

Introducció elemental a la periodicitat temporal, el teorema de floquet, amb alguns exemples

Cristalls de temps

Periodicitat en l'espai i el temps

Josep Planelles

1. Motivació

Si un sistema que és pertorbat per un camp extern periòdic en el temps presenta una simetria de translació temporal discreta. Els conceptes de quasienergia i estats de Floquet permeten descriure aquesta periodicitat temporal. Generalment, l'espectre quasienergètic d'un sistema localitzat (sistema atrapat per un potencial) no mostra cap estructura de bandes. Però el material cristal·lí sota un impuls temporal periòdic, presenta un espectre quasienergètic amb estructura de bandes en l'espai de quasimoments, resultat de la combinació de les periodicitats. Fins i tot poden observar-se de vegades nous tipus de materials exòtics, com ara l'anomenat aïllant topològic de Floquet (veure e.g., Linder et al. *Nature Physics* 7(2011) 490–495).

L'hamiltonià de qualsevol sistema depèn de dos variables conjugades, moments i coordenades, que defineixen l'espai de fases. Doncs és possible crear una simetria discreta en aquest espai de fases. Això comporta transformacions que mesclen impuls i coordenades, però deixen inalterat l'hamiltonià. Parlem doncs d'un cristall a l'espai de fases (veure e.g. Guo *PRL* 111 (2013) 205303).

Una de les principals raons per les quals els sistemes quàntics pertorbats periòdicament (Floquet) han cridat molta atenció és perquè la seua dinàmica es pot descriure de manera eficient amb un Hamiltonià de Floquet **independent del temps**. Els sistemes tancats de Floquet, situats a la frontera entre l'equilibri i el no equilibri, representen un terreny de joc natural per desenvolupar teories pioneres per als fenòmens de la física fora de l'equilibri.

Una analogia per entendre la doble periodicitat i la reducció “espontània” de simetria: metà sobre grafit

(<https://pubs.aip.org/physicstoday/article/71/9/40/809716/Time-crystals-in-periodically-driven-systemsWhen>)

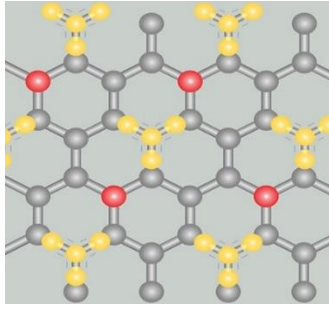
Comencem fent un aclariment, potser trivial: quan un líquid o un gas es refreda i forma un cristall, una cosa notable es produeix: la solució emergent de les lleis de la física, és a dir, el cristall, mostra menys simetria que les pròpies lleis. Com la reducció de simetria es produeix només per una disminució de la temperatura, sense cap intervenció exterior,¹ podem dir que en formar-se un cristall, el material trenca "espontàniament" la simetria de translació espacial (i mostra així menys simetria que les pròpies lleis que regeixen la seua existència). És en aquest sentit en el que cal entendre el concepte de *reducció espontània de simetria*.

Les característiques que fan que els cristalls de temps² siguin realment especials poden ser difícils d'apreciar. Per il·lustrar l'essència d'un cristall de temps, mostrem una analogia espacial basada en la superfície del grafit, el familiar al·lòtrop cristal·lí hexagonal del carboni. Utilitzant aquesta analogia, explorarem tres conceptes clau: la ruptura d'una simetria translacional discreta, l'ordenació espacial i temporal de llarg abast i la importància de les interaccions de molts cossos per establir la simetria trencada.

A la figura següent mostrem que, a causa de la disposició subjacent dels àtoms de carboni, la superfície del grafit trenca la simetria de translació contínua de l'espai restringint-la a la simetria de translació espacial discreta d'una xarxa hexagonal (color gris en la figura).

¹ Excepte la cessió de calor que propicia la disminució de la temperatura....

² Ens referim a cristalls de temps amb període finit i.e., amb periodicitat discreta. Si el període se fa zero tenim homogeneïtat temporal, estat estacionari i conservació d'energia.



Imaginem ara que molècules de metà (grogues) estan absorbides a la superfície. A temperatures superiors a 60K, les molècules de metà formen un líquid bidimensional a la superfície del grafit. A mesura que el sistema es refreda, el metà es solidifica. Les molècules de metà solidificades no poden construir una xarxa com la xarxa de grafit subjacent. Depenent de la seva densitat, el metà pot cristal·litzar en una determinada subxarxa: potser l'ocupada a la figura, o potser la subxarxa alternativa indicada en roig. En escollir espontàniament una subxarxa, el metà adopta una disposició de simetria inferior a la de la xarxa hexagonal del grafit: trenca una simetria de translació espacial ja discreta.

Ara considerem l'anàleg del temps. En introduir una pertorbació periòdica en el temps sobre un sistema, passem d'una simetria de translació temporal contínua a una discreta. De manera semblant al patró de repetició d'àtoms de carboni del grafit en l'espai, la pertorbació periòdica introdueix un patró repetitiu en el temps: l'hamiltonià del sistema torna a ser el mateix després de cada període. La ruptura d'aquesta simetria discreta de translació del temps es manifestaria com el comportament del sistema "cristal·litzant" en una "subxarxa" del temps; un exemple seria poder detectar un observable la resposta del qual té diferent periodicitat que la unitat subjacent.

La presència d'ordre de rang llarg distingeix estats simetria reduïda (cristall) d'estats sense reducció de simetria (líquids). Per diagnosticar l'estat cristal·lí de les molècules de metà adsorbides, és crucial assegurar-se que les molècules prefereixen la mateixa subxarxa en regions llunyanes i en diferents moments, és a dir, que tenen un ordre espacial i temporal de llarg abast. La mateixa cosa ha de passar amb el cristall de temps.

L'ordre de llarg abast que caracteritza l'estat cristal·lí, trencat per la simetria de les molècules de metà adsorbides, requereix la presència d'interaccions: només mitjançant la repulsió entre una molècula de metà i la seva veïna, i després entre aquesta i la seva veïna següent, tot el sistema pot assegurar-se que totes les molècules prefereixen la mateixa subxarxa. Si una fluctuació posa les molècules d'alguna regió en la subxarxa equivocada, el desajust de la subxarxa resultant costa energia. Si el sistema està prou fred, aquest cost energètic provocarà fluctuacions posteriors per tornar a posar la regió desalineada en la subxarxa preferida.

Aquest reordenament depèn críticament de la presència d'interaccions. Per tant, s'espera que l'ordre cristal·lí temporal no trivial no resulte de la dinàmica de les partícules individuals, sinó de la sincronització col·lectiva de molts graus de llibertat que interactuen fortament.

2. La partícula lliure

Considerem un espai-temps homogeni. És a dir no hi ha potencials. En aquest espai la dinàmica de les partícules (no relativistes) ve regida per l'equació (on considerem $m = \hbar = 1$):

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}$$

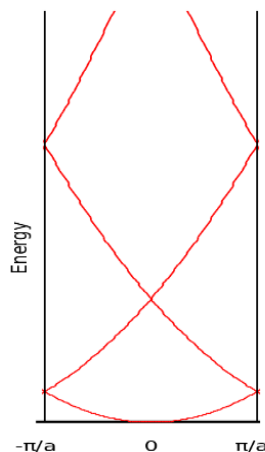
Aquesta equació permet separar variables, $\Psi(x, t) = \varphi(x)f(t)$. Aleshores, si imposem la uniformitat en l'espai-temps, cal que la funció normalitzada siga tal que $|\Psi(x, t)|^2 = 1$, cosa que implica necessàriament $\varphi(x) = e^{i u(x)}$ i $f(t) = e^{i g(t)}$ amb $u(x), g(t)$ reals.

La substitució en l'equació, $-\frac{1}{2} \frac{1}{\varphi} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = i \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = \varepsilon$, on ε real, permet comprovar que $g(t) = \varepsilon t$.

Finalment, de l'equació d'autovalors $-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 e^{i u(x)}}{\partial x^2} = -\frac{1}{2} (i u'' - (u')^2) e^{i u(x)} = \varepsilon e^{i u(x)}$, en ser $u(x)$ real concloem que $u''(x) = 0$, per tant $u' = k$ que vol dir $u = kx + k'$. Per tant, excepte una fase trivial constant, $\Psi(x, t) = e^{i(kx - \varepsilon t)}$.

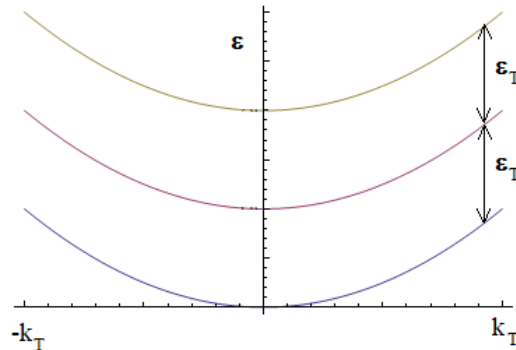
Cal remarcar d'aquesta funció (ona plana) que la densitat de probabilitat és constant en l'espai-temps, reflex de la uniformitat d'aquest espai-temps.

