



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MÉXICO

CENTRO DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA

*Dilucidación de la primera demostración del
Teorema Adiabático*

Tesis

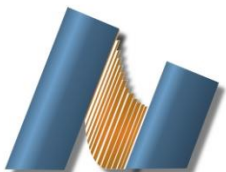
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
LICENCIADO EN NANOTECNOLOGÍA

P R E S E N T A:

Mauricio Missael Sánchez Díaz

TUTOR DE TESIS

Dr. Armando Reyes Serrato



Ensenada Baja California a Noviembre 2017



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

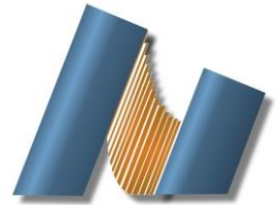
DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
CENTRO DE NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGÍA



LICENCIATURA EN NANOTECNOLOGÍA
Biotecnología

Dilucidación de la primera demostración del Teorema Adiabático

Tesis
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
LICENCIADO EN NANOTECNOLOGÍA

PRESENTA:
Mauricio Missael Sánchez Díaz

DIRECTOR DE TESIS
Dr. Armando Reyes Serrato

ENSENADA, BAJA CALIFORNIA Octubre 2017

Declaración

Hago constar que el trabajo que presento es de mi autoría y que todas las ideas, citas textuales, datos, ilustraciones, gráficas, etc. sacados de cualquier obra o debidas al trabajo de terceros, han sido debidamente identificados y citados en el cuerpo del texto y en la bibliografía y acepto que en caso de no respetar lo anterior puedo ser sujeto de sanciones universitarias.

Afirmo que el material presentado no se encuentra protegido por derechos de autor y me hago responsable de cualquier reclamo relacionado con la violación de derechos de autor.

Mauricio Missael Sánchez Díaz

Dedicatoria

A mi padre y madre, Gabriel y Claudia, por forjarme un gran carácter con sentido de la responsabilidad y sobretodo por tratarme como una persona inteligente que se refleja en este logro académico, además de su amor y apoyo incondicional.

A mis hermanas, Saida y Lezlie, por su cariño, confianza y por ser una de las grandes motivaciones de mi trabajo a lo largo de la carrera.

A Mariana, por su paciencia, comprensión y amor que me mostró durante este trabajo.

Dedico este trabajo a mis abuelos, tíos y primos, quienes mantenían un interés en mi formación y apoyo incondicional.

Agradecimientos

Quiero agradecer sinceramente al Dr. Armando Reyes por la oportunidad para realizar este trabajo, que me ha dejado muchas enseñanzas, pero sobre todo por su tiempo y dedicación a lo largo de cada etapa.

Agradezco profundamente al M. en E. Arturo Gamietea por sus charlas que cambiaron mi pensamiento sobre el aprendizaje y enseñanza a lo largo de todo el trabajo de tesis.

Expreso mi agradecimiento al Dr. Fernando Rojas por las observaciones, comentarios y consejos que lograron mejorar la calidad de mi trabajo de tesis.

Reconozco mi gratitud hacia Matematiké A. C. por apoyarme con el equipo de cómputo con el que pude realizar parte de la investigación y redacción de la tesis.

Agradezco a PepsiCo Foundation ExCEL Awards Program por el apoyo financiero durante los últimos tres años de licenciatura. Y sobre todo a la beca del proyecto PAPIIT IN112917 por su apoyo económico durante este trabajo de tesis.

Resumen

La aproximación adiabática es una herramienta que permite resolver problemas complejos en algunas áreas de las ciencias físicas. Esta aproximación se basa en la dependencia temporal de las perturbaciones que actúan sobre el sistema de interés, la aproximación adiabática establece que si la perturbación actúa de forma lenta (adiabática) el sistema permanecerá invariante, es decir, no habrá modificaciones en su estado.

En mecánica cuántica la aproximación se establece en forma de teorema y tiene distintas aplicaciones debido a su utilidad y sencillez, sin embargo, la demostración del teorema no es trivial. Actualmente existen distintas propuestas para la demostración, los primeros en demostrar el teorema fueron M. Born y V. Fock en el año de 1928 en un artículo publicado en la revista *Zeitschrift für Physik*, cuyo contenido considera elementos matemáticos avanzados con respecto a los vistos en la licenciatura del Centro de Nanociencias y Nanotecnología, además omiten muchos procedimientos por lo que con una simple lectura es complicado entender la demostración. Este trabajo hace explícito el procedimiento seguido por Born y Fock para demostrar el teorema adiabático para que cualquier alumno con conocimientos de matemáticas a nivel licenciatura logre seguir la lectura y comprenda matemáticamente cada etapa de la primera demostración y eso le facilite comprender el significado del teorema adiabático.

Índice general

DEDICATORIA	I
AGRADECIMIENTOS	II
RESUMEN	III
INTRODUCCIÓN	1
1. El teorema adiabático en Mecánica Cuántica	4
2. Descripción de la demostración del Teorema Adiabático por Born y Fock	11
2.1. Introducción	11
2.2. Reseña	12
2.3. Explicación de la primera demostración	14
3. Dilucidación de la demostración del teorema	22
3.1. Introducción	22
3.2. Dilucidación	22
CONCLUSIONES	56
Bibliografía	58

Introducción

El prefijo nano en el mundo de las nanociencias y nanotecnología significa una milmillonésima. Un nanómetro es $1/1000000000$ de un metro, la unidad de longitud. La nanociencia es el estudio de principios fundamentales de moléculas, estructuras y en general de toda la materia con una dimensión entre 1 y 100 nanómetros. La nanotecnología es la aplicación del estudio de las nanociencias para desarrollar tecnologías nuevas [1]. Para el estudio de la materia en nanoescala es importante abordarlo desde una perspectiva interdisciplinaria, es decir, comprender las propiedades físicas, químicas y biológicas del sistema de interés, también es prioritario considerar las implicaciones y consecuencias ambientales, humanas y económicas.

La nanoescala es única porque es el tamaño donde las propiedades de los materiales conocidos, cambian a otras propiedades interesantes en el ámbito atómico y molecular. Para comprender dicho comportamiento es necesario estudiar los materiales con la mecánica cuántica [1].

La mecánica cuántica tiene poco más de un siglo de haber surgido a partir de los intentos de los físicos para describir el comportamiento de la materia a escalas pequeñas y resolver así, los problemas a los que se enfrentaron con las leyes establecidas por la mecánica clásica, la teoría electrodinámica, la termodinámica, entre otras [2].

La mecánica cuántica es en sí misma una teoría compleja, rompe con la manera tradicional de interpretar la realidad o por lo menos como lo hacemos a través de nuestros sentidos. Para estudiar la física cuántica es necesario poseer una vasta cantidad de conocimientos de matemáticas, ya que éstas son el lenguaje que utiliza la física para estudiar e interpretar a la naturaleza. Además al intentar estudiar los microsistemas, física e intrínsecamente complejos,

es de esperarse que las matemáticas no sean elementales.

La misma manera que la mecánica clásica centra su problema fundamental en describir el movimiento de los sistemas clásicos a través de las ecuaciones de movimiento, es decir, cómo evolucionan los sistemas en el tiempo sometidos a determinadas fuerzas. De la misma manera, la mecánica cuántica enfrenta el mismo problema, cómo evolucionan los estados de un sistema cuántico, es decir, cómo es la transición de sus estados en un periodo bajo un determinado tipo de interacción o perturbación con su entorno, que provocará un cambio en el sistema [3].

La dinámica de los estados cuánticos es sumamente compleja de resolver y las soluciones exactas para estos problemas se vuelven prácticamente imposibles, de tal manera que se necesitan métodos de aproximación para resolverlos. Estas herramientas se basan en suposiciones físicas que con el uso adecuado del lenguaje matemático se fundamentan a través de una demostración [3].

Existen métodos distintos de aproximación para representar cómo cambian en el tiempo los estados del sistema dentro de la mecánica cuántica. En un sistema que es perturbado, es decir, modificado por una variable ajena al sistema, es difícil lograr describir cómo evoluciona en el tiempo. Además si la perturbación también cambia en el tiempo, el problema se hace aún más complejo. Entonces surge la pregunta ¿cómo se pueden resolver esta clase de sucesos cuánticos?

Una manera de resolver esta clase de problemas es utilizar la aproximación adiabática. La aproximación adiabática permite dar solución a los problemas siempre y cuando se satisfaga que la perturbación que actúa sobre el sistema sea sumamente lenta, de tal forma que el sistema tenga tiempo para acoplarse a las modificaciones. Es posible argumentar entonces que si antes de que la perturbación actúe sobre el sistema éste se encuentre en un estado inicial determinado, después de la perturbación el sistema continuará en el mismo estado, es decir, el estado final es aproximadamente igual al estado inicial, a pesar de la perturbación a la que fue sometido. Esta aproximación ha sido de interés tanto para físicos como para matemáticos por mucho tiempo y continúa siéndolo [4].

En 1928 Born y Fock fueron los primeros en proponer una demostración del teorema adiabático que justificó la aproximación adiabática, recientemente la atención se ha renovado, como consecuencia de las novedosas investigaciones acerca de las propiedades topológicas de la materia y del surgimiento de la computación cuántica.

Como estudiante egresado de la Licenciatura en Nanotecnología de la Universidad Nacional Autónoma de México, el alumno cuenta con el conocimiento suficiente para comprender un tema relacionado a ciencias básicas o ingeniería debido a la formación multidisciplinaria e interdisciplinaria que recibe. La licenciatura brinda una enseñanza básica en las ciencias químico biológicas, en las físico matemáticas y en las ingenierías debido al ambicioso reto de lograr un panorama amplio de conocimientos, de tal forma que el comprender cada tema abordado en la universidad es sencillo profundizar en él.

El lenguaje matemático de la mecánica cuántica es complejo y basto, requiere de conocimientos sólidos de diversos campos de las matemáticas. La primera demostración del teorema adiabático representa un ejemplo del nivel de matemáticas que el estudiante requiere para comprender la mecánica cuántica, ya que continuar con la lectura de los autores es un reto aunque se conozcan ciertos elementos de matemáticas.

Este trabajo tiene como objetivo desarrollar y brindar claridad a la deducción matemática desarrollada por Born y Fock en la primera demostración del teorema adiabático, a través de un análisis e investigación de las herramientas matemáticas que utilizaron.

El contenido de la tesis se organiza como sigue: en el capítulo 1 los antecedentes del teorema adiabático. En el capítulo 2 se presenta una explicación sobre la demostración de Born y Fock, además de una reseña del autor, mientras que en el capítulo 3 se desarrolla de forma detallada el artículo original de Born y Fock con esclarecimientos en los pasos matemáticos que los autores omiten en su demostración. Por último, se expone las conclusiones del trabajo desarrollado.

Capítulo 1

El teorema adiabático en Mecánica Cuántica

La aproximación adiabática fue propuesta en la mecánica cuántica antigua por Paul Ehrenfest en 1911. La interpretación del teorema consistía en que las variables de acción cuantizada $J = nh$ no se modifican por la influencia de cambios adiabáticos en el sistema, es decir, por cambios “infinitamente” lentos. Es razonable suponer que, si un sistema se encuentra en un estado definido por determinado número cuántico antes de iniciar el cambio adiabático, el sistema continuará caracterizado por el mismo número cuántico después del cambio [5].

La transición de la aproximación adiabática de la antigua mecánica cuántica a la moderna fue elaborada por Max Born en 1926, con un significado análogo. Años más tarde en colaboración con Vladimir Fock, demostraron por vez primera el teorema adiabático que justifica la aproximación adiabática [5]. El teorema establece: “Un sistema físico permanece en su eigenestado instantáneo si una perturbación dada que actúa sobre él es suficientemente lenta y si hay una brecha entre el eigenvalor y el resto del espectro del Hamiltoniano”

Si enumeramos los estados de un sistema con números correspondientes a cada nivel de energía, el teorema adiabático sostiene que si el sistema estaba inicialmente en un estado con número definido, entonces después del cambio

adiabático la probabilidad de transición del sistema a otro estado con un número cuántico diferente es infinitamente pequeña, es decir, no ocurre una transición de estado [5].

Un ejemplo que permite entender la aproximación adiabática desde una perspectiva clásica consiste en considerar un péndulo soportado sobre un eje vertical, de modo que la masa del péndulo oscila en un tiempo T_m debido a la fuerza de gravedad y suponemos que no hay otras fuerzas de fricción o resistencia. Es posible perturbar el soporte de dos formas diferentes: la primera consiste en mover el soporte de forma “súbita”, lo que causa un movimiento caótico en el péndulo, esto provoca un cambio en el periodo de oscilación T_m del mismo. La segunda opción consiste en mover el soporte de forma “lenta” (adiabáticamente) de tal forma que el péndulo sea capaz de ajustar su movimiento de oscilación sin alteraciones a pesar de la perturbación. Se destaca que en este ejemplo hay dos tiempos, un tiempo “interno” y un tiempo “externo”. El tiempo interno (T_m) representa el tiempo relacionado con el movimiento interno del sistema, en este caso el tiempo de oscilación del péndulo, mientras que el tiempo externo (T_0) representa el tiempo asociado con cualquier movimiento del soporte que sea apreciable en la escala de su amplitud de oscilación. En un proceso adiabático se cumple que $T_0 \gg T_m$ [6].

