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left[ \hat{\Lambda}_2, \left[ \hat{\Lambda}_3, \hat{\Lambda}_1 \right] \right] + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left[ \hat{\Lambda}_3, \left[ \hat{\Lambda}_2, \hat{\Lambda}_1 \right] \right] \right\}.$$

Ahora usaremos la identidad de Jacobi que nos dice que

$$\left[ \hat{A}, \left[ \hat{B}, \hat{C} \right] \right] + \left[ \hat{C}, \left[ \hat{A}, \hat{B} \right] \right] + \left[ \hat{B}, \left[ \hat{C}, \hat{A} \right] \right] = \hat{0}. \quad (5.1)$$

De esta forma se tiene que  $\left[ \hat{\Lambda}_2, \left[ \hat{\Lambda}_3, \hat{\Lambda}_1 \right] \right] = - \left[ \hat{\Lambda}_1, \left[ \hat{\Lambda}_2, \hat{\Lambda}_3 \right] \right] - \left[ \hat{\Lambda}_3, \left[ \hat{\Lambda}_1, \hat{\Lambda}_2 \right] \right]$ . Asimismo, ya sabemos que  $\left[ \hat{\Lambda}_3, \left[ \hat{\Lambda}_2, \hat{\Lambda}_1 \right] \right] = - \left[ \hat{\Lambda}_3, \left[ \hat{\Lambda}_1, \hat{\Lambda}_2 \right] \right]$ . Por tanto el término (\*\*) quedará de la forma

$$(**) = \frac{1}{12} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left\{ - \left[ \hat{\Lambda}_1, \left[ \hat{\Lambda}_2, \hat{\Lambda}_3 \right] \right] - 2 \left[ \hat{\Lambda}_3, \left[ \hat{\Lambda}_1, \hat{\Lambda}_2 \right] \right] \right\}.$$

Por último, sumando los términos (\*) y (\*\*) se obtiene  $\hat{\Omega}_3(t)$

$$\begin{aligned} (*) + (**) &\equiv \hat{\Omega}_3(t) = \frac{1}{6} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left\{ \left[ \hat{\Lambda}_1, \left[ \hat{\Lambda}_2, \hat{\Lambda}_3 \right] \right] - \left[ \hat{\Lambda}_3, \left[ \hat{\Lambda}_1, \hat{\Lambda}_2 \right] \right] \right\} \\ &= \frac{1}{6} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left\{ \left[ \hat{\Lambda}_1, \left[ \hat{\Lambda}_2, \hat{\Lambda}_3 \right] \right] + \left[ \left[ \hat{\Lambda}_1, \hat{\Lambda}_2 \right], \hat{\Lambda}_3 \right] \right\}. \end{aligned}$$

## Apéndice III: Cálculo del término general del desarrollo de Floquet-Magnus.

En el desarrollo de la ecuación diferencial que siguen los términos de los desarrollos de Floquet-Magnus  $\hat{\Sigma}_k(t)$  y  $\hat{F}_k$  llegamos a la ecuación (3.17), que nos indica lo siguiente

$$\hat{\Sigma}'(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^k \left[ \hat{\Lambda}(t) - \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^j(\hat{F}) \right].$$

En este apartado vamos a desarrollar el término que involucra a  $\hat{F}$ . Es por ello que empezamos expresándolo en la forma

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!j!} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^{k+j}(\hat{F}) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!j!} \delta_{l,k+j} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^l(\hat{F}),$$

donde hemos aprovechado para introducir una delta de Kronecker de  $l$  con  $k + j$  y así podríamos introducir un sumatorio en  $l$  desde 0 hasta  $\infty$ . Reordenando los sumatorios se puede escribir

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!j!} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^{k+j}(\hat{F}) = \sum_{l=0}^{\infty} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^l(\hat{F}) \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \delta_{l,k+j} \frac{B_k}{k!j!}.$$

Ahora bien este último doble sumatorio en  $k$  y  $j$  se puede reescribir como sigue

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \delta_{l,k+j} \frac{B_k}{k!j!} = \sum_{k=0}^l \frac{B_k}{k!(l-k)!},$$

por lo que se llega a que

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!j!} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^{k+j}(\hat{F}) = \sum_{l=0}^{\infty} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^l(\hat{F}) \sum_{k=0}^l \frac{B_k}{k!(l-k)!}.$$

Vamos ahora a trabajar con este último sumatorio en  $k$  para simplificarlo lo máximo posible. Para ello, usaremos las propiedades de los números de Bernoulli. En particular, usaremos la siguiente propiedad, que se puede extraer de [6],

$$B_m = \delta_{m,0} - \sum_{k=0}^{m-1} \frac{m!B_k}{k!(m-k+1)!}, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (5.2)$$