Imaginem que trenquem l'homogeneïtat de l'espai amb un potencial periòdic $V(x) = V(x + a)$. Per exemple, $V(x) = V_0 \cos \frac{2\pi}{a} x = V_0 \cos k_a x$, però ho fem en el límit $V_0 \rightarrow 0$. Açò és el que s'anomena xarxa buida, que no pertorba les ones planes però les re-etiqueta en base a les irreps del subgrup de simetria translacional T_a en el qual φ_k i $\varphi_{k + \frac{2\pi n}{a}}$ amb $n = \pm 1 \pm 2 \pm 3 \dots$ són base de la mateixa irrep, de manera que $\varepsilon(k)$ i $\varepsilon(k + \frac{2\pi n}{a})$, que tenen valors diferents, se considera que formen part de diferents bandes definides en l'interval $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$ de la xarxa recíproca, de manera que: $\varepsilon_0(k) = \varepsilon(k)$, $\varepsilon_n(k) = \varepsilon(k + \frac{2\pi n}{a})$. La representació conjunta de les $\varepsilon_n(k)$ en aquest interval, que representa ones viatgeres en direcció a dreta o esquerra (segons el signe de k) equival a enviar la paràbola $\varepsilon(k)$ definida entre més i menys infinit a l'anomenada zona reduïda o primer zona de Brillouin $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$.



Alternativament, podem mantenir l'espai homogeni i trencar la homogeneïtat del temps, per exemple amb un potencial $V(t) = V_0 \cos \frac{2\pi}{T} t = V_0 \cos \varepsilon_T t$, també en el límit $V_0 \rightarrow 0$. Ara trobem la xarxa buida en la variable temps, que vol dir fer equivalents, en el sentit de ser base

de la mateixa irrep, a φ_ϵ i $\varphi_{\epsilon + \frac{2\pi n}{T}}$. Però en ser l'espai homogeni hi viatgen ones planes amb energia $\epsilon = \epsilon(k) = \frac{k^2}{2}$. Per tant, si $\epsilon = \epsilon_T + \Delta$, aleshores φ_ϵ i $\varphi_{\epsilon + \Delta}$ són equivalents i, a partir de $\epsilon = \epsilon(k)$, trobem que $k_T = \pm\sqrt{2\epsilon_T}$. Aleshores, si representem $\epsilon(k)$ en $-k_T \leq k \leq k_T$ resulta:



que no és una estructura típica de bandes.

Tornem sobre el cas anterior on hi havia homogeneïtat de temps. Si fem que $V_0 \neq 0$ aleshores se produeix la difracció de Bragg que vol dir que se trenca la degeneració en els extrems de la cel·la de la xarxa recíproca i apareix un gap que separa les bandes.

En cas que el potencial sols afecta el temps, $-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} = V(t) + i\frac{\partial}{\partial t}$, encara podem separar variables i, a més, l'homogeneïtat de l'espai fa que $|\varphi(x)|^2 = 1$, i.e. $\varphi(x) = e^{iu(x)}$ que, tornant a l'equació vol dir: $\varphi(x) = e^{ikx}$ i per tant $\epsilon_k = \frac{k^2}{2}$. Aleshores,

$$\epsilon_k = \frac{k^2}{2} = V(t) + i\frac{d \ln f(t)}{dt} \rightarrow f_k(t) = e^{i \int_0^t [\epsilon_k - V(t')] dt'}$$

Si $V(t) = V(t + nT)$, tenim $f_{nk}(t) = e^{i \int_0^t [\epsilon_k - V_n(t')] dt'} = e^{i \int_0^t [\epsilon_{nk}(t')] dt'} = e^{i F_{nk}(t)}$, amb $F_{nk}(t) = F_{nk}(t + T)$ i per tant $f_{nk}(t) = f_{nk}(t + T)$. La funció completa queda doncs en la forma $\Psi(x, t) = e^{i[kx - F_{nk}(t)]}$ però les paràboles de la xarxa temporal buida se deformen.

Finalment, a l'apartat següent, considerarem un potencial mixt, periòdic en el temps (problema de Volkov), la realització típica del qual és la interacció de la radiació i la matèria.

2.El problema de Volkov

Considerem una partícula lliure en presència d'una radiació, la component elèctrica de la qual és $E = E_0 \cos \omega t$. El camp electromagnètic deriva de dos potencials, el potencial vector $\vec{A}(x, t)$ i el potencial escalar $\phi(x, t)$. El camp elèctric anterior pot originar-se a partir d'un potencial vector $A = \frac{E_0}{2} \sin \omega t$ i un potencial escalar $\phi = 0$ (aquest gauge és anomenat de velocitat³). Recordem que, en termes dels potencials, a partir de les equacions de Maxwell, el camp magnètic se calcula amb la fórmula $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ i el camp elèctric amb $\vec{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$. Per tant, en aquest cas en que el potencial escalar és zero i el potencial vector és independent de les coordenades espacials, $\vec{B} = 0$ i $E = -\frac{\partial A}{\partial t} = E_0 \cos \omega t$, com volíem que fos.

³ Adonem-nos que aquest gauge és també de Coulomb, atès que les derivades espacials d'una funció purament temporal són zero: $\nabla \cdot \vec{A}(t) = 0$.

Assumirem per simplificar unes unitats tal que $m = \hbar = 1$. Si anomenem $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(x)$ a l'hamiltonià del sistema en absència de radiació i \hat{H} a l'hamiltonià en presència d'aquesta, la interacció introdueix el canvi: $\hat{H}_0(p) \rightarrow \hat{H} = \hat{H}_0(p + A) + \phi$. En aquest cas $\phi = 0$ i $A = A(t)$. En el cas de la partícula lliure en que $V(x) = 0$ escrivim doncs,

$$\hat{H} = \frac{[\hat{p} + A(t)]^2}{2} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int} \rightarrow \hat{H}_{int} = A \cdot \hat{p} + \frac{A^2}{2}$$

Però aquest no és l'únic gauge que podem emprar, atès que si Λ és una funció escalar real i diferenciable podem definir $A' = A + \nabla\Lambda$ i $\phi' = \phi - \frac{\partial\Lambda}{\partial t}$. És immediat adonar-se que se genera el mateix camp magnètic amb A' que amb el potencial vector A atès que $\nabla \times \nabla\Lambda = 0$, i també el mateix camp elèctric perquè: $-\nabla\phi' = -\nabla\phi + \frac{\partial\nabla\Lambda}{\partial t}$ i $-\frac{\partial A'}{\partial t} = -\frac{\partial A}{\partial t} - \frac{\partial\nabla\Lambda}{\partial t}$, per tant:

$$\vec{E}' = -\nabla\phi' - \frac{\partial\vec{A}'}{\partial t} = -\nabla\phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} = \vec{E}$$

En particular, podem triar $\Lambda = -\vec{A}(t) \cdot \vec{R} = -A(t)(x + y + z)$. Per tant tenim: $\nabla\Lambda = -\vec{A}(t)$ i $-\frac{\partial\Lambda}{\partial t} = \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \cdot \vec{R}$, cosa que implica que $\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\Lambda = \vec{A} - \vec{A} = 0$ i $\phi' = \phi - \frac{\partial\Lambda}{\partial t} = 0 + \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \cdot \vec{R} = \vec{E}_0 \cos\omega t \cdot \vec{R} = x E_0 \cos\omega t$ (assumint el camp en direcció x).

Amb aquest gauge ($\vec{A} = 0$, $\phi = x E_0 \cos\omega t$), la inclusió del camp en l'hamiltonià condueix a $\hat{H} = \hat{H}_0(p + A) + \phi = \frac{\hat{p}^2}{2} + x E_0 \cos\omega t$, i.e., $\hat{H}_{int} = x E_0 \cos\omega t$.

Cal dir que el càlcul analític (o numèric amb suficient precisió) amb un o altre gauge ha de conduir als mateixos resultats.

Considerem el gauge $\hat{H} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + x E_0 \cos\omega t$. Comprovem que la funció:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i(p+A)x} e^{-\frac{i}{2} \int_0^t (p+A)^2 dt'} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i(p+A)x} e^{-i \int_0^t \varepsilon_p(t') dt'}, \quad \varepsilon_p(t) = \frac{1}{2} [p + A(t)]^2$$

amb $A = \frac{E_0}{2} \sin\omega t$, és solució de $-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}$. En efecte:

$$\text{per una banda: } -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + x E_0 \cos\omega t \Psi(x, t) = \left(\frac{1}{2} [p + A(t)]^2 + x E_0 \cos\omega t \right) \Psi(x, t)$$

$$\text{per l'altra}^4: i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = (x \dot{A}(t) + \frac{1}{2} [p + A(t)]^2) \Psi(x, t) = (x E_0 \cos\omega t + \frac{1}{2} [p + A(t)]^2) \Psi(x, t)$$

Considerem ara l'altre gauge, $\hat{H} = \frac{(\hat{p}+A)^2}{2}$, amb vector $A = \frac{E_0}{2} \sin\omega t$. Explicitem l'hamiltonià:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - i A \frac{\partial}{\partial x} + \frac{A^2}{2}$$

Comprovem que la funció $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i p x} e^{-\frac{i}{2} \int_0^t (p-A(t'))^2 dt'}$ és solució de l'equació de Schrödinger. Tenim: $-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2} \Psi(x, t)$; $i A \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} = -A(t)p \Psi(x, t)$.

Per tant, $\hat{H} \Psi(x, t) = \left[\frac{p^2}{2} - A(t)p + \frac{A^2}{2} \right] \Psi(x, t)$ i també: $i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} [p - A(t)]^2 \Psi(x, t)$.

⁴ On usem la notació: $\dot{A} = \frac{dA}{dt}$

Si reordenem la funció, aquesta pot estar escrita en la forma:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\frac{p^2}{2}t} e^{-i[p x - \int_0^t p A(t') dt' + \frac{1}{2} \int_0^t A(t')^2 dt']} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\epsilon t} e^{-i u(x, t)}$$

amb $u(x, t)$ periòdica per ser A periòdica.