El ejemplo anterior es visto desde una perspectiva clásica, sin embargo para los objetivos de este trabajo, se busca un enfoque desde la mecánica cuántica. Se tomará el ejemplo de una partícula encerrada en un pozo de paredes infinitas, donde la función de onda tiene la mitad de longitud de onda de De Broglie ($\lambda/2$) en el estado base [6]. Como en el ejemplo del péndulo, es posible modificar el sistema de forma lenta o rápida, en este caso la modificación se hará al desplazar una de las paredes del pozo. Si el deslizamiento de la pared ocurre rápidamente, entonces la función de onda es diferente a la del pozo original, ya que ésta es una combinación de media longitud de onda y una parte completamente plana.

Ahora, ¿qué sucede si deslizamos la pared de forma adiabática?, en este caso se espera que la función de onda tenga el tiempo suficiente para acoplarse al tamaño del pozo, de tal manera que la función de onda tendrá la misma

forma que la del pozo original en el estado base. Este problema fue elaborado en 1969 por Doscher [7], en el que una pared es expandida a una velocidad constante (v). Este caso presenta una solución exacta. El conjunto completo de funciones de estado es:

$$\Phi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{w}} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{w} x \right) e^{i(mvx^2 - 2E_n^i at)/2\hbar w} \quad (1.1)$$

donde $w(t) = a + vt$ es el ancho del pozo y $E_n^i = n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2$ es el *enésimo* nivel de energía permitido del pozo original (ancho a). La solución general es una combinación lineal de Φ 's:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Phi_n(x, t); \quad (1.2)$$

Los coeficientes c_n son independientes de t .

Al suponer que la partícula comienza en $t = 0$ en el estado base de del pozo, entonces

$$\Phi(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left(\frac{\pi}{a} x \right)$$

Por la ecuación (1.2)

$$\Psi(x, 0) = \sum c_n \Phi_n(x, 0) = \sum c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{a} x \right) e^{imvx^2/2\hbar a}$$

El objetivo es obtener una función de onda general y se comenzará por determinar las constantes c_n . Para ello se multiplica por

$$\Phi_n^*(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left(\frac{n'\pi}{a} x \right) e^{-imvx^2/2\hbar a}$$

y se integra

$$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \Psi(x, 0) \operatorname{sen} \left(\frac{n'\pi}{a} x \right) e^{-imvx^2/2\hbar a} dx = \\ & = \sum c_n \left[\frac{2}{a} \int_0^a \operatorname{sen} \left(\frac{n'\pi}{a} x \right) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{a} x \right) dx \right] \end{aligned}$$

$$= \sum c_n \delta_{nn'} = c'_n$$

por la ortonormalización de las funciones base.

De aquí se deduce que para el caso general

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a e^{-imvx^2/2\hbar a} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \Psi(x, 0) dx$$

Con la condición inicial, se tiene que

$$c_n = \frac{2}{a} \int_0^a e^{-imvx^2/2\hbar a} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx$$

Ahora se definen las siguientes variables: $z = \frac{\pi}{a}x$; $dz = \frac{a}{\pi}dx$, entonces se cumple que

$$\frac{mvx^2}{2\hbar a} = \frac{mvz^2}{2\hbar a} \frac{a^2}{\pi^2} = \frac{mva}{2\pi^2\hbar} z^2 = \alpha z^2$$

Entonces

$$c_n = \frac{2}{a} \int_0^\pi e^{-i\alpha z^2} \operatorname{sen}(nz) \operatorname{sen}(z) dz$$

Esta integral no puede ser evaluada en términos de funciones elementales, sin embargo al utilizar la aproximación adiabática es posible obtener un resultado. Al suponer que al pozo se le permite aumentar al doble su ancho, entonces el tiempo “externo“ está determinado por $w(T_e) = 2a$, que se establece en función de la velocidad como:

$$w(T_e) = 2a \Rightarrow a + vT_e = 2a \Rightarrow T_e = \frac{a}{v}$$

El tiempo “interno“ es el periodo del factor exponencial dependiente del tiempo en el estado inicial. Es decir:

$$e^{-iE_1 t/\hbar} \Rightarrow w = \frac{E_1}{\hbar} \Rightarrow T_i = \frac{2\pi}{w} = 2\pi \frac{\hbar}{E_1}$$

$$T_i = \frac{2\pi\hbar}{2\pi^2\hbar} 2ma^2 = \frac{4}{\pi} \frac{ma^2}{\hbar}$$

Entonces, la aproximación adiabática requiere que $T_e \gg T_i$, esto es

$$\frac{a}{v} \gg \frac{4ma^2}{\pi\hbar} \Rightarrow 1 \gg \frac{4ma}{\pi\hbar}$$

o con la variable α :

$$8\pi \left(\frac{mav}{2\pi^2\hbar} \right) = 8\pi\alpha \ll 1$$

entonces $\alpha \ll 1$; esta condición es establecida adiabáticamente e implica que

$$e^{i\alpha z^2} \approx 1$$

sobre el dominio en el cual se llevará a cabo la interacción para obtener los coeficientes c_n del desarrollo, esto es

$$c_n = \frac{2}{a} \int_0^\pi e^{-i\alpha z^2} \text{sen}(nz) \text{sen}(z) dz$$

$$c_n = \frac{2}{a} \int_0^\pi \text{sen}(nz) \text{sen}(z) dz = \delta_{n1}$$

Por la condición de ortonormalización de las funciones base. Con esto es posible escribir la expresión para la función de onda general

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{w}} \text{sen}\left(\frac{\pi}{w}x\right) e^{i(mvx^2 - 2E_1^i at)/2\hbar w}$$

la cual, sin considerar el factor de fase, es el estado base del pozo instantáneo, de ancho w , como lo establece el teorema adiabático. Ahora se demostrará que la función de onda $\Phi(x, t)$ puede ser escrita con

$$\theta(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_1(t') dt'$$

donde $E_n(t) = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mw^2}$ es el eigenvalor instantáneo en el tiempo t . Entonces

$$\theta(t) = -\frac{1}{\hbar} \left(\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m} \right) \int_0^t \frac{1}{(a + vt')^2} dt' = -\frac{\pi^2\hbar}{2m} \left[-\frac{1}{v} \frac{1}{a + vt'} \right]_0^t$$

$$= -\frac{\pi^2 \hbar}{2mv} \left(\frac{1}{a} - \frac{1}{w} \right) = -\frac{\pi^2 \hbar}{2mv} \left(\frac{vt}{aw} \right) = -\frac{\pi^2 \hbar t}{2maw}$$

Así, despreciado el término $\frac{mvx^2}{2\hbar w}$ en

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{w}} \operatorname{sen} \left(\frac{\pi}{w} x \right) e^{i(mvx^2 - 2E_1^i at)/2\hbar w}$$

debido a que si $x = a$, el primer término del exponente puede considerarse despreciable en virtud de que:

$$\frac{mva^2}{2\hbar a} = \frac{mva}{2\hbar} \Leftrightarrow \frac{mva}{2\hbar} \ll 1$$

Entonces

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{w}} \operatorname{sen} \left(\frac{\pi}{w} x \right) e^{iE_1^i at/\hbar w}$$

puede escribirse como

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{w}} \operatorname{sen} \left(\frac{\pi}{w} x \right) e^{i\theta}$$

debido a que

$$-\frac{E_1^i at}{\hbar w} = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2 \hbar w} at = -\frac{\pi^2 \hbar t}{2maw} = \theta$$

Este resultado es exactamente lo que se espera. Para un pozo con paredes fijas de ancho a se tendría:

$$\Psi(x, t) = \psi_n(x) e^{iE_1 t/\hbar}$$

mientras que para un pozo cuyas paredes se deslizan adiabáticamente, basta con reemplazar el ancho a con la variable w y al integrar se obtiene el factor de fase acumulado; así se destaca que E_1 es dependiente del tiempo.

Con este ejemplo se mostró la ventaja de la aplicación de la aproximación adiabática; es por ello que el teorema adiabático es una herramienta ampliamente utilizada en la mecánica cuántica. El papel del teorema adiabático en el estudio de sistemas mecánico cuánticos que varían lentamente, abarca una amplia gama de campos y aplicaciones, como la teoría Landau-Zener de los

niveles de energía en moléculas [8].

Otro ejemplo de la aplicación es en la teoría del efecto Hall cuántico, descubierto por Von Klitzing, *et. al*, en el que se ha reconocido que el teorema adiabático contribuye al entendimiento del fenómeno [4].

Recientemente se habla de modelos de computación cuántica adiabática. Con estos modelos se diseñan algoritmos cuánticos. Este concepto fue propuesto por Farhi, *et. al* en el año 2000 y a la fecha se busca enfocar este modelo para descubrir sustancialmente algoritmos cuánticos nuevos. El modelo fue propuesto con base en el teorema adiabático en mecánica cuántica [9]. Principalmente tenemos la aplicación en la teoría cuántica de los campos y la fase de Berry. En los últimos años, se han propuesto fases geométricas para el procesamiento de información cuántica, sobre un proceso adiabático en una serie de esquemas de computación cuántica geométrica [8].

El teorema adiabático es simple de establecer y suena apropiado, sin embargo, no es sencillo de demostrar. Algunas propuestas ha sido elaboradas por Kato en 1958 en su artículo *On the adiabatic Theorem in Quantum Mechanics* [10] y por Messiah en 1962 en su libro *Quantum Mechanics* [11]; éstas son algunas demostraciones que se han propuesto para el teorema adiabático, cada una con sus limitaciones y características, sin embargo no son las únicas, ya que actualmente existen diversos artículos que demuestran el teorema adiabático y lo utilizan con distintos enfoques y aplicaciones. En los siguientes capítulos se hablará de la demostración propuesta por Born y Fock en 1928.

Capítulo 2

Descripción de la demostración del Teorema Adiabático por Born y Fock

2.1. Introducción

El estudiante egresado de la licenciatura en Nanotecnología por la UNAM está provisto por un cúmulo de conocimientos en distintas disciplinas, con ello es posible lograr comprender textos complicados en distintas áreas, como el artículo de interés en este trabajo. El lector encontrará temas de matemáticas que se han abordado en algunos cursos de la licenciatura, tales como álgebra lineal, variable compleja, ecuaciones diferenciales, series, cálculo, entre otros. Además de una interpretación física que puede consultarse en los libros de mecánica cuántica o en un curso formal de la materia.

Lo primero que se debe comprender es que el teorema adiabático es en sí mismo un teorema matemático, los autores redactan el artículo de tal forma que el enunciado del teorema es propuesto en las últimas partes del texto, mientras que en las primeras páginas preparan las herramientas matemáticas y físicas para la demostración.

Para evitar confusiones, el siguiente capítulo tendrá una reseña del autor y una explicación breve de la demostración, así cuando el lector lea el capítulo

3 logre seguir el desarrollo matemático sin problemas de interpretación o secuencia. La interpretación se tomó de la versión en inglés del libro [5], mientras que las ecuaciones se siguieron de la versión original [12].

2.2. Reseña

He aquí las experiencias en la escritura de mi tesis de licenciatura, para compartir con mis compañeros a lo que me enfrente y les sirva de apoyo, cuando se enfrenten problemas semejantes.

Como estudiantes de licenciatura en Nanotecnología adquirimos conocimientos generales de ciencias básicas e ingenierías; con estos conocimientos podemos profundizar en diversos temas e interactuar de forma interdisciplinaria y multidisciplinaria. En la licenciatura tomé cursos del eje de biotecnología relacionados con bioquímica, biología molecular y celular, sin embargo, tengo un gusto por las ciencias en general y recientemente una pasión por la física, por este motivo decidí elaborar mi tesis en el área de física teórica.

Empecé por definir y aclarar el objetivo: “comprender y hacer explicable la primera demostración del teorema adiabático en mecánica cuántica”. Sin embargo, llegar al objetivo se transformó en un reto, de las lecturas iniciales del artículo base, ¡no comprendí nada!

La primera dificultad estuvo relacionada con mecánica cuántica, ya que nunca la había estudiado, tenía idea de lo que trataba por cursos de física básica y de física moderna, en donde aprendí algunas ideas de la mecánica cuántica, sin embargo, no era suficiente para comprender las ideas del artículo de Born y Fock.

Después de lecturas repetidas, comencé a identificar temas de algunos cursos de la licenciatura, tales como álgebra lineal y ecuaciones diferenciales. Comencé a estudiar mecánica cuántica, para comprender lo que necesitaba para lograr mi objetivo.

La notación en el artículo es distinta a la que encontraba en los textos de mecánica cuántica actuales, esto me pareció muy confuso, no encontraba la relación entre los textos universitarios y la demostración que tenía que aclarar, no sabía dónde buscar información para comprender el artículo. Leí

diversos textos, páginas web, artículos y consulté a algunos profesores, hasta que poco a poco fui identificando algunos conceptos matemáticos y físicos involucrados, además comencé a proponer el procedimiento matemático entre cada línea del texto original, para llenar los huecos en la demostración con lo que inicié el objetivo planteado.