A continuación haremos el cambio de variables  $m + 1 = l$  para que la expresión se vaya aproximando a lo que buscamos. Lo combinaremos con la igualdad que sigue

$$\sum_{k=0}^{l-2} \frac{B_k}{k!(l-k)!} = \sum_{k=0}^l \frac{B_k}{k!(l-k)!} - \frac{B_l}{l!} - \frac{B_{l-1}}{(l-1)!}.$$

La propiedad (5.2) quedará, por tanto, de la forma siguiente

$$0 = \frac{\delta_{l-1,0}}{(l-1)!} - \sum_{k=0}^l \frac{B_k}{k!(l-k)!} + \frac{B_l}{l!}.$$

Por tanto, podemos introducir esta relación en la expresión inicial para el término que nos interesa de la ecuación para  $\hat{\Sigma}_k(t)$  y se obtiene la siguiente expresión

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!j!} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^{k+j}(\hat{F}) = \sum_{l=0}^{\infty} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^l(\hat{F}) \sum_{k=0}^l \frac{B_k}{k!(l-k)!} = \sum_{l=0}^{\infty} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^l(\hat{F}) \left[ \frac{\delta_{l-1,0}}{(l-1)!} + \frac{B_l}{l!} \right].$$

Por tanto la ecuación queda en la forma siguiente

$$\frac{d\hat{\Sigma}(t)}{dt} = \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \frac{B_k}{k!} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^k \left[ \hat{\Lambda}(t) - \hat{F} \right] + \delta_{k-1,0} \text{ad}_{\hat{\Sigma}(t)}^k(\hat{F}) \right\}. \quad (5.3)$$

---

# Bibliografía

- [1] P. A. M. Dirac, “A new notation for quantum mechanics,” *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 35, no. 3, p. 416–418, 1939.
- [2] M. Planck, “Über das elementarquantum der wirkung,” *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, vol. 2, no. 17, pp. 202–210, 1900.
- [3] E. Schrödinger, “Quantisierung als Eigenwertproblem,” *Annalen Phys.*, vol. 386, no. 18, pp. 109–139, 1926.
- [4] J. von Neumann, “Mathematische grundlagen der quantenmechanik,” *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse*, vol. 1, pp. 245–272, 1932.
- [5] W. Magnus, “On the exponential solution of differential equations for a linear operator,” *Commun. Pure Appl. Math.*, vol. 7, pp. 649–673, 1954.
- [6] J. Bernoulli, “Meditationes de summâ singularium proprietatum serierum infinitarum,” *Commentarii Academiae Scientiarum Imperialis Petropolitanae*, vol. 5, pp. 71–94, 1713.
- [7] L. Euler, “Meditationes circa singulare serierum genus,” *Novi Commentarii Academiae Scientiarum Imperialis Petropolitanae*, vol. 3, pp. 29–61, 1732.
- [8] L. Kronecker, “Zur theorie der ganzen algebraischen zahlen,” *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, vol. 92, pp. 1–123, 1881.
- [9] J. Floquet, “Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques,” *Annales de l'École Normale Supérieure*, vol. 12, pp. 47–88, 1883.
- [10] J.-L. Lagrange, *Cours d'Analyse de l'École Polytechnique*. Chez Courcier, 1797.

- [11] S. Banach, “Sur les opérations dans les ensembles abstraits et leur application aux équations intégrales,” *Fundamenta Mathematicae*, vol. 3, no. 1, pp. 133–181, 1922.
- [12] S. Blanes, F. Casas, J. Oteo, and J. Ros, “The Magnus expansion and some of its applications,” *Physics Reports*, vol. 470, no. 5, pp. 151–238, 2009.
- [13] W. Pauli, “Zur quantenmechanik des magnetischen elektrons,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 43, no. 9-10, pp. 601–623, 1927.
- [14] T. Levi-Civita, “Caratteristiche di un sistema completo di integrali abeliani,” *Rendiconti del Circolo Matematico di Palermo*, vol. 15, pp. 111–158, 1901.
- [15] A. Einstein, “Die grundlage der allgemeinen relativitätstheorie,” *Annalen der Physik*, vol. 354, no. 7, pp. 769–822, 1915.
- [16] H. Poincaré, “Sur les groupes continus,” *Acta Mathematica*, vol. 22, no. 1, pp. 185–190, 1899.
- [17] D. Bernoulli, “Opuscules mathématiques: ou, mémoires sur différens sujets de géométrie, de mécanique, d’optique, d’hydrodynamique, et de musique,” *Opusculs mathématiques: ou, Mémoires sur différens sujets de géométrie, de mécanique, d’optique, d’hydrodynamique, et de musique*, vol. 1, pp. 9–52, 1734.