També, la funció que hem trobat per a l'altre gauge, $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i(p+A)x} e^{-i \int_0^t \epsilon_p(t') dt'}$, amb $A = \frac{E_0}{2} \sin \omega t$ i $\epsilon_p(t) = \frac{1}{2} [p + A(t)]^2$ és formalment una exponencial d'una funció periòdica amb el temps, per ser A periòdica.

És interessant integrar $\epsilon_p(t)$ en un període. Amb $\int_0^T \sin \omega t dt = 0$ i $\int_0^T \sin^2 \omega t dt = \frac{T}{2}$:

$$\frac{1}{T} \int_0^T \epsilon_p(t) dt = \frac{1}{2} \frac{1}{T} \int_0^T [p^2 + 2p \frac{E_0}{\omega} \sin \omega t + \frac{E_0^2}{\omega^2} \sin^2 \omega t] dt = \frac{p^2}{2} + \frac{E_0^2}{4\omega^2} \equiv \bar{\epsilon}_p$$

on $\bar{\epsilon}_p$ pot representar l'energia mitjana del moviment periòdic.

Si reescrivim l'equació de Schrödinger en la forma: $(\hat{H} - i \frac{\partial}{\partial t}) \Psi(x, t) = \hat{\mathcal{H}} \Psi(x, t) = 0$ amb $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i(p+A)x} e^{-i \int_0^t \epsilon_p(t') dt'}$, podem comprovar que $u(x, t) = e^{-i(p+A)x}$, que és periòdica, $u(x, t) = u(x, t + T)$, és autofunció de l'operador $\hat{\mathcal{H}}$. En efecte,

$$\hat{\mathcal{H}} u(x, t) = \left(\hat{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) e^{-i(p + \frac{E_0}{\omega} \sin \omega t)x} = \frac{1}{2} \left(p + \frac{E_0}{\omega} \sin \omega t \right)^2 e^{-i(p+A)x} = \epsilon_p(t) e^{-i(p+A)x}$$

De manera que $\frac{1}{T} \int_0^T \epsilon_p(t) dt = \bar{\epsilon}_p = \frac{p^2}{2} + \frac{E_0^2}{4\omega^2}$ és l'energia mitjana associada amb $\hat{\mathcal{H}}$.

És clar que $\epsilon_p(t)$ no és constant i per tant no podem parlar estrictament d'autovalor... però si tornem sobre la integral:

$$\begin{aligned} \int_0^t \epsilon_p(t') dt' &= \frac{1}{2} \int_0^t [p^2 + 2p \frac{E_0}{\omega} \sin \omega t' + \frac{E_0^2}{\omega^2} \sin^2 \omega t'] dt' \\ &= \frac{p^2}{2} t - \frac{pE_0}{\omega^2} (\cos \omega t - 1) + \frac{E_0^2}{4\omega^2} \left(t - \frac{\sin 2\omega t}{2\omega} \right) \\ &= \frac{pE_0}{\omega^2} + \left(\frac{p^2}{2} + \frac{E_0^2}{4\omega^2} \right) t - \frac{pE_0}{\omega^2} \cos \omega t - \frac{E_0^2}{8\omega^2} \sin 2\omega t \end{aligned}$$

observem que la integral és igual a un terme constant, un terme lineal amb t i un terme que és una funció periòdica de t : $c + \bar{\epsilon}_p t + w(t)$, cosa que permet escriure la funció completa en la forma:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i(p+A)x} e^{-i \int_0^t \epsilon_p(t') dt'} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i c} e^{-i[(p+A)x + w(t)]} e^{-i \bar{\epsilon}_p t} \equiv u(x, t) e^{-i \bar{\epsilon}_p t}$$

és a dir, el producte d'una funció periòdica en el temps i una exponencial lineal amb ell, per tant, com $\hat{\mathcal{H}} \Psi(x, t) = (\hat{H} - i \frac{\partial}{\partial t}) \Psi(x, t) = 0$, també:

$$\left(\hat{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) u(x, t) e^{-i \bar{\epsilon}_p t} = e^{-i \bar{\epsilon}_p t} \hat{H} u(x, t) + \left(-\bar{\epsilon}_p u(x, t) e^{-i \bar{\epsilon}_p t} - i e^{-i \bar{\epsilon}_p t} \frac{\partial u}{\partial t} \right) = 0$$

$$\rightarrow \bar{\epsilon}_p u(x, t) e^{-i \bar{\epsilon}_p t} = e^{-i \bar{\epsilon}_p t} \left(\hat{H} u(x, t) - i \frac{\partial u}{\partial t} \right) = e^{-i \bar{\epsilon}_p t} \hat{\mathcal{H}} u(x, t) \rightarrow \boxed{\hat{\mathcal{H}} u(x, t) = \bar{\epsilon}_p u(x, t)}$$

amb $\bar{\varepsilon}_p$ una veritable constant i per tant, ara podem parlar estrictament d'autovalor.

Doncs bé, aquest no és més que un cas particular del teorema de Floquet que enunciem i comentem l'apartat següent.

3. Periodicitat temporal i teorema de Floquet

Si un hamiltonià és periòdic amb el temps $\hat{H}(t+T) = \hat{H}(t)$ i la periodicitat està en el potencial multiplicatiu, e.g., $V = \mu E_0 \cos \omega t$, aleshores $|\Psi(x, t+T)|^2 = |\Psi(x, t)|^2 \rightarrow \Psi(x, t+T) = e^{i\chi} \Psi(x, t)$ amb $-\pi \leq \chi \leq \pi$. Si escrivim $\chi = \varepsilon T$, aleshores $-\frac{\pi}{T} \leq \varepsilon \leq \frac{\pi}{T}$. Per tant, podríem procedir a la integració numèrica de $\hat{H}\Psi = i \frac{\partial \Psi}{\partial t}$ per a cada $\varepsilon \in [-\frac{\pi}{T}, \frac{\pi}{T}]$ amb les condicions frontera $\Psi_{i,n+1} = e^{i\varepsilon T} \Psi_{i,1}$, $\Psi_{i,-1} = e^{-i\varepsilon T} \Psi_{i,n-1}$. Alternativament, el teorema de Floquet, $\Psi(x, t) = e^{i\varepsilon t} u(x, t)$ amb $u(x, t+T) = u(x, t)$, transforma l'equació de Schrödinger en una equació d'autovalors amb autofuncions periòdiques:

$$\hat{\mathcal{H}}u(x, t) = \left(\hat{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) u(x, t) = \varepsilon u(x, t)$$

Podem dir que el teorema de Floquet és l'anàleg temporal del teorema de Bloch de xarxes espacials, $\Psi(x) = e^{-ikx} u(x)$, de manera que l'equació inicial $\hat{H}_0 \Psi = \varepsilon \Psi$ amb la condició frontera $\Psi(x+a) = e^{-ika} \Psi(x)$ se transforma en l'equació $\hat{H}_{kp} u_k(x) = \varepsilon_k u_k(x)$ amb la condició frontera $u(x+a) = u(x)$, on, per a massa unitat, $\hat{H}_{kp} = \hat{H}_0 + kp + \frac{k^2}{2}$.

Però en mirar el teorema de Floquet, $\Psi(x, t) = e^{i\varepsilon t} u(x, t)$, amb $u(x, t+T) = u(x, t)$ de manera que $\hat{\mathcal{H}}u = \left(\hat{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) u = \varepsilon u$, trobem una diferència fonamental amb Bloch: mentre que en xarxes espacials la condició frontera (k) desapareix de la funció i apareix en l'hamiltonià $kp(k)$, en el cas temporal la condició frontera (ε) desapareix de la funció però no entra en $\hat{\mathcal{H}} = \left(\hat{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)$, de manera que encara que $-\frac{\pi}{T} \leq \varepsilon \leq \frac{\pi}{T}$, aquest paràmetre no apareix en $\hat{\mathcal{H}}$ ni en la condició frontera de $u(x, t)$, i no hi ha manera de fixar ε i resoldre l'equació d'autovalors equivalents (pertanyents cadascú a una banda sobre la mateixa posició ε de la xarxa recíproca). En principi trobaríem tots els autovalors i a posteriori podríem reconèixer que $\varepsilon' = \varepsilon + \frac{2\pi n}{T}$ són equivalents. En general l'espectre de quasi-energies ε de sistemes localitzats no mostren estructura de bandes, encara que en el cas de materials cristal·lins, la combinació de les dues periodicitats espacial i temporal, si que pot presentar estructura de bandes.⁵

3.1 El problema de les diferències finites amb el temps

En diferències finites substituïm diferencials per increments finits. Considerem el cas simple $\hat{H}(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + x E_0 \cos \omega t$. Des de l'equació $\hat{H}(x, t) \Psi(x, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)$, podem escriure que: $\Psi(x, t+dt) = [1 - i dt \hat{H}(x, t)] \Psi(x, t)$, que en ser dt infinitesimal i poder rigorosament rebutjar $(dt)^k$ en front del diferencial dt si $k = 2, 3, \dots$, podem reescriure l'expressió anterior en la forma: $\Psi(x, t+dt) = e^{-i dt \hat{H}(x, t)} \Psi(x, t)$. Considerem un increment finit $\Delta t = ndt$, on n és un nombre natural molt gran. Podem escriure:

⁵ Guo et al., PRL 111 (2013) 205303.

$$\Psi(x, t + \Delta t) = \prod e^{-i dt \hat{H}(x, t+kdt)} \Psi(x, t) = e^{-i \int_t^{t+\Delta t} \hat{H}(x, t) dt} \Psi(x, t)$$

Tot seguit calculem la integral:

$$\int_t^{t+\Delta t} \hat{H}(x, t) dt = \int_t^{t+\Delta t} \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + xE_0 \cos \omega t \right) dt = -\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + xE_0 [\sin \omega(t + \Delta t) - \sin \omega t].$$

Atès que, excepte si Δt és infinitesimal, $\sin \omega(t + \Delta t) - \sin \omega t$ és diferent de $\Delta t \cos \omega t$, no podem expressar la integral en la forma $\Delta t \hat{H}(x, t)$, cosa que permetria dir:

$$\Psi(x, t + \Delta t) = e^{-i \Delta t \hat{H}(x, t)} \Psi(x, t) \approx [1 - i \Delta t \hat{H}(x, t)] \Psi(x, t) \rightarrow \hat{H}(x, t) \Psi(x, t) \approx \frac{i}{\Delta t} [\Psi(x, t + \Delta t) - \Psi(x, t)],$$

que és el punt de partida per a poder aplicar diferències finites. La dificultat deriva de que $[\hat{H}(x, t), \hat{H}(x, t + \Delta t)] \neq 0$. Per aquest motiu la integració amb diferències finites de l'equació dependent del temps no és estable a canvis en la discretització Δt : els resultats canvien en canviar el pas d'integració, excepte per a passos molt petits, on $\hat{H}(x, t)$ i $\hat{H}(x, t + \Delta t)$ pràcticament commuten perquè $[\sin \omega(t + \Delta t) - \sin \omega t] \approx \Delta t \cos \omega t$.⁶ En altres paraules, si podem, millor evitar la pesada integració numèrica temporal.