También fue difícil entender el trabajo porque no comprendía cómo se les habían ocurrido tantas cosas para llegar a la demostración, generalmente en las clases nos enuncian los teoremas y nos dan las demostraciones. Finalmente descubrí que escribieron la demostración, no como la obtuvieron, sino de una manera “elegante”: primero la información que necesitaban, incluso formulan un lema y con éste la demostración aparece inmediata.

Este trabajo cambió mi idea de la enseñanza y del aprendizaje. Ya que cuando estudié álgebra lineal, la tomé como una materia de matemáticas que debía estudiar y no como una herramienta de trabajo que emplearía posteriormente ¡Qué pésima idea! Aunque di un esfuerzo máximo en esta materia, debí haber investigado el espacio de funciones, muy útil en cuántica y sobre todo tener una actitud más positiva hacia lo que me daban en la escuela.

Estudiar los espacios vectoriales me ayudó en entender los espacios de funciones, sin embargo algunos conceptos como la función de peso involucrada en el producto interno de este espacio me tomó varios días para comprenderlo.

Como investigador joven el camino puede ser duro y con muchos obstáculos, debido a que desconocemos muchas etapas del proceso de investigación, no sabemos discriminar entre las herramientas que necesitamos y en ocasiones ni siquiera en qué camino estamos parados. Pero como cualquier actividad es necesaria la experiencia, el aprendizaje y los errores. Aunque hay algo importante de este proceso: DISFRUTAR del aprendizaje a lo largo del camino de la investigación, DISFRUTAR de cada etapa del proceso porque cuando se logra un objetivo o reto, la sensación de satisfacción personal es invaluable.

2.3. Explicación de la primera demostración

Como ya se mencionó la aproximación adiabática en mecánica cuántica fue enunciada por primera vez en forma del siguiente teorema:

Teorema. *Si la matriz Q está absolutamente acotada y todas las condiciones para s finito y para T infinitamente grande son válidos, la diferencia $c_{mn} - \delta_{mn}$ es del orden de $T^{-\frac{1}{r+1}}$:*

$$c_{mn} = \delta_{mn} + O(T^{-\frac{1}{r+1}}) \quad (2.1)$$

El teorema es matemáticamente sencillo de comprender, es decir, solo dice que la diferencia de dos valores es del orden de $T^{-\frac{1}{r+1}}$, sin embargo, la pregunta siguiente es ¿qué significado físico representa este teorema y qué relación tiene con la aproximación adiabática?

La cantidad $c_{mn}(s)$ es la amplitud de probabilidad del estado $W_m(s)$ en el tiempo t , mientras que $\delta(0)$ es la amplitud de probabilidad del estado $W_m(0)$ en el tiempo $t = 0$, es decir, la diferencia entre ambas amplitudes tiende a cero cuando T crece infinitamente, lo que significa que el sistema permanece en el mismo estado después de la evolución adiabática.

Hasta ahora se ha visto el teorema matemático y un poco de su interpretación física, lo que sigue es comprender el desarrollo matemático elaborado por Born y Fock para llevar a cabo su demostración, por lo que se abordará la secuencia que ellos utilizaron hasta llegar al teorema que ya se ha definido.

El primer paso es describir el operador Hamiltoniano del sistema, este operador tiene una dependencia temporal, definida por una parametrización con la variable s y con el parámetro T . Entonces el Hamiltoniano es

$$H = H(s); \quad s = \frac{t}{T}, \quad (2.2)$$

Aquí es posible identificar que si T incrementa, la variable s disminuye, es decir, el tiempo propio del sistema disminuye. Una vez determinado el Hamiltoniano, el cual describe el sistema, es posible determinar las eigenfunciones de este operador con la ecuación de eigenvalores. El lector puede

recordar de los cursos de álgebra lineal que esta ecuación tiene la siguiente estructura:

$$H(s)\varphi_n(q, s) = W_n(s)\varphi_n(q, s) \quad (2.3)$$

Entonces queda determinada la base $\{\varphi_n(q, s)\}$ como el conjunto de eigenfunciones que satisfacen esta ecuación para cada tiempo s .

Además se establece un conjunto de funciones $\{\psi_n(q, t)\}$ que satisfacen la ecuación de Schrödiger dependiente del tiempo.

$$H\psi_n + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = 0 \quad (2.4)$$

Estas funciones están normalizadas y son ortogonales para cada valor de t .

Por otra parte, se establece que ambos conjuntos son iguales en el tiempo $t = 0$: $\{\varphi_n(q, 0)\} = \{\psi_n(q, 0)\}$.

Con lo anterior se han definido tres distintas bases:

$$\psi_n(q, 0) = \varphi_n(q, 0), \quad (2.5)$$

$$\varphi_n(q, s), \quad (2.6)$$

$$\psi_n(q, t). \quad (2.7)$$

Ahora que se ha definido estas bases, es posible representar al operador Hamiltoniano de forma matricial con cada una de las bases anteriores. Por lo tanto, los elementos de matriz del operador H se definen para cada base como:

$$H_{mn}^0 = \int \varphi_m^*(q, 0)H(0)\varphi_n(q, 0)\varrho dq \quad (2.8)$$

$$W_n\delta_{nm} = H_{mn}^s = \int \varphi_m^*(q, s)H(s)\varphi_n(q, s)\varrho dq \quad (2.9)$$

$$H_{mn} = \int \psi_m^*(q, t)H(s)\psi_n(q, t)\varrho dq \quad (2.10)$$

La posibilidad de pasar de una base a otra para representar los estados y los operadores es la idea central de la teoría de representaciones en mecánica

cuántica [2]. Este tipo de cambios, o mejor dicho, transformaciones unitarias, se efectúan con matrices unitarias, esta teoría puede estudiarse en los libros de álgebra lineal o en las matemáticas preliminares de libros de cuántica.

Para el cambio de base entre los conjuntos que ya se han definido se utilizarán las siguientes transformaciones unitarias:

$$H = U^\dagger H^0 U, \quad (2.11)$$

$$W = V^\dagger H^0 V, \quad (2.12)$$

$$H = Y^\dagger W Y. \quad (2.13)$$

Es importante mencionar que la matriz Y se define como la multiplicación de las matrices unitarias U y V :

$$Y = V^\dagger U. \quad (2.14)$$

El módulo cuadrado $|Y_{mn}|^2$ presenta un significado físico importante relacionado con la aproximación adiabática. Este representa la probabilidad de que el sistema, que inicia en $t = 0$ en el estado n (con un nivel de energía $W_n(0)$), se encuentre en el estado m en el tiempo t (con un nivel de energía $W_m(t/T)$). La aproximación adiabática establece que para un cambio “infinitamente” lento del sistema, es decir, para un valor “infinitamente” grande en el parámetro T la probabilidad de transición $|Y_{mn}|^2$ para $m \neq n$ (la cual es función del tiempo) permanece “infinitamente” pequeña incluso para valores finitos de $s = \frac{t}{T}$.

La demostración consiste en determinar la ecuación diferencial para la matriz Y y encontrar la solución a esta ecuación para verificar que el módulo cuadrado $|Y_{mn}|^2$ realmente se un valor “infinitamente” pequeño.

Para determinar la ecuación diferencial de Y se inicia a partir de la relación entre Y y U .

$$Y = V^\dagger U.$$

Se comienza por determinar la ecuación diferencial para la matriz unitaria U . Esta matriz es un operador de evolución, por lo que al aplicarla a los estados

del sistema en t_0 , el resultado será el estado en el tiempo t .

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

El caso anterior es visto desde la representación de Schrödinger, en el que los estados son modificados por estos operadores, sin embargo, los autores utilizan la representación de Heisenberg, en la que el operador de evolución actúa sobre los operadores dejando las bases sin modificaciones.

Para determinar la ecuación diferencial de U se utilizan las ecuaciones de movimiento de Heisenberg de las variables dinámicas de posición y momento, (q, p) , además de la propiedad en que las transformaciones unitarias dejan invariantes a las ecuaciones de movimiento [2]. Entonces se relacionan las ecuaciones de movimiento en el tiempo inicial ($t = 0$) y las ecuaciones de movimiento en el tiempo t , a través de la transformación unitaria:

$$H = U^\dagger H^0 U.$$

De esta forma se encuentra que la ecuación diferencial para la matriz U es:

$$\left(\frac{\hbar}{i}\right)\dot{U} + H^0 U = 0 \quad (2.15)$$

Ahora, lo que sigue es retomar la relación $Y = V^\dagger U$ y derivarla con respecto a t , posteriormente se sustituyen las variables U y \dot{U} , de tal forma que se determina la ecuación diferencial para Y :

$$\dot{Y} = -\frac{i}{\hbar} WY + \dot{V}^\dagger VY \quad (2.16)$$

Con algunas relaciones entre las bases y las transformaciones unitarias, los autores establecen una segunda representación para la matriz Y :

$$\frac{dY}{ds} = -\frac{iT}{\hbar} WY + iQY \quad (2.17)$$

Se destaca la matriz Q , cuya definición matemática es:

$$Q = -i \frac{dV^\dagger}{ds} V = iV^\dagger \frac{dV}{ds}. \quad (2.18)$$

y cada elemento de matriz se define como:

$$Q_{mn} = i \int \varphi_m^*(q, s) \frac{\partial \varphi_n(q, s)}{\partial s} \varrho dq \quad (2.19)$$

para $m = n$, $Q_{nn} = 0$, debido a una condición establecida entre las eigenfunciones y su derivada, ya que las eigenfunciones se multiplican por un factor de fase con la condición de que cada eigenfunción sea ortogonal a su derivada respecto al tiempo:

$$\int \varphi_n^*(q, s) \frac{\partial \varphi_n}{\partial s} \varrho(q) dq = 0, \quad (2.20)$$

($\varrho(q)$) es la función de peso en el producto punto definido en el *espacio* – q).

Además los autores determinan una segunda definición para la matriz Q :

$$Q_{mn} = -\frac{iH'_{mn}}{W_m - W_n} \quad (2.21)$$

donde H'_{mn} está dado por

$$H'_{mn} = \int \varphi_m^* \frac{\partial H}{\partial s} \varphi_n \varrho dq \quad (2.22)$$

La ecuación diferencial de la matriz Y es equivalente a un sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\frac{dy_m}{ds} = -\frac{iT}{\hbar} W_m y_m + i \sum_k Q_{mk} y_k \quad (2.23)$$

La solución debe satisfacer las condiciones iniciales:

$$y_m = Y_{mn} = \delta_{mn} \quad \text{para } s = 0 \quad (2.24)$$

Ya se ha logrado la primera etapa del proceso de la demostración, ahora lo que sigue es resolver la ecuación diferencial, para ello se establecen cambios

de variable para facilitar el procedimiento, la ecuación diferencial a resolver ahora es:

$$\frac{dc_m}{ds} = i \sum_k P_{mk} c_k \quad (2.25)$$

Se denotará por c_{mn} aquellas soluciones de (2.25) que satisfacen las condiciones iniciales

$$c_{mn}(0) = \delta_{mn}, \quad (2.26)$$

es decir, las cantidades

$$c_{mn}(s) = Y_{mn} e^{iT w_m} \quad (2.27)$$

Debido a que el módulo cuadrado de $c_{mn}(s)$ es igual al módulo cuadrado de Y_{mn} , entonces son probabilidades de transición.

La ecuación diferencial (2.25) con la condición inicial (2.26) es equivalente al sistema de ecuaciones integrales

$$c_{mn}(s) = \delta_{mn} + i \sum_k \int_0^s P_{mk}(\sigma) c_{kn}(\sigma) d\sigma \quad (2.28)$$

Es posible resolver este sistema de ecuaciones integrales por iteraciones. Como resultado final, se obtiene una serie infinita,

$$c_{mn}(s) = \delta_{mn} + \sum_{k=1}^{\infty} i^k \int_0^s ds_k \int_0^{s_k} ds_{k-1} \dots \int_0^{s_2} ds_1 [P(s_k) P(s_{k-1}) \dots P(s_1)]_{mn} \quad (2.29)$$

Al resolver un sistema de ecuaciones integrales por iteraciones es importante asegurar que el resultado converge. Para la convergencia del método, los autores utilizan dos procedimientos distintos. El primero es a través de una matriz M que sea mayorante a la matriz Q , es decir si M converge y es mayor que Q , entonces esta última converge. El segundo método que utilizan para la convergencia es a través del teorema de Schur.

Una vez que se determinó la convergencia del método, lo siguiente es resolver el problema inicial: la demostración del teorema adiabático. Se debe

probar que si el parámetro T es lo suficientemente grande, entonces el módulo al cuadrado $|Y_{mn}|^2 = |c_{mn}|^2$, para un valor de s finito difiere arbitrariamente poco de sus valores iniciales δ_{mn} .

Para ello se comienza por formular un lema, cuyo objetivo es estimar el valor de la integral

$$J = \int_0^{s'} Q_{mn}(s) e^{iT(\omega_m - \omega_n)} ds$$

de tal forma que se obtiene:

$$|J| < 2M (N_1 + N_2) \sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}}$$

La parte imaginaria de $Q_{mn}(s)$ puede ser tomada en cuenta multiplicando esta última expresión por un factor de 2.