4. Operadors d'evolució temporal $U(t-t_0)$ i l'operador G (independent del temps)

L'operador T_a que trasllada "a" la coordenada "x" és l'exponencial de l'operador associat amb la variable conjugada "p": $T_a = e^{ia\hat{p}} = e^{a \frac{d}{dx}}$, $\rightarrow T_a u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a^n \frac{d^n u}{dx^n} = u(x + a)$.

L'operador $U(t_0)$ que trasllada "t₀" la coordenada "t" és doncs l'exponencial $U(t_0) = e^{t_0 \frac{d}{dt}}$ que, de manera anàloga, $U(t_0)u(t) = u(t + t_0)$.

L'equació de Schrödinger, $(\hat{H} - i \frac{\partial}{\partial t}) \Psi = 0$, permet escriure $U(t_0) = e^{t_0 \frac{d}{dt}} = e^{-it_0 \hat{H}}$. Ara bé, si l'hamiltonià és funció també del temps, l'única manera de garantir que una evolució temporal finita siga el resultat d'una successió d'evolucions temporal infinitesimals **ordenades en el temps** és sumant ordenadament les evolucions infinitesimals i per això, en general cal escriure $U(t) = e^{-i \int_0^t \hat{H}(t') dt'}$. Si \hat{H} és independent del temps podem integrar i trobar la fórmula anterior $U(t) = e^{-i\hat{H}t}$. Més detalls en aquest peu.⁷

Fem notar que $U(t)$ és també solució de l'equació de Schrödinger:

$$i \frac{\partial U(t)}{\partial t} = i \frac{\partial}{\partial t} e^{-i \int_0^t \hat{H}(t') dt'} = i(-i) \hat{H}(t) e^{-i \int_0^t \hat{H}(t') dt'} = \hat{H}(t) U(t) \rightarrow \boxed{i \frac{\partial}{\partial t} U(t) = \hat{H}(t) U(t)}$$

Si resulta que l'hamiltonià és periòdic, $\hat{H}(t + T) = \hat{H}(t)$, aleshores,

$$U(t + T) = U(t + T, T) U(T) = e^{-i \int_T^{t+T} \hat{H}(t') dt'} e^{-i \int_0^T \hat{H}(t') dt'}$$

Si anomenem $\hat{G} = \frac{1}{T} \int_0^T \hat{H}(t) dt$, on remarquem que \hat{G} és independent del temps, com que la periodicitat d' \hat{H} fa que: $\int_T^{t+T} \hat{H}(t') dt' = \int_0^t \hat{H}(t') dt'$, trobem que $\boxed{U(t + T) = U(t) e^{-i\hat{G}T}}$.

Aleshores, si anomenem $P(t) = U(t) e^{i\hat{G}t}$ i definim $\Psi(t) = P(t) \tilde{\Psi}(t)$ tenim:

⁶Vegeu secció 2 de <http://www3.uji.es/~planelle/APUNTS/QQ/time.pdf>

⁷ Més detalls en: <http://www3.uji.es/~planelle/APUNTS/QQ/time.pdf>

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \rightarrow i \frac{\partial}{\partial t} [U e^{i\hat{G}t} \tilde{\Psi}] = \hat{H} U e^{i\hat{G}t} \tilde{\Psi} \rightarrow U \hat{G} e^{i\hat{G}t} \tilde{\Psi} = U e^{i\hat{G}t} i \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial t}$$

Com $\hat{G} e^{i\hat{G}t} = e^{i\hat{G}t} \hat{G}$ trobem finalment:

$$\boxed{i \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial t} = \hat{G} \tilde{\Psi}}$$

on $\hat{G} = \frac{1}{T} \int_0^T \hat{H}(t) dt$, és independent del temps i actua sobre les funcions $\tilde{\Psi} = P(t)^{-1} \Psi$, amb $P(t)^{-1} = e^{-i\hat{G}t} U(-t)$, de manera semblant a com ho fa \hat{H} sobre les funcions transformades Ψ .

Podem escriure les autofuncions $u(x, t)$ de \hat{G} , $\hat{G}u(x, t) = \varepsilon u(x, t)$, en termes de les autofuncions $\varphi_i(x, t)$ d' $\hat{H}(t)$: $u(x, t) = \sum c_i \varphi_i$. Aleshores,

$$\langle u | \hat{H} | u \rangle = \sum_{i,j} c_i^* c_j \langle \varphi_i | \hat{H} | \varphi_j \rangle = \sum_i |c_i|^2 \varepsilon_i(t) = \varepsilon(t)$$

mentre que: $\langle u | \hat{G} | u \rangle = \varepsilon_G = \langle u | \frac{1}{T} \int_0^T \hat{H}(t) dt | u \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \langle u | \hat{H}(t) | u \rangle dt = \frac{1}{T} \int_0^T \varepsilon(t) dt = \bar{\varepsilon}$

Els autovalors de \hat{G} representen energies mitjanes. En ser \hat{H} funció del temps, aleshores $\varepsilon(t)$ no és constant, però en ser \hat{H} periòdic amb el temps $\bar{\varepsilon}$ sí que ho és.

5. Un primer exemple

Si ocultem la dependència amb les coordenades podem escriure formalment l'equació de Schrödinger per a un sistema en presència de radiació en la forma simple:

$$(a + b \cos \omega t) f(t) = i \frac{\partial f}{\partial t} \rightarrow f(t) = e^{-iat} e^{-i \frac{b}{\omega} \sin \omega t}$$

com se pot comprovar per substitució.

En general, si tenim $[a + g(t)]f(t) = i \frac{\partial f}{\partial t}$, aleshores tenim que $f(t) = e^{-iat} e^{-i \int_0^t g(t') dt'}$.

Considerem un primer exemple d'un espín $|\alpha\rangle$ en presència d'un camp magnètic uniforme \vec{B} que el fa girar amb una freqüència constant ω_0 . L'energia és $E = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}$ o també $E = \frac{\hbar}{2} \omega_0$. Si escrivim $\hat{H}|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2} \omega_0 |\alpha\rangle$ podem formalment escriure $\hat{H} = \frac{\hbar}{2} \omega_0 \sigma_z$ amb $\sigma_z = \frac{2}{\hbar} \hat{S}_z$.

Si ara apliquem un camp oscil·lant perpendicular, $\hat{H}_{int} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_\perp$, podem escriure:

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2} \omega_0 \sigma_z - \frac{\mu B}{2} (\sigma_x \cos \omega t + \sigma_y \sin \omega t).$$

Podem efectuar la projecció de l'Hamiltonià sobre el subespai generat per aquest vector $|\alpha\rangle$ si procedim a integrar les coordenades no temporals amb $|\alpha\rangle$. Obtenim:

$$\hat{H}_t = \frac{\hbar}{2} \omega_0 \langle \alpha | \sigma_z | \alpha \rangle - \frac{\mu B}{2} (\langle \alpha | \sigma_x | \alpha \rangle \cos \omega t + \langle \alpha | \sigma_y | \alpha \rangle \sin \omega t) = \frac{\hbar}{2} \omega_0$$

que no és funció del temps. De fet, és un escalar constant. La funció completa és bàsicament la fase $e^{i\varepsilon t}$, amb $\varepsilon = \frac{\hbar}{2} \omega_0$. La projecció ha sigut tan severa (sols un estat, considerant la resta remots, que no poden interaccionar amb ell), que hem impedit altra solució que l'estat estacionari en absència de radiació (de fet, si no hi ha estat on transitar, no hi ha interacció efectiva amb la radiació i l'estat roman estacionari).

Tanmateix, si projectem sobre el subespai generat per $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle\}$ obtenim:

$$\hat{H}_t = \frac{\hbar}{2}\omega_0\sigma_z - \frac{\mu B}{2}(\sigma_x \cos \omega t + \sigma_y \sin \omega t).$$

Amb notació simplificada escrivim $\hat{H}_t = a\sigma_z + b(\sigma_x \cos \omega t + \sigma_y \sin \omega t)$, on ara $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$, són les matrius de Pauli. Concretament: $\hat{H}_t = \begin{pmatrix} a & be^{-i\omega t} \\ be^{i\omega t} & -a \end{pmatrix}$.

L'equació de Schrödinger per a aquest hamiltonià és: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} f(t) \\ g(t) \end{bmatrix} = \hat{H}_t \begin{bmatrix} f(t) \\ g(t) \end{bmatrix}$.

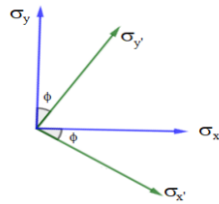
Si ens adonem, el camp oscil·lant $e^{i\omega t}$ és un camp polaritzar circularment. Amb un canvi de coordenades a uns eixos que efectuen una rotació al voltant de l'eix z amb velocitat angular ω observariem però un camp estàtic.

L'operador de rotació d'angle $\theta = \omega t$ al voltant de l'eix z és: $U_z = e^{-i\theta \frac{S_z}{\hbar}} = e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z}$.

Calculem la transformada de $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$:

$$U_z^\dagger i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_z = U_z^\dagger i\hbar(-i) \frac{\omega \sigma_z}{2} e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} + U_z^\dagger U_z i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\hbar \omega}{2} \sigma_z + i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

La transformada de les matrius σ_x, σ_y resulta:⁸



$$\sigma_{x'} = U_z^\dagger \sigma_x U_z = \sigma_x \cos \phi - \sigma_y \sin \phi$$

$$\sigma_{y'} = U_z^\dagger \sigma_y U_z = \sigma_x \sin \phi + \sigma_y \cos \phi$$

$$\sigma_{z'} = U_z^\dagger \sigma_z U_z = \sigma_z$$

Per tant, $U_z^\dagger \hat{H}_t U_z = a\sigma_z + b(\cos \omega t (\sigma_x \cos \omega t - \sigma_y \sin \omega t) + \sin \omega t (\sigma_x \sin \omega t + \sigma_y \cos \omega t))$.

Simplificant trobem $U_z^\dagger \hat{H}_t U_z = a\sigma_z + b\sigma_x$. Per tant, l'equació de Schrödinger en els eixos rotats queda:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \left(a - \frac{\hbar \omega}{2}\right) \sigma_z + b\sigma_x = \frac{\hbar}{2}(\omega_0 - \omega)\sigma_z - \frac{\mu B}{2} \sigma_x$$

Com l'hamiltonià rotat resultant no depèn del temps, aquesta equació admet separació de variables $\Psi = \varphi(x)e^{i\epsilon t}$, amb $H\varphi(x) = \epsilon\varphi(x)$. Concretament, el problema d'autovalors,

$$\left(\frac{\hbar}{2}(\omega_0 - \omega)\sigma_z - \frac{\mu B}{2} \sigma_x\right) \mathbb{C} = \epsilon \mathbb{C} \leftrightarrow \begin{bmatrix} A - \epsilon & B \\ B & -A - \epsilon \end{bmatrix} = 0$$

conduïx als autovalors: $\epsilon = \pm \sqrt{A^2 + B^2} \equiv \pm \frac{\hbar}{2} \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \left(\frac{\mu B}{\hbar}\right)^2}$.

Els autovectors $\begin{bmatrix} 1 \\ q \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ -1/q \end{bmatrix}$ poden ser transformats amb $U_z^{-1} = U_z^\dagger$ i, aleshores, trobem els estats de Floquet depenent del temps: $e^{i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} \begin{bmatrix} 1 \\ q \end{bmatrix} = e^{\pm i\frac{\omega t}{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ q \end{bmatrix}$.

La funció completa conté també la fase $e^{i\epsilon t}$.

⁸ veure e.g. J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Massachusetts 1994, p.159.

6. Operadors de rotació temporal periòdics

Podem comprovar (e.g. amb Mathematica) que $U_z = e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} & 1 \\ 1 & e^{i\omega t/2} \end{pmatrix}$ no és periòdica, atès que $U_z(t+T) = -U_z(t)$. Podem fer una transformació periòdica si usem l'operador $P(t) = e^{i\frac{\omega t}{2}\mathbb{I}} e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z}$, amb \mathbb{I} la matriu identitat.

En efecte, $P(t) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & e^{i\omega t} \end{pmatrix}$, de manera que $P(t) = P(t+T)$.

Calculem les transformacions amb $P(t)$:

$$e^{-i\frac{\omega t}{2}(\mathbb{I}-\sigma_z)} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{i\frac{\omega t}{2}(\mathbb{I}-\sigma_z)} = P^+ P i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + P^+ P i^2 \frac{\hbar\omega}{2} (\mathbb{I}-\sigma_z) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar\omega}{2} (\mathbb{I}-\sigma_z)$$

$$P^+ \sigma_z P = \sigma_z$$

$$P^+ \sigma_x P = e^{-i\frac{\omega t}{2}\mathbb{I}} \left(e^{i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} \sigma_x e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} \right) e^{i\frac{\omega t}{2}\mathbb{I}} = e^{-i\frac{\omega t}{2}\mathbb{I}} (U_z^+ \sigma_x U_z) e^{i\frac{\omega t}{2}\mathbb{I}} = U_z^+ \sigma_x U_z$$

$$P^+ \sigma_y P = U_z^+ \sigma_y U_z$$

de manera que $P^+ \hat{H}_t P = \frac{\hbar}{2} \omega_0 \sigma_z - \frac{\mu B}{2} \sigma_x = P^+ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} P = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar\omega}{2} (\mathbb{I}-\sigma_z)$

$$\rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\hbar\omega}{2} \mathbb{I} + \frac{\hbar}{2} (\omega_0 - \omega) \sigma_z - \frac{\mu B}{2} \sigma_x}$$

Els autovalors ε de $\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & -\frac{\mu B}{2} \\ -\frac{\mu B}{2} & 2\omega - \omega_0 \end{pmatrix}$ resulten ser $\varepsilon_{\pm} = \frac{\hbar}{2} \left[\omega \pm \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \left(\frac{\mu B}{\hbar}\right)^2} \right]$

7. Un segon exemple: partícula en una caixa

Cas d'una partícula en una caixa sota un camp oscil·lant, $\hat{H} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_c(x) + x E_0 \cos\omega t$ amb $V_c(0 \leq x \leq L) = 0$, $V_c(x \leq 0; x \geq L) = 0$.

Seleccionem l'estat fonamental $\varphi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}$ i projectem l'operador hamiltonià sobre aquest espai. Trobem: $\hat{H}_t = \varepsilon_0 + E_0 \cos\omega t \langle \varphi_0 | x | \varphi_0 \rangle = \varepsilon_0$, perquè $\langle \varphi_0 | x | \varphi_0 \rangle = 0$. Com en el cas anterior, \hat{H}_t no resulta funció del temps, sinó que és una constant. També com adés, la projecció ha sigut tan severa (sols un estat, considerant la resta remots, que no poden interaccionar amb ell), que hem impedit altra solució que l'estat estacionari en absència de radiació.

Si triem l'espai expandit pels dos autovectors de menor energia $\{\varphi_0(x), \varphi_1(x)\}$, trobem:

$$H_{11} = \langle \varphi_0 | \hat{H}_t | \varphi_0 \rangle = \varepsilon_0; \quad H_{22} = \langle \varphi_1 | \hat{H}_t | \varphi_1 \rangle = \varepsilon_1;$$

$$H_{12} = H_{21} = \langle \varphi_0 | \hat{H}_t | \varphi_1 \rangle = 0 + E_0 \cos\omega t \langle \varphi_0 | x | \varphi_1 \rangle = -\frac{8}{9\pi^2} E_0 \cos\omega t \equiv (2k) \cos\omega t$$

$$\text{Per tant, } H = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & 2k \cos\omega t \\ 2k \cos\omega t & \varepsilon_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon - \Delta & 0 \\ 0 & \varepsilon + \Delta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 2k \cos\omega t \\ 2k \cos\omega t & 0 \end{pmatrix},$$

amb $\varepsilon = (\varepsilon_0 + \varepsilon_1)/2$, $\Delta = (\varepsilon_1 - \varepsilon_0)/2$. Per tant, formalment, $H = \varepsilon \mathbb{I} + \Delta \sigma_z + 2k \cos\omega t \sigma_x$.

Si escrivim $2\cos\omega t \sigma_x = \cos\omega t \sigma_x + \sin\omega t \sigma_y + \cos\omega t \sigma_x - \sin\omega t \sigma_y = \sigma_+ + \sigma_-$, podem interpretar el camp com la suma de dos camps polaritzats circularment en sentits contraris.

Pel que hem vist adés, és immediat que la transformació $e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} \sigma_+ e^{i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} = \sigma_x$.

Anàlogament, la de σ_- : $\cos\omega t (\sigma_x \cos\omega t - \sigma_y \sin\omega t) - \sin\omega t (\sigma_x \sin\omega t + \sigma_y \cos\omega t) = \sigma_x(\cos^2\omega t - \sin^2\omega t) - \sigma_y(2\sin\omega t \cos\omega t) = \sigma_x \cos 2\omega t - \sigma_y \sin 2\omega t$.

Definim $H_{RWA} = \varepsilon \mathbb{I} + \Delta \sigma_z + k \sigma_+(\omega)$ i $H_{No-RWA} = k \sigma_-(\omega)$, de manera que:

$$H = H_{RWA} + H_{No-RWA}$$

La transformació $P(t) = e^{i\frac{\omega t}{2}(\mathbb{I} - \sigma_z)}$ transforma:

$$H_{RWA}: \varepsilon \mathbb{I} + \Delta \sigma_z + k \sigma_+ \Rightarrow \left(\varepsilon + \frac{\omega}{2}\right) \mathbb{I} + \left(\Delta - \frac{\omega}{2}\right) \sigma_z + k \sigma_x$$

$$H_{No-RWA}: k \sigma_- \Rightarrow k(\sigma_x \cos 2\omega t - \sigma_y \sin 2\omega t)$$

Aplegats a aquest punt podem usar l'aproximació RWA (*rotating wave approximation*)⁹ que consisteix a dir: $2\cos\theta = e^{i\theta} + e^{-i\theta} = e^{i\theta}(1 + e^{-2i\theta}) \approx e^{i\theta}$. És a dir, que consisteix a rebutjar els termes altament oscil·lants (H_{No-RWA}), de manera que convertim aquest nou problema en el mateix problema anterior, en aquell cas resolt de manera exacta, mentre que en aquest resolt sota l'aproximació RWA.