El lema establece la validez de la siguiente estimación:

$$\begin{aligned} & \left| \int_0^{s'} P_{mn}(s) ds \right| = \\ & = \left| \int_0^{s'} Q_{mn}(s) e^{iT(\omega_m - \omega_n)} ds \right| < 4M_{mn} (N_1 + N_2) \sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}} \end{aligned} \quad (2.30)$$

Con ayuda del lema se ejecuta la primera integración (sobre s_1) en el término k -ésimo del conjunto (2.29) y se resuelven las integraciones restantes reemplazando P_{mn} por M_{mn} , entonces:

$$\begin{aligned} |c_{mn} - \delta_{mn}| & < 4(N_1 + N_2) \sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{s^{k-1}}{(k-1)!} (M^k)_{mn} = \\ & = 4(N_1 + N_2) \sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}} \frac{db_{mn}}{ds} \end{aligned} \quad (2.31)$$

Esta cantidad es finita para valores finitos de s , lo mismo que el factor del radical en (2.31); sin embargo el radical tiende a cero para valores de T "infinitos". De esta manera se ha demostrado el teorema adiabático.

Teorema. *Si la matriz Q está absolutamente acotada y todas las condi-*

ciones para s finito y para T “infinitamente” grande son válidos, la diferencia $c_{mn} - \delta_{mn}$ es del orden de $T^{-\frac{1}{r+1}}$:

$$c_{mn} = \delta_{mn} + O(T^{-\frac{1}{r+1}}) \quad (2.32)$$

Con lo anterior se ha dado una visión general del procedimiento elaborado por Born y Fock para llevar a cabo la demostración del teorema adiabático. En el siguiente capítulo se darán los detalles matemáticos de la demostración.

Capítulo 3

Dilucidación de la demostración del teorema

3.1. Introducción

El siguiente capítulo presenta el desarrollo matemático de la primera demostración, aquí se busca hacer comprensible la lectura del trabajo destacando procedimientos matemáticos que los autores omiten u obvian en su artículo. Se buscó que el orden del trabajo permaneciera sin tantos cambios, sin embargo la redacción se modificó y algunos puntos se alteraron para lograr una mejor comprensión.

3.2. Dilucidación

§1

Se considerará un sistema mecánico con el operador energía dependiente del tiempo explícitamente y que varia en el tiempo de forma lenta. Esta lentitud será expresada de una manera en que la dependencia del tiempo sea:

$$H = H(s); \quad s = \frac{t}{T} \tag{3.1}$$

donde T es un parámetro con dimensiones de tiempo, y las derivadas con respecto a s de los coeficientes del operador H y sus eigenfunciones deben ser finitas.

Las eigenfunciones del operador $H(s)$ son

$$\varphi_1(q, s), \varphi_2(q, s), \dots$$

que satisfacen la ecuaciones

$$H(s)\varphi_n(q, s) = W_n(s)\varphi_n(q, s). \quad (3.2)$$

Debido a que estas ecuaciones contienen al tiempo como parámetro, se pueden multiplicar las eigenfunciones por un factor de fase arbitrario que contenga al tiempo.

$$\varphi_n(q, s)e^{i\theta(s)}$$

Es posible fijar estas fases con la condición de que cada eigenfunción sea ortogonal a su derivada respecto al tiempo,

$$\int \varphi_n^*(q, s) \frac{\partial \varphi_n(q, s)}{\partial s} \varrho(q) dq = 0 \quad (3.3)$$

donde $\varrho(q)$ es la función densidad en el *espacio* $-q$, o también denominada función de peso del sistema. Entonces las eigenfunciones están definidas hasta un factor de fase constante.

Junto con las eigenfunciones del operador de energía, se considera, simultáneamente, un sistema de funciones

$$\psi_1(q, t), \psi_2(q, t), \dots,$$

que satisfacen la ecuación de Schrödinger

$$H\psi_n + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = 0 \quad (3.4)$$

y coinciden con φ_n en el tiempo $t = 0$:

$$\psi_n(q, 0) = \varphi_n(q, 0). \quad (3.5)$$

Los sistemas de funciones $\psi_n(q, t)$ están normalizadas y son ortogonales para cada t . [17]

§2

Ahora se pasará de eigenfunciones a matrices. Es posible construir las matrices con los tres conjuntos completos de eigenfunciones:

$$\psi_n(q, 0) = \varphi_n(q, 0) \quad (3.6)$$

o

$$\varphi_n(q, s) \quad (3.7)$$

o

$$\psi_n(q, t) \quad (3.8)$$

Se indentificará las matrices formadas por el conjunto (3.6) por el superíndice 0 , aquellas formadas por el conjunto (3.7) con el superíndice s y aquellas formadas por el conjunto (3.8) sin superíndice. Por ejemplo,

$$H_{mn}^0 = \int \varphi_m^*(q, 0) H(0) \varphi_n(q, 0) \rho dq, \quad (3.9)$$

$$W_n \delta_{nm} = H_{mn}^s = \int \varphi_m^*(q, s) H(s) \varphi_n(q, s) \rho dq, \quad (3.10)$$

$$H_{mn} = \int \psi_m^*(q, t) H(s) \psi_n(q, t) \rho dq. \quad (3.11)$$

La representación (3.9) tiene la propiedad de que las matrices independientes del tiempo corresponderán a operadores constantes (explícitamente independientes del tiempo); en la representación (3.10) la matriz energía es diagonal y en la representación (3.11) las ecuaciones de movimiento tiene la

forma:

$$\begin{aligned}\dot{q} &= \frac{i}{\hbar} (Hq - qH), \\ \dot{p} &= \frac{i}{\hbar} (Hp - pH).\end{aligned}\tag{3.12}$$

La transición de una representación a otra se puede lograr mediante una matriz unitaria, que denominarán U, V y Y .¹

La representación matricial de H^0, W y H del operador H están conectadas por las ecuaciones

$$H = U^\dagger H^0 U,\tag{3.13}$$

$$W = V^\dagger H^0 V,\tag{3.14}$$

$$H = Y^\dagger W Y.\tag{3.15}$$

La matriz Y puede expresarse mediante U y V como sigue: Resolvemos para H^0 en la ecuación (3.13) y en (3.14),

$$U H U^\dagger = H^0$$

y

$$V W V^\dagger = H^0$$

igualamos ambas ecuaciones

$$U H U^\dagger = V W V^\dagger$$

Ahora se sustituye H representada como $H = Y^\dagger W Y$,

$$U Y^\dagger W Y U^\dagger = V W V^\dagger$$

¹Usualmente se llamará a U^\dagger como la matriz “adjunta” o “transpuesta conjugada”

$$U_{mn}^\dagger = U_{nm}^*$$

entonces la matriz U es unitaria y satisface la condición:

$$U U^\dagger = U^\dagger U = I.$$

Para satisfacer la igualdad se debe cumplir que $YU^\dagger = V^\dagger$ por lo tanto,

$$Y = V^\dagger U. \quad (3.16)$$

Todas estas relaciones pueden fácilmente verificarse con las expresiones explícitas de los elementos de las matrices

$$\begin{aligned} U_{mn} &= \int \varphi_m^*(q, 0) \psi_n(q, t) \rho dq, \\ V_{mn} &= \int \varphi_m^*(q, 0) \varphi_n(q, s) \rho dq, \\ Y_{mn} &= \int \varphi_m^*(q, s) \psi_n(q, t) \rho dq. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Por facilidad se utilizará la notación de Dirac para demostrar una de las relaciones. Por (3.9) los elementos H^0 pueden ser expresados como

$$H_{mn}^0 = \langle \varphi_m(q, 0) | H(0) | \varphi_n(q, 0) \rangle$$

mientras que por (3.11) los elementos H se expresan como

$$H_{mn} = \langle \psi_m(q, t) | H(s) | \psi_n(q, t) \rangle$$

Entonces para pasar de H^0 a H se utiliza la matriz U , cuyos elementos se representan por

$$U_{mn} = \langle \varphi_m(q, 0) | \psi_n(q, t) \rangle$$

y

$$U_{mn}^\dagger = \langle \psi_m(q, t) | \varphi_n(q, 0) \rangle$$

Por (3.13)

$$\begin{aligned} H_{mn} &= (U^\dagger H^0 U)_{mn} \\ &= \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n \langle \psi_m(q, t) | \varphi_k(q, 0) \rangle \langle \varphi_k(q, 0) | H(0) | \varphi_l(q, 0) \rangle \langle \varphi_l(q, 0) | \psi_n(q, t) \rangle \\ &= \langle \psi_m(q, t) | H(s) | \psi_n(q, t) \rangle \end{aligned}$$

Y de la misma manera es posible verificar las otras relaciones.

§3

Como fue indicado por uno de los autores [14], las entradas de Y_{mn} tienen el siguiente significado físico: el módulo cuadrado $|Y_{mn}|^2$ es la probabilidad de que el sistema mecánico, que si está en $t = 0$ en el estado n (con un nivel de energía $W_n(0)$), se encuentre en el estado m en el tiempo t (con un nivel de energía $W_m(t/T)$). Este significado de $|Y_{mn}|^2$ también se obtiene de la ecuación de la estadística de Dirac, la cual fue demostrada por el segundo autor [18]. El teorema adiabático establece ahora que para un cambio infinitamente lento del sistema, es decir, para un valor infinitamente grande en el parámetro T en (3.1), la probabilidad de transición $|Y_{mn}|^2$ para $m \neq n$ (la cual es función del tiempo) permanece infinitamente pequeña incluso para valores finitos de $s = \frac{t}{T}$.

Se demostrará este argumento bajo algunas restricciones al investigar la ecuación diferencial que satisface los valores de Y_{mn} .

§4

Primero se establece una ecuación diferencial para la matriz de transformación U .

Las matrices q y p satisfacen las ecuaciones de movimiento

$$\begin{aligned}\dot{q} &= \frac{i}{\hbar} (Hq - qH), \\ \dot{p} &= \frac{i}{\hbar} (Hp - pH)\end{aligned}\tag{3.18}$$

y las matrices constantes q^0 y p^0 están conectadas con p y q por las relaciones

$$\begin{aligned}q &= U^\dagger q^0 U, \\ p &= U^\dagger p^0 U.\end{aligned}\tag{3.19}$$

La conexión entre la representación del operador H y H^0 es

$$H = U^\dagger H^0 U.\tag{3.20}$$

Al utilizar las expresiones para q , p y H a través de q^0 , p^0 y H^0 y se calcula las derivadas \dot{q} y \dot{p} :

$$\begin{aligned}\dot{q} &= \dot{U}^\dagger q^0 U + U^\dagger q^0 \dot{U}, \\ \dot{p} &= \dot{U}^\dagger p^0 U + U^\dagger p^0 \dot{U}.\end{aligned}$$

Por la relación $U^\dagger U = I$ es posible encontrar una expresión para \dot{U}^\dagger . Entonces se deriva esta expresión

$$\dot{U}^\dagger U + U^\dagger \dot{U} = 0.$$

$$\dot{U}^\dagger U = -U^\dagger \dot{U}$$

Al multiplicar por U^\dagger a la derecha de ambos lados de la igualdad se obtiene

$$\dot{U}^\dagger U U^\dagger = -U^\dagger \dot{U} U^\dagger \Leftrightarrow \dot{U}^\dagger = -U^\dagger \dot{U} U^\dagger.$$

Al sustituir \dot{U}^\dagger en la ecuación encontrada para \dot{q}

$$\dot{q} = (-U^\dagger \dot{U} U^\dagger) q^0 U + U^\dagger q^0 \dot{U},$$

Se multiplica a la derecha del segundo término por la expresión $U^\dagger U$

$$\dot{q} = -U^\dagger \dot{U} U^\dagger q^0 U + U^\dagger q^0 \dot{U} U^\dagger U,$$

Se factoriza por la izquierda a la matriz U^\dagger y a U por la derecha

$$\dot{q} = U^\dagger (-\dot{U} U^\dagger q^0 + q^0 \dot{U} U^\dagger) U.$$

Al seguir el mismo procedimiento para \dot{p} , entonces las ecuaciones resultantes son:

$$\begin{aligned}\dot{q} &= U^\dagger (-\dot{U} U^\dagger q^0 + q^0 \dot{U} U^\dagger) U, \\ \dot{p} &= U^\dagger (-\dot{U} U^\dagger p^0 + p^0 \dot{U} U^\dagger) U.\end{aligned}\tag{3.21}$$

Por otra parte como las ecuaciones de movimiento son:

$$\begin{aligned}\dot{q} &= \frac{i}{\hbar} (Hq - qH), \\ \dot{p} &= \frac{i}{\hbar} (Hp - pH).\end{aligned}$$

Es posible reescribir estas ecuaciones con las relaciones entre H , H^0 , p , p^0 , q y q^0 . Al trabajar para la variable \dot{q} , si $H = U^\dagger H^0 U$, entonces se reescribe la ecuación $\dot{q} = \frac{i}{\hbar} (Hq - qH)$ como sigue:

$$\dot{q} = \frac{i}{\hbar} (U^\dagger H^0 U q - q U^\dagger H^0 U),$$

Se multiplica por $U^\dagger U$ el lado derecho del primer término y el lado izquierdo del segundo término

$$\dot{q} = \frac{i}{\hbar} (U^\dagger H^0 U q U^\dagger U - U^\dagger U q U^\dagger H^0 U),$$

como $q = U^\dagger q^0 U$ entonces $U q U^\dagger = q^0$, por lo tanto

$$\dot{q} = \frac{i}{\hbar} (U^\dagger H^0 q^0 U - U^\dagger q^0 H^0 U).$$

Se factoriza la matriz U^\dagger por la izquierda y la matriz U por la derecha,

$$\dot{q} = \frac{i}{\hbar} U^\dagger (H^0 q^0 - q^0 H^0) U$$

Con el mismo procedimiento para \dot{p} , se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}\dot{q} &= \frac{i}{\hbar} U^\dagger (H^0 q^0 - q^0 H^0) U, \\ \dot{p} &= \frac{i}{\hbar} U^\dagger (H^0 p^0 - p^0 H^0) U.\end{aligned}\tag{3.22}$$

Se igualan las expresiones (3.22) y (3.21) para las ecuaciones de movimiento, entonces para la variable \dot{q} ,

$$\frac{i}{\hbar} U^\dagger (H^0 q^0 - q^0 H^0) U = U^\dagger (-\dot{U} U^\dagger q^0 + q^0 \dot{U} U^\dagger) U$$

Se factoriza la matriz U^\dagger por la izquierda y la matriz U por la derecha,

$$U^\dagger \left\{ \frac{i}{\hbar} (H^0 q^0 - q^0 H^0) \right\} U = U^\dagger \left\{ (-\dot{U}U^\dagger q^0 + q^0 \dot{U}U^\dagger) \right\} U$$

Por lo tanto, se debe cumplir que

$$\frac{i}{\hbar} (H^0 q^0 - q^0 H^0) = (-\dot{U}U^\dagger q^0 + q^0 \dot{U}U^\dagger)$$

Al despejar a $(H^0 q^0 - q^0 H^0)$, se obtiene

$$(H^0 q^0 - q^0 H^0) = \frac{\hbar}{i} (-\dot{U}U^\dagger q^0 + q^0 \dot{U}U^\dagger),$$

Se agrupan los términos con q^0 multiplicando a la derecha y q^0 multiplicando a la izquierda

$$(H^0 q^0) + \frac{\hbar}{i} (\dot{U}U^\dagger q^0) = (q^0 H^0) + \frac{\hbar}{i} (q^0 \dot{U}U^\dagger)$$

Se factoriza la matriz q^0 y se ajustan los términos en un lado de la igualdad,

$$\left(H^0 + \frac{\hbar}{i} \dot{U}U^\dagger \right) q^0 - q^0 \left(H^0 + \frac{\hbar}{i} \dot{U}U^\dagger \right) = 0$$

Sea K^0 la matriz hermiteana

$$K^0 = H^0 + \frac{\hbar}{i} \dot{U}U^\dagger \quad (3.23)$$

se obtiene

$$K^0 q^0 - q^0 K^0 = 0$$

Con el mismo procedimiento para p^0 , se obtienen a las ecuaciones

$$\begin{aligned} K^0 q^0 - q^0 K^0 &= 0, \\ K^0 p^0 - p^0 K^0 &= 0. \end{aligned} \quad (3.24)$$

La matriz K^0 conmuta con p^0 y q^0 . Entonces si q^0 y p^0 forman un sistema de matrices irreducibles, la matriz K^0 debe ser un múltiplo de la matriz unidad

y es posible igualarla a cero, de tal forma que, al multiplicar por la derecha con la matriz U la ecuación

$$K^0 = H^0 + \left(\frac{\hbar}{i}\right) \dot{U}U^\dagger = 0$$

Se obtiene para la matriz de transformación:

$$\left(\frac{\hbar}{i}\right) \dot{U} + H^0U = 0. \quad (3.25)$$

que no es otra cosa que la ecuación de Schödinger en representación matricial.

Si las matrices q^0 y p^0 no son constantes como se estableció, éstas satisfarán las ecuaciones de movimiento

$$\begin{aligned} \dot{q}^0 &= \frac{i}{\hbar} (K^0q^0 - q^0K^0), \\ \dot{p}^0 &= \frac{i}{\hbar} (K^0p^0 - p^0K^0). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Esto se puede demostrar al derivar la ecuación $q = U^\dagger q^0 U$ respecto a t ,

$$\dot{q} = \dot{U}^\dagger q^0 U + U^\dagger \dot{q}^0 U + U^\dagger q^0 \dot{U}$$

Se sustituye la expresión $\dot{U}^\dagger = -U^\dagger \dot{U} U^\dagger$ y se multiplica por $U^\dagger U$ en el lado derecho del tercer miembro,

$$\dot{q} = -U^\dagger \dot{U} U^\dagger q^0 U + U^\dagger \dot{q}^0 U + U^\dagger q^0 \dot{U} U^\dagger U$$

Se factoriza la matriz U^\dagger por la izquierda y la matriz U por la derecha,

$$\dot{q} = U^\dagger \left(-\dot{U} U^\dagger q^0 + q^0 \dot{U} U^\dagger + \dot{q}^0 \right) U$$

Además si se consideran las ecuaciones de movimiento expresadas como:

$$\dot{q} = \frac{i}{\hbar} U^\dagger \left(H^0 q^0 - q^0 H^0 \right) U$$

Entonces ambas ecuaciones se igualan,

$$U^\dagger \left\{ \frac{i}{\hbar} (H^0 q^0 - q^0 H^0) \right\} U = U^\dagger (-\dot{U}U^\dagger q^0 + q^0 \dot{U}U^\dagger + \dot{q}^0) U$$

Esto indica que

$$\frac{i}{\hbar} (H^0 q^0 - q^0 H^0) = -\dot{U}U^\dagger q^0 + q^0 \dot{U}U^\dagger + \dot{q}^0$$

Se despeja el término $(H^0 q^0 - q^0 H^0)$

$$(H^0 q^0 - q^0 H^0) = \frac{i}{\hbar} (-\dot{U}U^\dagger q^0 + q^0 \dot{U}U^\dagger + \dot{q}^0)$$

Se agrupan términos con la matriz \dot{q} multiplicando por la derecha y por la izquierda

$$\left(H^0 q^0 + \frac{\hbar}{i} \dot{U}U^\dagger q^0 \right) = \left(q^0 H^0 + \frac{\hbar}{i} q^0 \dot{U}U^\dagger \right) + \frac{\hbar}{i} \dot{q}^0$$

Se factoriza la matriz q^0 en ambos términos, y se expresa la igualdad como sigue:

$$\left(H^0 + \frac{\hbar}{i} \dot{U}U^\dagger \right) q^0 - q^0 \left(H^0 + \frac{\hbar}{i} \dot{U}U^\dagger \right) = \frac{\hbar}{i} \dot{q}^0$$

Como $K^0 = H^0 + \frac{\hbar}{i} \dot{U}U^\dagger$, entonces,

$$\dot{q}^0 = \frac{i}{\hbar} (K^0 q^0 - q^0 K^0)$$

Se desarrolla el mismo análisis para \dot{p}^0 y se obtienen las ecuaciones buscadas

$$\begin{aligned} \dot{q}^0 &= \frac{i}{\hbar} (K^0 q^0 - q^0 K^0), \\ \dot{p}^0 &= \frac{i}{\hbar} (K^0 p^0 - p^0 K^0). \end{aligned}$$

con la “matriz de Hamilton” K^0 . Las consideraciones de ésta sección también contienen la teoría general (independiente del tiempo) de transformaciones canónicas de las ecuaciones de movimiento de mecánica cuántica.

§5

De la ecuación diferencial

$$\left(\frac{\hbar}{i}\right)\dot{U} + H^0U = 0$$

para la matriz U es posible obtener la ecuación correspondiente para la matriz Y .

Por la ecuación

$$Y = V^\dagger U$$

y su derivada respecto a t

$$\dot{Y} = V^\dagger \dot{U} + \dot{V}^\dagger U. \quad (3.27)$$

Ahora se expresa H^0 en $\left(\frac{\hbar}{i}\right)\dot{U} + H^0U = 0$ como $H^0 = VWWV^\dagger$ que contiene la matriz diagonal W , se obtiene

$$\frac{\hbar}{i}\dot{U} + VWWV^\dagger U = 0$$

Al despejar a \dot{U} , se sigue que

$$\dot{U} = -\frac{i}{\hbar}VWWV^\dagger U \quad (3.28)$$

Por otra parte

$$Y = V^\dagger U \Leftrightarrow VY = VV^\dagger U \Leftrightarrow VY = U \quad (3.29)$$

Al sustituir las expresiones (3.29), (3.28) para \dot{U} y U en (3.27), se obtiene

$$\dot{Y} = V^\dagger \dot{U} + \dot{V}^\dagger U = V^\dagger \left(-\frac{i}{\hbar}VWY^\dagger\right) + \dot{V}^\dagger(VY)$$

$$\dot{Y} = -\frac{i}{\hbar}WY + \dot{V}^\dagger VY \quad (3.30)$$

es decir la ecuación diferencial que se necesitaba.

Aquí el punto en el superíndice significa (como usualmente se hace) la derivada respecto al tiempo t . Ahora en lugar del tiempo, se introduce la cantidad $s = \frac{t}{T}$ de la ecuación (3.1) para obtener la derivada respecto a s . Se aplica la regla de la cadena a la matriz Y

$$\dot{Y} = \frac{dY}{dt} = \frac{dY}{ds} \frac{ds}{dt} \Leftrightarrow \frac{dY}{ds} = \frac{dY}{dt} \frac{dt}{ds}$$

Si $t = sT$, entonces $\frac{dt}{ds} = T$, por lo tanto:

$$\frac{dY}{ds} = \frac{dY}{dt} T$$

Entonces es posible reescribir la ecuación $\dot{Y} = -\frac{\hbar}{i} WY + \dot{V}^\dagger VY$ como:

$$\frac{dY}{ds} = \dot{Y} T = \left(-\frac{i}{\hbar} WY + \dot{V}^\dagger VY \right) T = -\frac{iT}{\hbar} WY + T \dot{V}^\dagger VY,$$

Se aplica nuevamente la regla de la cadena para V^\dagger ,

$$\dot{V}^\dagger = \frac{dV^\dagger}{dt} = \frac{dV^\dagger}{ds} \frac{ds}{dt} = \frac{dV^\dagger}{ds} \left(\frac{1}{T} \right)$$

Si se sustituye esta expresión en la ecuación $\frac{dY}{ds} = -\frac{iT}{\hbar} WY + T \dot{V}^\dagger VY$, entonces

$$\begin{aligned} \frac{dY}{ds} &= -\frac{iT}{\hbar} WY + T \left\{ \frac{dV^\dagger}{ds} \left(\frac{1}{T} \right) \right\} VY \Leftrightarrow \frac{dY}{ds} = -\frac{iT}{\hbar} WY + \frac{dV^\dagger}{ds} VY \\ & \frac{dY}{ds} = -\frac{iT}{\hbar} WY + \frac{dV^\dagger}{ds} VY \end{aligned} \quad (3.31)$$

Más adelante se introduce:

$$Q = -i \frac{dV^\dagger}{ds} V = i V^\dagger \frac{dV}{ds}. \quad (3.32)$$

Como la matriz de transformación V es unitaria, la matriz Q recién introducida es Hermiteana. Sus componentes pueden expresarse mediante las

eigenfunciones del operador de energía:

$$Q_{mn} = i \int \varphi_m^*(q, s) \frac{\partial \varphi_n(q, s)}{\partial s} \rho dq \quad (3.33)$$

Se destaca que por la normalización (3.3) de las eigenfunciones $\varphi_n(q, t)$ todos los elementos de la diagonal de la matriz Q son cero.