7.1 Caixa amb espai de Hilbert de dimensió major que tres

En aquesta captura de pantalla considerem el terme d'interacció $x E_0 \cos\omega t$:

```

In[1]:= ClearAll["Global`*"];
n = 2;
L = Pi;
mat = Table[0, {i, 1, n}, {j, 1, n}];
lz = Table[0, {i, 1, n}, {j, 1, n}];
For[i = 1, i <= n, i++,
  mat[[i, i]] =  $\frac{\text{Pi}^2}{2L^2} i^2$ ;
  lz[[i, i]] =  $-\left(i - \frac{n+1}{2}\right)$ ;
For[i = 1, i <= n, i++,
  For[j = i + 1, j <= n, j++,
    mat[[i, j]] =  $E_0 \frac{4L}{\text{Pi}^2} \frac{(-1)^{i+j} - 1}{i^2 - j^2} i * j * \frac{1}{2} (e^{i*\omega*t} + e^{-i*\omega*t})$ ;
    mat[[j, i]] =  $E_0 \frac{4L}{\text{Pi}^2} \frac{(-1)^{i+j} - 1}{i^2 - j^2} i * j * \frac{1}{2} (e^{-i*\omega*t} + e^{i*\omega*t})$ ];
rot = DiagonalMatrix[Diagonal[e^{i*\omega*t+1z}]];
rotinv = Inverse[rot];
mat2 = rotinv.mat.rot // FullSimplify;

In[11]:= mat2 // MatrixForm
Out[11]/MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{8(1+e^{-2it\omega})E_0}{3\pi} \\ \frac{8(1+e^{2it\omega})E_0}{3\pi} & 2 \end{pmatrix}$$


In[12]:= mat2 /. {e^{-2it\omega} -> 0, e^{2it\omega} -> 0} // MatrixForm
Out[12]/MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{8E_0}{3\pi} \\ \frac{8E_0}{3\pi} & 2 \end{pmatrix}$$


```

⁹ En MNR és habitual fer aquesta aproximació: sintonitzada la freqüència ω_0 de Larmor, descomponem formalment el camp perpendicular com una suma de dos camps polaritzats circularment, un en la mateixa direcció que gira l'espín, de manera que el camp polaritzat i el dipol espinorial estan en repòs relatiu i un altre en direcció contrària. Quan camp i dipol estan en repòs relatiu, la interacció camp-dipol produeix la precessió de Larmor de l'espín al voltant del camp perpendicular modificant la seua component z (i.e. efectuant la transició), mentre que el camp que gira a una velocitat relativa gran respecte del dipol cancel·la, en cada volta, els efectes del camp sobre el dipol de manera que considerem nul·la la seua acció i a rebutgem.

Aleshores efectuem la rotació i finalment apliquem l'aproximació *RWA* que consisteix en fer zero qualsevol terme amb freqüència el doble (o major) que ω , aplegant a la mateixa solució. Aleshores, podem generalitzar a més dimensions. Per exemple sis dimensions:

```

ClearAll["Global`*"];
n = 6;
L = Pi;
mat = Table[0, {i, 1, n}, {j, 1, n}];
lz = Table[0, {i, 1, n}, {j, 1, n}];
For[i = 1, i <= n, i++,
  mat[[i, i]] =  $\frac{\text{Pi}^2}{2 L^2} i^2$ ;
  lz[[i, i]] =  $-\left(i - \frac{n+1}{2}\right)$ ];
For[i = 1, i <= n, i++,
  For[j = i + 1, j <= n, j++,
    mat[[i, j]] =  $E0 \frac{4 L}{\text{Pi}^2} \frac{(-1)^{i+j} - 1}{i^2 - j^2} i * j * \frac{1}{2} (e^{i*\omega*t} + e^{-i*\omega*t})$ ;
    mat[[j, i]] =  $E0 \frac{4 L}{\text{Pi}^2} \frac{(-1)^{i+j} - 1}{i^2 - j^2} i * j * \frac{1}{2} (e^{-i*\omega*t} + e^{i*\omega*t})$ ];
rot = DiagonalMatrix[Diagonal[ $e^{i*\omega*t+1z}$ ]];
rotinv = Inverse[rot];
mat2 = rotinv.mat.rot // FullSimplify;

mat2 // MatrixForm

```

$$\text{trixForm} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{8(1-e^{-2it\omega})E0}{3\pi} & 0 & \frac{16e^{-4it\omega}(1+e^{2it\omega})E0}{15\pi} & 0 & \frac{24e^{-6it\omega}(1+e^{2it\omega})E0}{35\pi} \\ \frac{8(1+e^{2it\omega})E0}{3\pi} & 2 & \frac{24(1-e^{-2it\omega})E0}{5\pi} & 0 & \frac{40e^{-4it\omega}(1+e^{2it\omega})E0}{21\pi} & 0 \\ 0 & \frac{24(1+e^{2it\omega})E0}{5\pi} & \frac{9}{2} & \frac{48(1+e^{-2it\omega})E0}{7\pi} & 0 & \frac{8e^{-4it\omega}(1+e^{2it\omega})E0}{3\pi} \\ \frac{16(e^{2it\omega}+e^{4it\omega})E0}{15\pi} & 0 & \frac{48(1+e^{2it\omega})E0}{7\pi} & 8 & \frac{80(1+e^{-2it\omega})E0}{9\pi} & 0 \\ 0 & \frac{40(e^{2it\omega}+e^{4it\omega})E0}{21\pi} & 0 & \frac{80(1+e^{2it\omega})E0}{9\pi} & \frac{25}{2} & \frac{120(1+e^{-2it\omega})E0}{11\pi} \\ \frac{24e^{4it\omega}(1+e^{2it\omega})E0}{35\pi} & 0 & \frac{8(e^{2it\omega}+e^{4it\omega})E0}{3\pi} & 0 & \frac{120(1+e^{-2it\omega})E0}{11\pi} & 18 \end{pmatrix}$$

```

mat2 // . {e^{-2it\omega} -> 0, e^{2it\omega} -> 0, e^{-4it\omega} -> 0, e^{4it\omega} -> 0, e^{-6it\omega} -> 0, e^{6it\omega} -> 0} // MatrixForm

```

$$\text{trixForm} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{8E0}{3\pi} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{8E0}{3\pi} & 2 & \frac{24E0}{5\pi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{24E0}{5\pi} & \frac{9}{2} & \frac{48E0}{7\pi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{48E0}{7\pi} & 8 & \frac{80E0}{9\pi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{80E0}{9\pi} & \frac{25}{2} & \frac{120E0}{11\pi} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{120E0}{11\pi} & 18 \end{pmatrix}$$

Observem que la rotació genera una matriu densa on les diferents diagonals dupliquen la freqüència a mesura que s'allunyen de la diagonal central. L'aproximació *RWA* que com hem dit, consisteix en fer zero qualsevol terme amb freqüència el doble (o major) que ω , genera una matriu tri-diagonal simètrica independent del temps que en ser diagonalitzada els seus autovalors ens proporciona aproximacions *RWA* a les energies dels estats de Floquet i a partir dels seus autovectors podem obtindre aquests estats depenent del temps i periòdics.

8. Un teorema

Abanin et al.¹⁰ han demostrat (2017) un teorema que diu que, en el límit d'alta freqüència (que vol dir que la freqüència del potencial d'interacció és molt major que l'amplada de banda d'energia local del sistema, Ω_0), hi ha una transformació a uns eixos que giren amb el

¹⁰ Abanin D., De Roeck W., Ho W.W., Huveneers F., *Commun. Math. Phys.* 354 (2017) 809–27

sistema, descrita per una transformació unitària $P(t)$ depenent del temps, que fa que l'Hamiltonià, vist des dels eixos giratoris, que s'expressa en la forma:

$$H_{rot}(t) = P^\dagger(t)H(t)P(t) - P^\dagger(t) i \partial_t P(t)$$

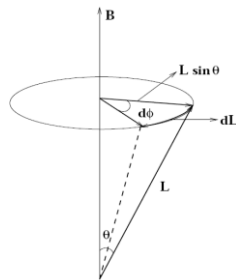
és aproximadament independent del temps: $H_{rot}(t) = H_F + O(e^{-\Omega/\Omega_0})$, amb H_F un Hamiltonià independent del temps. En conseqüència, per a temps que són curts en comparació amb el temps exponencialment llarg $t \sim e^{\Omega/\Omega_0}$, el sistema, vist des dels eixos en rotació, sembla que evoluciona sota l'hamiltonià independent del temps H_F .

A more intuitive way to phrase this result is by going to a periodically rotating frame, given by the unitary $Y(t)$. If $\psi(t)$ solves $\partial_t \psi(t) = -iH(t)\psi(t)$, then $\hat{\psi}(t) = Y(t)\psi(t)$ solves $\hat{\psi}(t) = -i\hat{H}(t)\hat{\psi}(t)$ with $\hat{H}(t) = Y(t)H(t)Y^*(t) - iY(t)\partial_t Y^*(t)$.