Ahora se desea encontrar otra expresión para los elementos de la matriz Q . Se obtendrá la derivada de la ecuación $W = V^\dagger H^0 V$ respecto al parámetro s . Entonces se obtiene

$$\frac{dW}{ds} = \frac{dV^\dagger}{ds} H^0 V + V^\dagger H^0 \frac{dV}{ds} + V^\dagger \frac{dH^0}{ds} V \quad (3.34)$$

En la representación donde la matriz de energía es diagonal, la expresión $V^\dagger \frac{dH^0}{ds} V$ es la matriz de las derivadas con respecto s del operador de energía; por brevedad, se denotará por H' :

$$H' = V^\dagger \frac{dH^0}{ds} V \quad (3.35)$$

Ahora a partir de $W = V^\dagger H^0 V$, se encuentran las siguientes equivalencias

$$H^0 V = VW; \quad V^\dagger H^0 = WV^\dagger \quad (3.36)$$

Si se sustituye (3.36) en (3.34), se obtiene

$$\frac{dW}{ds} = \frac{dV^\dagger}{ds} VW + V^\dagger \frac{dH^0}{ds} V + WV^\dagger \frac{dV}{ds}$$

y si toma en cuenta la ecuación diferencial (3.32) y (3.35) para Q y H' , entonces

$$\begin{aligned} \frac{dW}{ds} &= \frac{Q}{-i} W + V^\dagger \frac{dH^0}{ds} V + W \frac{Q}{i} \\ \frac{dW}{ds} &= iQW - iWQ + V^\dagger \frac{dH^0}{ds} V \\ \frac{dW}{ds} &= i(QW - WQ) + H' \end{aligned} \quad (3.37)$$

Al describir la expresión anterior de forma explícita se obtiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \begin{bmatrix} W_1 & 0 & \dots \\ 0 & W_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} = \\ i \left\{ \begin{bmatrix} 0 & Q_{12} & \dots \\ Q_{21} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W_1 & 0 & \dots \\ 0 & W_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} W_1 & 0 & \dots \\ 0 & W_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & Q_{12} & \dots \\ Q_{21} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \right\} + \\ + \begin{bmatrix} H'_{11} & H'_{12} & \dots \\ H'_{21} & H'_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Al desarrollar los productos de matrices QW y WQ se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \begin{bmatrix} W_1 & 0 & \dots \\ 0 & W_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} = i \left\{ \begin{bmatrix} 0 & W_2 Q_{12} & \dots \\ W_1 Q_{21} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & W_1 Q_{12} & \dots \\ W_2 Q_{21} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \right\} + \\ + \begin{bmatrix} H'_{11} & H'_{12} & \dots \\ H'_{21} & H'_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Al considerar ahora los elementos fuera de la diagonal de la matriz (3.37). Como W es diagonal, por (3.37) para $m \neq n$ se tiene

$$iQ_{mn}(W_n - W_m) + H'_{mn} = 0$$

o al resolver para Q_{mn}

$$Q_{mn} = \frac{-H'_{mn}}{i(W_n - W_m)}$$

por lo tanto

$$Q_{mn} = -\frac{iH'_{mn}}{W_m - W_n} \quad (3.38)$$

donde H'_{mn} está dado por

$$H'_{mn} = \int \varphi_m^* \frac{\partial H}{\partial s} \varphi_n \varrho dq \quad (3.39)$$

para $m = n$ como ya se ha establecido, $Q_{nn} = 0$.

Se debe notar aquí que Q_{mn} permanece finita también en el caso donde para algún valor especial de s la diferencia $W_m(s) - W_n(s)$ se anule; esto se sigue de la expresión (3.33) para Q_{mn} .

Al retomar la ecuación diferencial (3.31) para la matriz Y , la cual se puede reescribir con la expresión

$$Q = -i \frac{dV^\dagger}{ds} V = iV^\dagger \frac{dV}{ds}$$

Entonces, la ecuación

$$\frac{dY}{ds} = -\frac{iT}{\hbar} WY + \frac{dV^\dagger}{ds} VY$$

queda como

$$\frac{dY}{ds} = -\frac{iT}{\hbar} WY + iQY \quad (3.40)$$

En forma explícita la ecuación anterior es:

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \begin{bmatrix} Y_{11} & Y_{12} & \dots \\ Y_{21} & Y_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} &= -\frac{iT}{\hbar} \begin{bmatrix} W_1 & 0 & \dots \\ 0 & W_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_{11} & Y_{12} & \dots \\ Y_{21} & Y_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} + \\ &+ i \begin{bmatrix} 0 & Q_{12} & \dots \\ Q_{21} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_{11} & Y_{12} & \dots \\ Y_{21} & Y_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Así, el elemento mn de la matriz es:

$$\frac{dY_{mn}}{ds} = -\frac{iT}{\hbar}W_m Y_{mn} + i \sum_k Q_{mk} Y_{kn} \quad (3.41)$$

Lo anterior puede tratarse como n sistemas de m ecuaciones:

$$\frac{dY_m}{ds} = -\frac{iT}{\hbar}W_m Y_m + i \sum_k Q_{mk} Y_k$$

Es decir, cada columna de la matriz es un sistema de m ecuaciones.

Entonces será considerado también el sistema de ecuaciones²

$$\frac{dy_m}{ds} = -\frac{iT}{\hbar}W_m y_m + i \sum_k Q_{mk} y_k \quad (3.42)$$

Al tomar en cuenta que en $t = 0, s = 0$ y que $\psi_n(q, 0) = \varphi_n(q, 0)$, entonces la matriz Y cuyos elementos están dados por

$$Y_{mn} = \int \varphi_m^*(q, 0)\psi_n(q, 0)\varrho dq = \int \varphi_m^*(q, 0)\varphi(q, 0)\varrho dq = \delta_{mn}$$

es una matriz unidad.

Por lo que se puede considerar los elementos de matriz de una columna

$$Y_{1n}, Y_{2n}, \dots, Y_{mn} \dots$$

como una solución

$$y_1, y_2, \dots, y_m, \dots$$

de la ecuación (3.42), mismas que satisfacen las condiciones iniciales

$$y_m = Y_{mn} = \delta_{mn} \quad \text{para } s = 0 \quad (3.43)$$

Las cantidades y_m están definidas en forma única por la ecuación diferencial (3.42) y las condiciones iniciales (3.43).

²Ver referencia [12], comparar ecuaciones (1.26) y (1.27) y teorema 1.

§6

Ahora se indicará un método para resolver la ecuación

$$\frac{dy_m}{ds} = -\frac{iT}{\hbar} W_m y_m + i \sum_k Q_{mk} y_k$$

Se define por brevedad

$$\omega_k(s) = \frac{1}{\hbar} \int_0^s W_k(s) ds, \quad (3.44)$$

y se sustituye en la ecuación diferencial a y_k por

$$c_k = y_k e^{iT\omega_k} \quad (3.45)$$

La cantidad c_k satisface las ecuaciones diferenciales:

$$\frac{dc_m}{ds} = i \sum_k P_{mk} c_k \quad (3.46)$$

en donde P_{mk} es

$$P_{mk} = Q_{mk} e^{iT(\omega_m - \omega_k)} \quad (3.47)$$

Esta claro que si realizamos explícitamente el cambio de variable en la reciente ecuación diferencial, se obtiene la ecuación original,

$$\frac{d}{ds} (y_m e^{iT\omega_m}) = i \sum_k Q_{mk} e^{iT(\omega_m - \omega_k)} y_k e^{iT\omega_k}$$

$$\frac{dy_m}{ds} e^{iT\omega_m} + y_m e^{iT\omega_m} \left(iT \frac{d\omega_m}{ds} \right) = i \sum_k Q_{mk} y_m e^{iT\omega_m}$$

Entonces al eliminar la fase $e^{i\omega_m}$ y ordenando la ecuación se obtiene la ecuación inicial:

$$\frac{dy_m}{ds} = -iT y_m \left(\frac{d\omega_m}{ds} \right) = i \sum_k Q_{mk} y_m$$

donde $\frac{d\omega_m}{ds} = \frac{1}{\hbar} W_m$.

La diferencia entre la ecuación nueva y la original es, primero, que el coefi-

ciente de c_m es igual a cero, mientras que el coeficiente de y_m es proporcional al parametro T ; segundo, para P_{mk} con T en el exponente oscila rápidamente, mientras que los Q_{mk} son cantidades que varían lentamente.

Ahora se denotará por $c_{mn}(s)$ aquellas soluciones de (3.46) que satisfacen las condiciones iniciales

$$c_m(0) = \delta_{mn}, \quad (3.48)$$

es decir, las cantidades

$$c_{mn}(s) = Y_{mn} e^{iT w_m} \quad (3.49)$$

Su módulo cuadrado es igual al módulo cuadrado Y_{mn} , entonces son probabilidades de transición.

La ecuación diferencial $\frac{dc_m}{ds} = i \sum_k P_{mk} c_k$ se puede transformar en un sistema de n ecuaciones integrales como sigue:

$$\frac{dc_{mn}}{ds} = i \sum_k P_{mk} c_{kn}(s)$$

$$dc_{mn} = i \sum_k P_{mk} c_{kn}(s) ds$$

Al integrar ambos lados de la ecuación

$$\int_0^s dc_{mn} = \int_0^s i \sum_k P_{mk}(\sigma) c_{kn}(\sigma) d\sigma$$

$$c_{mn}(s) - c_{mn}(0) = \int_0^s i \sum_k P_{mk}(\sigma) c_{kn}(\sigma) d\sigma$$

Por la condición inicial ($c_{mn}(0) = \delta_{mn}$), se obtiene un sistema de ecuaciones integrales:

$$c_{mn}(s) = \delta_{mn} + i \sum_k \int_0^s P_{mk}(\sigma) c_{kn}(\sigma) d\sigma \quad (3.50)$$

Es posible resolver este sistema de ecuaciones integrales mediante iteraciones. Para la aproximación cero, se toma

$$c_{mn}^{(0)}(0) = \delta_{mn}$$

Entonces al interar por primera vez con $c_{mn}(0)$ como $c_{kn}(\sigma)$ en la ecuación (3.50), se obtiene en forma matricial la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} c_{11}^{(1)} & c_{12}^{(1)} & \dots \\ c_{21}^{(1)} & c_{22}^{(1)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} + i \int_0^{s_1} \left\{ \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \right\} d\sigma_1 = \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} + i \int_0^{s_1} \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} d\sigma_1 \end{aligned}$$

Cada elemento matriz tiene la forma:

$$c_{mn}^{(1)} = \delta_{mn} + i \int_0^{s_1} P_{mk}(\sigma) d\sigma_1$$

La segunda iteración da como resultado,

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} c_{11}^{(2)} & c_{12}^{(2)} & \dots \\ c_{21}^{(2)} & c_{22}^{(2)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} + i \int_0^{s_2} \left\{ \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{11}^{(1)} & c_{12}^{(1)} & \dots \\ c_{21}^{(1)} & c_{22}^{(1)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \right\} d\sigma_2 = \\ & \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} + \\ & + i \int_0^{s_2} \left\{ \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \left\{ \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} + i \int_0^{s_1} \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} d\sigma_1 \right\} d\sigma_2 = \\ & = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} + i \int_0^{s_2} \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} d\sigma_2 + i^2 \int_0^{s_2} \int_0^{s_1} \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} d\sigma_1 d\sigma_2 \end{aligned}$$

La expresión del elemento mn ahora es,

$$c_{mn}^{(2)} = \delta_{mn} + i \int_0^{s_2} P_{mk}(\sigma_2) d\sigma_2 + i^2 \int_0^{s_2} d\sigma_2 \int_0^s d\sigma_1 [P(\sigma_2)P\sigma_1]_{mn}$$

Entonces de forma general la iteración l -ésima se representa como,

$$c_{mn}^{(l)} = \delta_{mn} + i \sum_k \int_0^s P_{mk}(\sigma) c_{kn}^{(l-1)}(\sigma) d\sigma \quad (3.51)$$

Al seguir con el método iterativo se obtiene como resultado final una serie infinita descrita como:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots \\ c_{21} & c_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} + i \int_0^{s_1} \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} ds_1 + \\ &+ i^2 \int_0^{s_2} \int_0^{s_1} \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} ds_1 ds_2 + \dots + \\ &+ i^k \int_0^{s_1} \int_0^{s_2} \dots \int_0^{s_k} \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \dots \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} ds_1 ds_2 \dots ds_k \end{aligned}$$

Cada elemento de matriz se representa como:

$$\begin{aligned} c_{mn}(s) &= \delta_{mn} + \\ &+ \sum_{k=1}^{\infty} i^k \int_0^s ds_k \int_0^{s_k} ds_{k-1} \dots \int_0^{s_2} ds_1 [P(s_k)P(s_{k-1}) \dots P(s_1)]_{mn} \quad (3.52) \end{aligned}$$

Hasta ahora no se ha tomado en cuenta las consideraciones de convergencia de la serie. Para asegurar la convergencia del método, se establecen requisitos preliminares a la matriz $P(s)$ de que sea acotada absolutamen-

te ³ para todo s y también una matriz M constante acotada que se puede encontrar y que sea mayorante.

$$|P_{mn}(s)| = |Q_{mn}(s)| \leq M_{mn}; \quad (3.53)$$

M_{mn} es acotada.

Entonces[19] al sistema de ecuaciones mayorante

$$\frac{db_{mn}}{ds} = \sum_k M_{mk} b_{kn} \quad (3.54)$$

con la condición inicial

$$b_{mn}(0) = \delta_{mn}$$

Se le puede aplicar el método iterativo

$$b_{mn} = \delta_{mn} + \int_0^s M_{mn} ds + \int_0^s \int_0^{s_2} (M^2)_{mn} ds ds_2 + \dots +$$

$$\int_0^s \int_0^{s_2} \dots \int_0^{s_k} (M^k)_{mn} ds ds_2 \dots ds_k$$

Cuya solución conocida es

$$b_{mn}(s) = (e^{sM})_{mn} = \delta_{mn} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{s^k}{k!} (M^k)_{mn} \quad (3.55)$$

³Una matriz (P_{mn}) se denomina acotada, si para cada sistema de números x_n, y_n que satisfacen la condición de normalización

$$\sum_n |x_n|^2 = 1; \quad \sum_n |y_n|^2 = 1$$

la doble suma

$$\sum_{mn} P_{mn} x_m y_n$$

converge y sus valores absolutos permanecen dentro de un límite independiente de la elección de x_n, y_n . La matriz es llamada acotada absolutamente si la matriz que consiste en valores absolutos $|P_{mn}|$ es acotada.