Theorem 2.1 asserts then that the Hamiltonian $\hat{H}(t)$ generating this evolution is almost time-independent for large ν , since the time-dependent part \hat{V} has local terms of order $(2/3) \frac{\nu/\nu_0}{(1+\ln(\nu/\nu_0))^3}$.

9. Un exemple conegut que permet entendre l'existència i comportament d' H_F

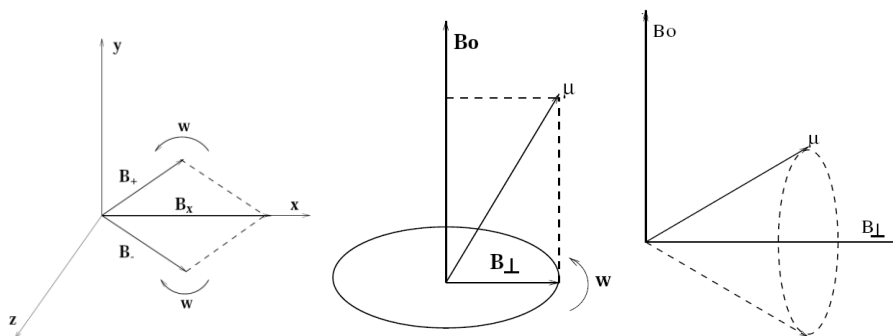
Expandim un poc més el cas comentat en el peu de pàgina 9.



Sabem que moment angular i moment magnètic són proporcionals $\vec{\mu} = \beta \vec{L}$ i que un camp magnètic \vec{B} genera un parell de forces, i.e., un moment $\vec{M} = \vec{\mu} \times \vec{B}$ que fa variar el moment angular: $\vec{M} = d\vec{L}/dt$. Si escrivim $\frac{d\vec{L}}{dt} = \beta \vec{L} \times \vec{B}$ veiem que $d\vec{L}$ és perpendicular a \vec{L} , i.e., el moment genera

una rotació estacionària i uniform del moment angular al voltant del camp amb velocitat angular $\omega = \beta B$.

L'aplicació addicional d'un camp magnètic oscil·lant perpendicular $2B_x \cos \omega t$ al camp inicial pot ser formalment contemplada com la superposició de dos camps de la mateixa freqüència però polaritzats circularment, un a dretes $B_+ = B_x \cos \omega t + i B_x \sin \omega t = B_x e^{i\omega t}$ i l'altre a esquerres $B_- = B_x e^{-i\omega t}$, com mostra la primera de les imatges següents:



Si fem un canvi de coordenades i en situem amb uns eixos mòbils que giren amb velocitat angular ω observarem B_+ com un camp estàtic, mentre que B_- giraria a una alta velocitat (2ω) de manera que el moment exercit sobre el dipol canviaria de signe periòdica i ràpidament (amb freqüència 2ω) de manera que hi hauria una cancel·lació efectiva d'efectes. Tanmateix, el camp que observem estàtic, com mostra la tercera de les imatges

anteriors, produiria una rotació estacionària i uniform del moment angular al voltant del camp amb velocitat angular $\omega = \beta B_x$. Ara, per descriure la dinàmica real, cal fer la transformació inversa als eixos originals.

Per tant, si rebutgem els efectes de B_+ , podem descriure la dinàmica del sistema, com la d'un estat estacionari, descrit per un hamiltonià de Floquet H_F independent del temps, en uns eixos mòbils que una transformació inversa als eixos del laboratori en proporciona la dinàmica real no estacionària del sistema (estat no estacionari de Floquet).

10. Una manera d'anar més enllà de l'aproximació RWA

De les definicions $U(t) = e^{-i \int_0^t \hat{H}(t') dt'}$, $U(t+T) = U(t)e^{-i\hat{G}T}$ i $U(0) = \mathbb{I}$ deduïm que $U(T) = e^{-i \int_0^T \hat{H}(t') dt'} = e^{-i\hat{G}T}$. Aleshores, podem considerar la matriu identitat $n \times n$ la representació de la base dels n autovectors mes estables i substituir en la definició anterior $\hat{H}(t')$ per la seua representació $\mathbb{H}(t')$ en aquesta base i efectuar l'evolució temporal:

$$U(T)\mathbb{I} = e^{-i \int_0^T \mathbb{H}(t') dt'} \mathbb{I} = \mathbb{M}$$

Assumim que n és suficientment gran com per a considerar exacta la solució dins de la precisió requerida. Anomenem \mathbb{F} a la matriu que té per columnes els estats de Floquet expressats en la base en la que hem escrit $\mathbb{H}(t')$. Tenim que: $U(T) \cdot \mathbb{F} = \mathbb{D} \cdot \mathbb{F}$, on \mathbb{D} és una matriu diagonal que conté les exponencial imaginaries dels autovalors de l'operador de floquet (energies mitjanes). Aleshores,¹¹ $\mathbb{F}^\dagger \cdot U \cdot \mathbb{F} = \mathbb{F}^\dagger \cdot \mathbb{D} \cdot \mathbb{F} = \mathbb{D} \cdot \mathbb{F}^\dagger \cdot \mathbb{F} = \mathbb{D} \cdot \mathbb{I} = \mathbb{D}$. Per tant, $U = U \cdot \mathbb{I} = \mathbb{F} \cdot \mathbb{D} \cdot \mathbb{F}^\dagger = \mathbb{M}$. En altres paraules, la diagonalització de la matriu \mathbb{M} ens proporciona els estats de Floquet com autovectors, mentre que els seus autovalors són les exponencial imaginaries dels autovalors de Floquet.

Per tant, en la mesura que n és prou gran com per poder considerar que $\mathbb{H}(t')$ és "exacte" i.e., suficientment precís per descriure els estats que ens interessin, aquest mètode --que no és senzill perquè cal que les evolucions temporals se realitzen consecutivament ordenades amb increments dt molt petits--ens proporciona els estats de Floquet "exactes".

11. La doble periodicitat

Considerem $\tilde{H}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + x F(t)$ amb $V(x+a) = V(x)$ i $F(t+T) = F(t)$. L'equació d'ones és: $i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}(x, t)}{\partial t} = \tilde{H}(x, t) \tilde{\Psi}(x, t)$.

Escrivim $\tilde{\Psi}(x, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} x \int_0^t F(t') dt'\right) \Psi(x, t)$ i substituïm en l'equació. Trobem:

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}(x, t)}{\partial t} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} x \int_0^t F(t') dt'\right) \left[i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} - x F(t) \Psi(x, t) \right]$$

$$-\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\Psi}(x, t) = \dots = \exp\left(\frac{i}{\hbar} x \int_0^t F(t') dt'\right) \left[-i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{\hbar} \int_0^t F(t') dt' \right]^2 \Psi(x, t)$$

Aleshores, l'equació d'ones se transforma en:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{p} + \int_0^t F(t') dt' \right)^2 + V(x) \right] \Psi(x, t)$$

¹¹ Una matriu diagonal commuta amb qualsevol matriu del seu mateix ordre.

Si anomenem $A(t) = \int_0^t F(t') dt'$, aquesta equació té l'aparença:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left[\frac{(\hat{p} + A)^2}{2m} + V(x) \right] \Psi(x, t) \equiv \hat{H} \Psi(x, t)$$

Amb la particularitat que, en ser F periòdica, $A(t) = A(t + T)$ perquè $\int_0^T F(t) dt = 0$. És a dir, \hat{H} presenta una doble periodicitat $\hat{H}(x + a, t) = \hat{H}(x, t)$ i $\hat{H}(x, t + T) = \hat{H}(x, t)$.

Per tant, pel teorema de Floquet: $\Psi(x, t) = e^{-i\epsilon t} u_\epsilon(x, t)$ amb $u_\epsilon(x, t + T) = u_\epsilon(x, t)$. Tanmateix, pel teorema de Bloch: $\Psi(x, t) = e^{ikx} w_k(x, t)$ amb $w_k(x + a, t) = w_k(x, t)$.

Podem escriure doncs que: $\Psi_n(x, t) = e^{i(kx - \frac{\epsilon(k)}{\hbar} t)} u_{nk}(x, t)$ amb u_{nk} presentant doble periodicitat.

En el cas de xarxa buida en l'espai-temps $u_{nk}(x, t) = 1$ (absoluta homogeneïtat de l'espai-temps) de manera que $\Psi_n(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$ amb $\omega = \frac{\epsilon(k)}{\hbar}$.

11. Cristalls en el temps

Els cristalls de temps són estructures dels estats fonamentals (o de menor energia) de les quals són periòdiques, tant en el temps com en l'espai. A primera vista, pot semblar impossible trobar un sistema en què l'estat fonamental mostre moviment periòdic, atès que el mínim d'energia normalment es troba, en mecànica clàssica, quan les derivades de posicions i moments són nul·les. Però sembla possible...

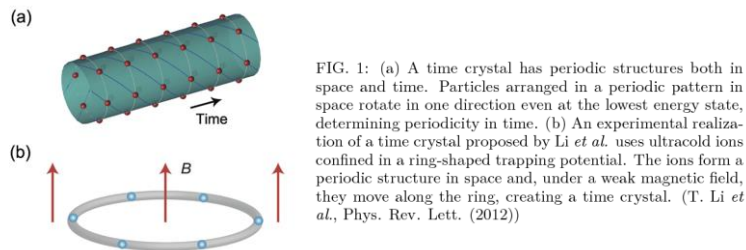


FIG. 1: (a) A time crystal has periodic structures both in space and time. Particles arranged in a periodic pattern in space rotate in one direction even at the lowest energy state, determining periodicity in time. (b) An experimental realization of a time crystal proposed by Li *et al.* uses ultracold ions confined in a ring-shaped trapping potential. The ions form a periodic structure in space and, under a weak magnetic field, they move along the ring, creating a time crystal. (T. Li *et al.*, Phys. Rev. Lett. (2012))

La (curta) història dels cristalls de temps és interessant.¹² La proposta va ser inicialment teoritzada en 2012 per Frank Wilczek i just en 2013, Xiang Zhang i el seu equip van proposar crear un cristall de temps en forma d'un anell d'ions carregats en rotació constant.