Al desarrollar la serie anterior resulta:

$$b_{mn} = \delta_{mn} + \frac{s^1}{1!} M_{mn} + \frac{s^2}{2!} (M^2)_{mn} + \cdots + \frac{s^k}{(k-1)!} (M^k)_{mn}$$

la cual presenta una serie de potencias de s uniformemente convergente. Si se sustituye en (3.52) P_{mn} por M_{mn} ,

$$\begin{aligned} c_{mn} = & \delta_{mn} + i \int_0^{s_2} M_{mn}(\sigma_2) d\sigma_2 + i^2 \int_0^{s_2} d\sigma_2 \int_0^s d\sigma_1 [M(\sigma_2)M(\sigma_1)]_{mn} \\ & + \cdots + i^k \int_0^s ds_k \int_0^{s_k} ds_{k-1} \cdots \int_0^{s_2} ds_1 [M(s_k)M(s_{k-1}) \cdots M(s_1)]_{mn} \end{aligned}$$

el valor absoluto de cada término en la serie (3.52) no es más grande que el término correspondiente en la serie (3.55).

$$\left| i^k \int_0^s ds_k \int_0^{s_k} ds_{k-1} \cdots \int_0^{s_2} ds_1 [M(s_k)M(s_{k-1}) \cdots M(s_1)]_{mn} \right| < \left| \frac{s^k}{(k-1)!} (M^k)_{mn} \right|$$

A partir de esto se establecen que las condiciones (3.53) son suficientes para la convergencia de la serie (3.52).

Al suponer que la matriz Q_{mn} está realmente restringida, es posible utilizar el criterio siguiente. De acuerdo con el teorema de Schur[20] es realmente el caso si la serie

$$z_m = \sum_k |Q_{mk}| \quad (3.56)$$

converge y permanece independiente de m dentro de un límite. De acuerdo con la ecuación (3.38) para Q_{mn} , la serie es igual a

$$z_m = \sum_k' \frac{|H'_{mk}|}{|W_m - W_k|} \quad (3.57)$$

donde el simbolo ' en la suma significa que el termino con $k = m$ se omite.

Ahora si se acepta que el conjunto

$$\alpha_m = \sum'_k \frac{1}{(W_m - W_n)^2} \quad (3.58)$$

converge, y se denota por β_m la expresión:

$$\beta_m = \sum'_k |H'_{mn}|^2 = \int \left| \frac{\partial H}{\partial s} \varphi_m \right|^2 \varrho dq, \quad (3.59)$$

entonces es posible estimar la suma z_m con la desigualdad de Schwarz:

$$z_m \leq \sqrt{\alpha_m \beta_m} \quad (3.60)$$

Así, se ha obtenido la siguiente condición suficiente para que la matriz Q_{mn} sea absolutamente acotada: el producto $\alpha_m \beta_m$ debe estar dentro de un límite A independiente de m :

$$\alpha_m \beta_m \leq A \quad (3.61)$$

Cuando los eigenvalores W_n crecen proporcionalmente a n , lo cual es el caso en el oscilador armónico, el conjunto $\alpha_m = \sum'_k \frac{1}{(W_m - W_n)^2}$ converge y su suma permanece más pequeña que un número independiente de m . Entonces para que Q sea absolutamente acotada es suficiente que β (3.59) sea finita, lo cual siempre es el caso si la derivada de la energía de perturbación es una función acotada.

Si un sistema mecánico está acotado por un volumen, de tal forma que el espacio- q es finito, entonces para un solo grado de libertad los eigenvalores W_n crecen proporcionalmente a n^2 . Entonces α_m decrece como $\frac{1}{m^2}$, y para que Q sea absolutamente acotada es suficiente permitir que β_m incremente proporcionalmente no más rápido que m^2 , lo cual es el caso para cualquier suposición muy general sobre la energía de perturbación.

§7

Ahora se retoma el problema inicial: demostrar el teorema adiabático. Se debe probar que si el parámetro T en las fórmulas

$$H = H(s); \quad s = \frac{t}{T},$$

$$H^0 V = V W; \quad V^\dagger H^0 = W V^\dagger$$

$$\frac{dY_{mn}}{ds} = \frac{iT}{\hbar} W_m Y_{mn} + i \sum_k Q_{mk} Y_{kn}$$

$$y_m = Y_{mn} = \delta_{mn} \quad \text{para } s = 0$$

es lo suficientemente grande, entonces el módulo al cuadrado $|Y_{mn}|^2 = |c_{mn}|^2$ para un valor de s finito difiere arbitrariamente poco de sus valores iniciales δ_{mn} . Las condiciones exactas necesarias para la validez del teorema serán formulas posteriormente.

A continuación se enuncia el lema:

Lema: Si en el intervalo $0 \leq s \leq s'$ se cumplen las siguientes suposiciones:

1. La siguiente desigualdad es valida:

$$|Q_{mn}(s)| = |P_{mn}(s)| \leq M_{mn}$$

2. Dentro del intervalo cada función (frecuencia)

$$\frac{d\omega_m}{ds} - \frac{d\omega_n}{ds} = 2\pi\nu_{mn}(s)$$

tiene como máximo N_1 ceros de orden máximo r (esto es para estados degenerados de un sistema mecánico) y en la vecindad del punto cero s_0 la siguiente estimación es válida

$$\frac{1}{|2\pi\nu_{mn}(s)|} < \frac{A}{|s - s_0|^r}$$

3. Las partes real e imaginaria de la función

$$\frac{Q_{mn}(s)}{\nu_{mn}(s)}$$

son monótonas por tramos; el número más grande de segmentos donde son monótonas es N_2 .

Entonces la siguiente estimación es válida:

$$\begin{aligned} & \left| \int_0^{s'} P_{mn}(s) ds \right| = \\ & = \left| \int_0^{s'} Q_{mn}(s) e^{iT(\omega_m - \omega_n)} ds \right| < 4M_{mn}(N_1 + N_2) \sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}} \end{aligned} \quad (3.62)$$

La prueba de esto se dará en la sección §8.

Con este lema se demostrará el teorema adiabático.

Se ejecuta la primera integración (sobre s_1) en todos los términos del conjunto (3.52) reescrito de la siguiente manera

$$\begin{aligned} c_{mn} - \delta_{mn} &= i \int_0^s P ds_2 + i^2 \int_0^s \int_0^{s_2} PP ds_3 ds_2 + \dots + \\ &+ i^k \int_0^s \int_0^{s_k} \dots \int_0^{s_2} PP \dots P ds_k ds_{k-1} \dots ds_1 \end{aligned}$$

y el resultado es estimado con la fórmula (3.62)⁴, entonces

$$\begin{aligned} |c_{mn} - \delta_{mn}| &= \left| \int_0^{s_1} P ds_2 \right| + \left| \int_0^{s_2} \int_0^{s_1} PP ds_3 ds_2 \right| + \\ &+ \dots + \left| \int_0^{s_k} \int_0^{s_{k-1}} \dots \int_0^{s_1} PP \dots P ds_k ds_{k-1} \dots ds_2 \right| < \end{aligned}$$

⁴Se debe tener en cuenta que el elemento de matriz Q_{nn} es cero

$$\begin{aligned}
&< 4(N_1+N_2) \sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}} \left\{ M_{mn} + M_{mn} \int_0^{s_2} P ds_2 + M_{mn} \int_0^{s_3} \int_0^{s_2} PP ds_3 ds_2 + \cdots + \right\} + \\
&\quad + 4(N_1 + N_2) \sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}} \left\{ M_{mn} \int_0^{s_k} \int_0^{s_{k-1}} \cdots \int_0^{s_2} PP \cdots P ds_k ds_{k-1} \cdots ds_2 \right\}
\end{aligned}$$

Hasta aquí se ha estimado sólo una integral sobre un elemento de la matriz P , entonces se sustituye ahora la matriz P por la matriz M y se factoriza la matriz M resultante de la primera integración

$$\begin{aligned}
&< 4(N_1+N_2) \sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}} M_{mn} \left\{ \delta_{mn} + \int_0^{s_2} M_{mn} ds_2 + \int_0^{s_3} \int_0^{s_2} \{M^2\}_{mn} ds_3 ds_2 + \cdots + \right\} + \\
&\quad + 4(N_1 + N_2) \sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}} M_{mn} \left\{ + \int_0^{s_k} \int_0^{s_{k-1}} \cdots \int_0^{s_2} \{M^{k-1}\}_{mn} ds_k ds_{k-1} \cdots ds_2 \right\}
\end{aligned}$$

Si se utiliza la solución conocida para el sistema de ecuaciones integrales (3.55), entonces

$$< 4(N_1+N_2) \sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}} M_{mn} \left\{ \delta_{mn} + \frac{s^1}{1!} M_{mn} + \frac{s^2}{2!} \{M^2\}_{mn} + \cdots + \frac{s^{k-1}}{(k-1)!} \{M^{k-1}\}_{mn} \right\}$$

Al distribuir M_{mn} en la suma

$$< 4(N_1+N_2) \sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}} \left\{ M_{mn} + \frac{s^1}{1!} \{M^2\}_{mn} + \frac{s^2}{2!} \{M^3\}_{mn} + \cdots + \frac{s^{k-1}}{(k-1)!} \{M^{k-1}\}_{mn} \right\}$$

Se obtiene la serie

$$\begin{aligned}
|c_{mn} - \delta_{mn}| &< 4(N_1 + N_2) \sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{s^{k-1}}{(k-1)!} (M^k)_{mn} = \\
&= 4(N_1 + N_2) \sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}} \frac{db_{mn}}{ds}
\end{aligned} \tag{3.63}$$

en la cual $\frac{db_{mn}}{ds}$ es la derivada de la solución

$$b_{mn}(s) = (e^{sM})_{mn} = \delta_{mn} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{s^k}{k!} (M^k)_{mn}$$

de la ecuación

$$\frac{db_{mn}}{ds} = \sum_k M_{mk} b_{kn}$$

Esto es:

$$\frac{d}{ds}(b_{mn}(s)) = \frac{d\delta_{mn}}{ds} + \frac{d}{ds} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{s^k}{k!} (M^k)_{mn} \right)$$

$$\frac{db_{mn}}{ds} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{s^{k-1}}{(k-1)!} (M^k)_{mn}$$

Esta cantidad es finita para valores finitos de s , lo mismo que el factor del radical en (3.63); sin embargo el radical tiende a cero para valores de T infinitos.

De esta manera se ha demostrado el siguiente teorema.

Teorema. *Si la matriz Q está absolutamente acotada y todas las condiciones para s finito y para T infinitamente grande son válidos, la diferencia $c_{mn} - \delta_{mn}$ es del orden de $T^{-\frac{1}{r+1}}$:*

$$c_{mn} = \delta_{mn} + O(T^{-\frac{1}{r+1}}) \quad (3.64)$$

Así, la diferencia tiende a cero cuando T crece infinitamente.⁵

Lo que se sigue directamente de este teorema, es que la probabilidad de transición $n \rightarrow m$ a otro nivel de energía es del orden de la magnitud $T^{-\frac{2}{r+1}}$:

$$|Y_{mn}|^2 = |c_{mn}|^2 = O(T^{-\frac{2}{r+1}}) \quad (3.65)$$

por ejemplo, del orden de $\frac{1}{T^2}$ si ninguna de las frecuencias ν_{mn} se anula en el proceso de la evolución adiabática.

⁵La notación $x = O(\alpha)$ significa que x es del orden de α

Con la relación de normalización

$$\sum_n |Y_{mn}|^2 = 1$$

para la probabilidad $|Y_{mn}|^2$ para que el sistema permanezca en el mismo estado m , obtenemos la expresión

$$|Y_{mm}|^2 = 1 - \sum'_n |Y_{mn}|^2 = 1 - O\left(T^{-\frac{2}{r+1}}\right) \quad (3.66)$$

Esta probabilidad difiere de la unidad por una cantidad del mismo orden de $T^{-\frac{2}{r+1}}$

Hasta ahora se ha considerado como el estado inicial un estado puro, es decir, en el tiempo $t = 0$ el sistema se encuentra en el estado W_n con la probabilidad 1, mientras que todos los demás estados tiene una probabilidad cero. Si, por el contrario, en el tiempo $t = 0$ todos los niveles de energía W_n están poblados con la probabilidad $|b_n|^2$, entonces se determinan las probabilidades $|b'_n|^2$ de diferentes niveles al tiempo t utilizando la fórmula

$$b'_n = \sum_n c_{mn} b_n. \quad (3.67)$$

Por la ecuación (3.64), se obtiene

$$b'_m = b_m + O\left(T^{-\frac{1}{r+1}}\right) \quad (3.68)$$

Y en consecuencia

$$\begin{aligned} |b'_m|^2 &= |b_m|^2 + O\left(T^{-\frac{2}{r+1}}\right) & \text{si } b_m \neq 0 \\ |b'_m|^2 &= O\left(T^{-\frac{2}{r+1}}\right) & \text{si } b_m = 0 \end{aligned} \quad (3.69)$$

Así, la derivación de la probabilidad $|b'_m|^2$ del estado m de su valor inicial $|b_m|^2$ es de diferente orden mientras que valor inicial es cero o diferente de cero, de hecho en el primer caso es generalmente⁶ más pequeño, es decir, de un orden mayor de $\frac{1}{T}$.

⁶Comparar con la ecuación (3.66)

Finalmente, el teorema adiabático puede ser válido en casos en los que no fueron contemplados en esta demostración. Como un ejemplo es posible estudiar el oscilador armónico perturbado⁷ [17] en el que la matriz Q no está restringida y el método considerado en §6 no se aplica.

§8 Demostración del lema

Para estimar la integral

$$\int_0^{s'} Q_{mn}(s) e^{iT(\omega_m - \omega_n)} ds$$

Se representa por comodidad la parte real o imaginaria de la función $Q_{mn}(s)$ por $f(s)$ y la diferencia $\omega_m(s) - \omega_n(s)$ como $g(s)$ y se considera la integral

$$J = \int_0^{s'} f(s) e^{iTg(s)} ds$$

Se divide el intervalo de integración en dos grupos de segmentos denominados E_1 y E_2 , el primer grupo son las vecindades

$$\alpha_k - \epsilon < s < \alpha_k + \epsilon$$

de los ceros α_k de la derivada $g'(s)$ y el segundo grupo (E_2) es la otra parte del segmento $(0, s')$

La integral sobre E_1

$$J_1 = \int_{E_1} f(s) e^{iTg(s)} ds$$

satisface la desigualdad

$$|J_1| < M \int_{E_1} ds = M 2N_1 \epsilon$$

⁷Aquí la energía de perturbación para $x \rightarrow \infty$ diverge como x^2

donde N_1 es el número de ceros α_k de la función $g'(s)$ y M es la valor absoluto máximo de $f(s)$. Ya que si se utiliza la generalización del teorema valor medio para cálculo integral, éste establece que:

Si $F(x)$ es continua en el intervalo $[a, b]$ y $G(x)$ es una función integrable en el intervalo $[a, b]$ que no cambia de signo, entonces existe un valor c dentro del intervalo $[a, b]$ tal que

$$\int_a^b F(x)G(x)dx = F(c) \int_a^b G(x)dx$$

Entonces, J_1 se reescribe como

$$J_1 = f(s) \int_{E_1} e^{iTg(s)} ds$$

Si dentro de este intervalo se encuentran N_1 raíces, entonces

$$J_1 = f(s) \int_{E_1} e^{iTg(s)} ds = N_1 f(s) \int_{\alpha_k - \epsilon}^{\alpha_k + \epsilon} e^{iTg(s)} ds$$

Así J_1 satisface la desigualdad antes establecida

$$|J_1| < |f(s)| \int_{E_1} |e^{iTg(s)}| ds = |f(s)| N_1 \int_{\alpha_k - \epsilon}^{\alpha_k + \epsilon} ds = MN_1(\alpha_k + \epsilon - \alpha_k - \epsilon) = M2\epsilon N_1$$

$$|J_1| < M2\epsilon N_1$$

Se reescribe la integral sobre E_2 de la forma:

$$J_2 = \int_{E_2} \frac{f(s)}{g'(s)} e^{iTg(s)} g'(s) ds$$

En E_2 la función $\frac{1}{g'(s)}$ es finita, mientras que en la vecindad de los ceros α_k podemos estimar:

$$\frac{1}{g'(s)} < \frac{A}{\epsilon^r}$$

Ahora al aplicar el segundo teorema del valor medio para cálculo integral, que estable

$$\int_a^b F(x)G(x)dx = F(a) \int_a^c G(x)dx + F(b) \int_c^b G(x)dx$$

para $a \leq c \leq b$

Con

$$F(s) = \frac{f(s)}{g'(s)}$$

y

$$G(s) = g'(s) \cos[Tg(s)]$$

o

$$G(s) = g'(s) \sin[Tg(s)]$$

para cada uno de los intervalos N_2 donde $\frac{f(s)}{g'(s)}$ es monótona, entonces como

$$\frac{f(s)}{g'(s)} < \frac{MA}{\epsilon^r}$$

es posible reescribe la integral sobre J_2 como sigue:

$$\begin{aligned} J_2 &= \int_{E_2} \frac{f(s)}{g'(s)} g'(s) \{ \cos[Tg(s)] + i \operatorname{sen}[Tg(s)] \} ds \\ &= \frac{f(s)}{g'(s)} \int_{E_2} g'(s) \{ \cos[Tg(s)] + i \operatorname{sen}[Tg(s)] \} ds + \\ &\quad + \frac{f(s)}{g'(s)} \int_{E_2} g'(s) \{ \cos[Tg(s)] + i \operatorname{sen}[Tg(s)] \} ds \end{aligned}$$

Si se cambia de variable $u = Tg(s) \leftrightarrow du = Tg'(s)ds$, entonces

$$\left| \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} g'(s) \cos[Tg(s)] ds \right| = \frac{1}{T} \left| \int_{u_1}^{u_2} \cos(u) du \right|$$

El coseno es una función periódica, por lo que sólo puede tomar valores entre

-1 y 1, por lo tanto el valor máximo de la integral será 2 y se cumple que,

$$\left| \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} g'(s) \cos[Tg(s)] ds \right| = \frac{1}{T} \left| \int_{u_1}^{u_2} \cos(u) du \right| < \frac{2}{T}$$

Se obtiene un resultado similar para la función seno:

$$\left| \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} g'(s) i \operatorname{sen}[Tg(s)] ds \right| = \frac{1}{T} \left| i \int_{u_1}^{u_2} \operatorname{sen}(u) du \right| < \frac{2}{T}$$

Entonces con estos elementos se encuentra que la integral J_2 satisface la desigualdad

$$\begin{aligned} |J_2| &< 2N_2 \left| \frac{f(s)}{g'(s)} \right| \left| \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} g'(s) \{ \cos[Tg(s)] + i \operatorname{sen}[Tg(s)] \} ds \right| = \\ &= 2N_2 \left| \frac{f(s)}{g'(s)} \right| \left\{ \left| \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} g'(s) \cos[Tg(s)] ds \right| + \left| i \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} g'(s) \operatorname{sen}[Tg(s)] ds \right| \right\} \\ |J_2| &< \frac{2N_2 M A}{\epsilon^r} \left\{ \frac{2}{T} + \frac{2}{T} \right\} = \frac{8MA}{\epsilon^r T} N_2 \end{aligned}$$

Al considerar los dos grupos de integración E_1 y E_2 , se obtiene una desigualdad que satisface J ,

$$|J| = |J_1| + |J_2| < 2M\epsilon N_1 + \frac{8MA}{\epsilon^r T} N_2$$

Al factorizar $2M$

$$|J| < 2M \left(N_1 \epsilon + N_2 \frac{4A}{T} \epsilon^{-r} \right)$$

Hasta ahora se ha utilizado un valor de ϵ arbitrario (sólo debe ser pequeño). Ahora se toma el valor de ϵ como:

$$\epsilon = \left(\frac{4A}{T} \right)^{\frac{1}{r+1}},$$

y en la desigualdad se sustituye este valor de ϵ ,

$$|J| < 2M \left(N_1 \left(\frac{4A}{T} \right)^{\frac{1}{r+1}} + N_2 \frac{4A}{T} \left[\left(\frac{4A}{T} \right)^{\left(\frac{1}{r+1} \right)} \right]^{-r} \right)$$

Se multiplican los exponentes del segundo miembro de la derecha:

$$= 2M \left(N_1 \left(\frac{4A}{T} \right)^{\frac{1}{r+1}} + N_2 \frac{4A}{T} \left(\frac{4A}{T} \right)^{\frac{-r}{r+1}} \right)$$

Se suman los exponentes del coeficiente $\frac{4A}{T}$ del segundo término:

$$= 2M \left(N_1 \left(\frac{4A}{T} \right)^{\frac{1}{r+1}} + N_2 \left(\frac{4A}{T} \right)^{1 + \frac{-r}{r+1}} \right)$$

El exponente del segundo término se simplifica como:

$$1 + \frac{-r}{r+1} = \frac{r+1-r}{r+1} = \frac{1}{r+1}$$

Al sustituir en la ecuación anterior se llega a la siguiente expresión:

$$= 2M \left(N_1 \left(\frac{4A}{T} \right)^{\frac{1}{r+1}} + N_2 \left(\frac{4A}{T} \right)^{\frac{1}{r+1}} \right)$$

Se factorizan términos semejantes:

$$= 2M (N_1 + N_2) \left(\frac{4A}{T} \right)^{\frac{1}{r+1}}$$

Por lo tanto

$$|J| < 2M (N_1 + N_2) \sqrt[r+1]{\frac{4A}{T}}$$

La parte imaginaria de $Q_{mn}(s)$ se puede tomar en cuenta multiplicando esta última expresión por un factor de 2, ya que sería el mismo análisis que para la parte real y obtendríamos el mismo resultado del valor absoluto de la parte imaginaria de $Q_{mn}(s)$. Entonces la fórmula (3.62) ha sido demostrada.

Conclusiones

La aproximación adiabática es una herramienta muy útil para resolver problemas en mecánica cuántica, ya que permite obtener resultados que de otra manera serían muy complicados y laboriosos, por esta razón su aplicación es muy amplia. Recientemente se ha destacado como una herramienta importante en las propiedades topológicas de la materia y en la computación cuántica.

Las matemáticas que Born y Fock utilizan en lo que es la primera demostración del teorema adiabático, el cual justifica la aproximación adiabática, son un claro ejemplo del conocimiento matemático que se requiere para el estudio de la mecánica cuántica. Ésta área de las ciencias físicas es una de las más complicadas y abstractas.

El análisis de la demostración permitió al autor de este trabajo reforzar los conocimientos de matemáticas y mecánica cuántica conocidos, mientras que la investigación de los temas desconocidos relacionados con la demostración del teorema adiabático y la aproximación adiabática en mecánica cuántica facultó al autor de nuevos conocimientos. Con esta experiencias se apreció la vasta cantidad herramientas matemáticas que hay detrás de la primera demostración del toerema adiabático y en la mecánica cuántica en general. Además para comprender en su totalidad es necesario una experiencia sólida en cada tema.

Esta investigación ejemplifica el proceso que se lleva acabo por un estudiante o investigador para comprender el inicio de una teoría en el área físico-matemática, y con ello progresar en el campo de interés. Para entender las teorías modernas o aplicaciones en la mecánica cuántica se requiere entender e interpretar todo el conocimiento que se ha forjado.

Bibliografía

1. Ratner, M. A., Ratner, D. (2008). *Nanotechnology: A gentle introduction to the next big idea*. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall Professional Technical Reference.
2. Peña, L. (2014) *Introducción a la mecánica cuántica*. México D.F. Fondo de Cultura Económica. Universidad Nacional Autónoma de México.
3. Picasso, L. E. (2016). *Lectures in quantum mechanics: A two-term course*. New York, Springer
4. Joye, A. (1992) *Geometrical and mathematical aspect of the adiabatic theorem of quantum mechanics*. Ecole Polytechnique Federale de Lausanne
5. Komarov, I., Faddeev L, Khalfin, A., (2004) *V. A. Fock, Selected Works, Quantum mechanics and Quantum Field Theory*,
6. Griffiths, D. J. (2017). *Introduction to quantum mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press
7. Doescher, S. W., Rice, M. H. (1969) *Infinite Square-Well Potential with a Moving Wall*, American Journal of Physics 37, 1246.
8. Sarandy, M. S., et. al. (2004) *Consistency of the Adiabatic Theorem Quantum*, Information Processing, Vol. 3, No. 6, 4.
9. Ambainis, A. Oded, R. (2008) *An Elementary Proof of the Quantum Adiabatic Theorem*, eprint arXiv:quant-ph/0411152

10. Kato, T. (1950) *On the adiabatic Theorem in Quantum Mechanics*. J. Phys. Soc. Jpn. 5, 435
11. Messiah, A. M. L. (1962). *Quantum mechanics, Vol II* Amsterdam: North-Holland.
12. Born, M., Fock, V. (1928) *Beweis des Adiabatenatzes*, Zs. Phys. 51, 165
13. P. Ehrenfest (1916) *Adiabatische Invarianten und Quantentheorie*, Ann. Phys. 51, 327
14. M. Born. *Das Adiabatenatz in der Quantenmechanik*, Zs. Phys. 40, 167, 1926.
15. E. Fermi, F. Persico, (1926) *II principio delle adiabatiche e la nozione de forza vivo nella nuova meccanica ondulatoria*. Lincei Rend (6) 4, 1926.
16. M. v. Laue, Phys. 76, 619.
17. V. Fock, *Über die Beziehung zwischen den Integralen der quantenmechanischen Bewegungsgleichungen und der Schrödinger Wellengleichung*, Addenda, Zs. Phys. 49, 323, 1928
18. V. Fock, (1928) *Verallgemeinerung und Lösung der Diracschen statischen Gleichung*, Zs. Phys. 49.
19. W. L. Hart, (1917) Amer. Journ. 39.
20. J. Schur, (1911) *Restricted Bilinear Forms*, Crelles Journ. 140.