Però el mateix 2013, Patrick Bruno i Masaki Oshikawa van publicar diversos articles on mostraven que els cristalls espai-temps no semblaven impossibles. En treballs posteriors van desenvolupar definicions més precises del trencament de la simetria de la translació del temps, que finalment va conduir a la declaració "no-go" de Watanabe-Oshikawa: els cristalls quàntics espai-temps en equilibri no són possibles.

Però en 2019, Valerii Kozin i Oleksandr Kyriienko demostren que, en teoria, pot existir un sistema aïllat consistent en un cristall de temps quàntic i estacionari, si el sistema conté interaccions inusuals de llarg abast, de manera que s'evite l'argument original "no-go" demostrat per camps típics de curt abast que decauen ràpidament com $r^{-\alpha}$ amb $\alpha > 0$.

¹² Veure wikipèdia: https://en.wikipedia.org/wiki/Time_crystal

Tanmateix, com, la realització pràctica del sistema proposat pot ser prohibitivament difícil, s'han plantejat objeccions sobre el caràcter físic real de la naturalesa dels camps de llarg abast del model.

L'any 2022, l'equip d'investigació d'Hamburg, supervisat per Hans Keßler i Andreas Hemmerich, va demostrar, per primera vegada, un cristall de temps dissipatiu continu que presentava una ruptura espontània de la simetria contínua de translació temporal.

Han aparegut alguns articles divulgatius sobre aquest tema dels cristalls de temps, tema que escapa als apunts presents, entre ells, un en 2019 del propi Frank Wilczek¹³. També resulta ràpida, curta i agradable la lectura d'un article de 2012 de Jakub Zakrzewski.¹⁴

12. Apèndix: Rotació d'eixos de coordenades

Considerem la posició $\mathbf{r}(x, y, z)$ d'un mòbil en uns eixos fixos. Anomenem $\mathbf{q}(x', y', z')$ a la posició vista des d'uns eixos mòbils i anomenem $R(t)$ a la matriu que relaciona uns i altres eixos, de manera que $\mathbf{q} = \mathbb{R}(t) \mathbf{r}$. La inversa de la matriu de rotació és la seua transposta, i.e., $\mathbb{R}(t)^T \mathbb{R}(t) = \mathbb{I}$.

La Lagrangiana serà: $\mathcal{L} = \frac{1}{2} M \dot{\mathbf{r}}^2 - V(\mathbf{r})$.

Des de $\mathbf{r} = \mathbb{R}(t)^T \mathbf{q}$, tenim que $\dot{\mathbf{r}} = \mathbb{R}(t)^T \dot{\mathbf{q}} + \dot{\mathbb{R}}(t)^T \mathbf{q} \rightarrow \mathbb{R} \dot{\mathbf{r}} = \dot{\mathbf{q}} + \mathbb{R} \dot{\mathbb{R}}^T \mathbf{q}$. El quadrat de la norma de $\mathbb{R} \dot{\mathbf{r}}$: $(\mathbb{R} \dot{\mathbf{r}})^T (\mathbb{R} \dot{\mathbf{r}}) = \dot{\mathbf{r}}^T \mathbb{R}^T \mathbb{R} \dot{\mathbf{r}} = \dot{\mathbf{r}}^T \mathbb{I} \dot{\mathbf{r}} = \dot{\mathbf{r}}^2$.

A l'altra banda $(\dot{\mathbf{q}} + \mathbb{R} \dot{\mathbb{R}}^T \mathbf{q})^T (\dot{\mathbf{q}} + \mathbb{R} \dot{\mathbb{R}}^T \mathbf{q}) \equiv (\dot{\mathbf{q}} + \mathbb{R} \dot{\mathbb{R}}^T \mathbf{q})^2$, de manera que la Lagrangiana queda:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} M \dot{\mathbf{r}}^2 - V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} M (\dot{\mathbf{q}} + \mathbb{R} \dot{\mathbb{R}}^T \mathbf{q})^2 - V(\mathbb{R}(t)^T \mathbf{q})$$

$$\text{El moment lineal } \mathbf{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = M (\dot{\mathbf{q}} + \mathbb{R} \dot{\mathbb{R}}^T \mathbf{q}) \rightarrow \dot{\mathbf{q}} = \frac{\mathbf{p}}{M} - \mathbb{R} \dot{\mathbb{R}}^T \mathbf{q}$$

$$\text{Si definim } A(\mathbf{q}, t) = \mathbb{R} \dot{\mathbb{R}}^T \mathbf{q}, \text{ escrivim } \dot{\mathbf{q}} = \frac{\mathbf{p}}{M} - A.$$

La Hamiltoniana,

$$\mathcal{H} = \mathbf{p} \dot{\mathbf{q}} - \mathcal{L} = \mathbf{p} \left(\frac{\mathbf{p}}{M} - A \right) - \frac{1}{2} M (\dot{\mathbf{q}} + A)^2 + V = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{M} - \mathbf{A} \mathbf{p} \right) - \frac{1}{2} M \left(\frac{\mathbf{p}}{M} \right)^2 + V = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} - \mathbf{A} \mathbf{p} + V$$

$$\text{Que es pot també escriure en la forma } \mathcal{H} = \frac{1}{2M} (\mathbf{p} - M A)^2 - M \frac{A^2}{2} + V$$

Per copsar el significat de la variable A , definim $\Omega = \mathbb{R} \dot{\mathbb{R}}^T$, que permet escriure $A = \Omega \mathbf{q}$. La matriu Ω és antisimètrica perquè: $\mathbb{R} \mathbb{R}^T = \mathbb{I} \rightarrow \dot{\mathbb{R}} \mathbb{R}^T + \mathbb{R} \dot{\mathbb{R}}^T = 0 \rightarrow \dot{\mathbb{R}} \mathbb{R}^T = -\mathbb{R} \dot{\mathbb{R}}^T = -\Omega$. Per altra banda, $\Omega^T = (\mathbb{R} \dot{\mathbb{R}}^T)^T = \dot{\mathbb{R}} \mathbb{R}^T$. Per tant, $\Omega^T = -\Omega$. En altres paraules, Ω és un tensor antisimètric, i.e., és de la forma: $\Omega = \begin{pmatrix} 0 & -c & b \\ c & 0 & -a \\ -b & a & 0 \end{pmatrix}$, de manera que $\Omega \mathbf{q} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{q}$ on $\boldsymbol{\omega}$ es pot representar pel vector columna $\boldsymbol{\omega}^T = (a, b, c)$.

Per tant, podem també escriure: $A = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{q}$.

¹³ Frank Wilczek, The Exquisite Precision of Time Crystals, *Scientific American*, November 1, 2019 <https://www.scientificamerican.com/article/the-exquisite-precision-of-time-crystals/>

¹⁴ Jakub Zakrzewski, Crystals of Time, *Physics* 5 (2012) 116.

Considerem el cas particular de rotació al voltant de l'eix z:¹⁵ $\mathbb{R} = \begin{pmatrix} \cos\omega t & \sin\omega t & 0 \\ -\sin\omega t & \cos\omega t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Calculem $\Omega = \mathbb{R}\dot{\mathbb{R}}^T$:

$$\begin{pmatrix} \cos\omega t & \sin\omega t & 0 \\ -\sin\omega t & \cos\omega t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin\omega t & -\cos\omega t & 0 \\ \cos\omega t & -\sin\omega t & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \omega = \begin{pmatrix} 0 & -\omega & 0 \\ \omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Per tant, $A = \Omega \mathbf{q} = \begin{pmatrix} 0 & -\omega & 0 \\ \omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_x \\ q_y \\ q_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\omega q_x \\ \omega q_y \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} q_x \\ q_y \\ q_z \end{pmatrix} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{q}$

I el terme $A\mathbf{p}$ de l'Hamiltoniana queda:

$$A \cdot \mathbf{p} = (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{q}) \cdot \mathbf{p} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \omega \\ q_x & q_y & q_z \\ p_x & p_y & p_z \end{pmatrix} = \omega(q_x p_y - q_y p_x) = \omega L_z = \frac{L_z^2}{I}$$

Amb I el moment d'inèrcia.

Observem que l'Hamiltoniana completa, $\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} - A\mathbf{p} + V = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} - \frac{L_z^2}{I} + V$ **no** suma l'energia cinètica de rotació a l'energia cinètica en els eixos mòbils. En l'apèndix H del apunts vells de quàntica¹⁶ se mostra un exemple semblant d'una hamiltoniana d'un sistema en rotació, la qual tampoc que no coincideix amb l'energia total del sistema.

Tornant sobre el cas general i la escriptura de l'Hamiltoniana en la forma:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2M} (\mathbf{p} - M\mathbf{A})^2 - M \frac{A^2}{2} + V$$

Si la quantifiquem ($\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$, $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q}$) trobem l'equació de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{q}, t) = \left[\frac{1}{2M} (-i\hbar\nabla - M\mathbf{A}(\mathbf{q}, t))^2 - M \frac{A(\mathbf{q}, t)^2}{2} + V(\mathbf{q}) \right] \Psi(\mathbf{q}, t)$$

Que coincideix amb l'eq. (17) de Koide et al.¹⁷ si eliminem la translació que Koide et al. també inclouen.

La forma d'encarar el problema més simple (la emprada en aquestes notes) és considerar l'equació de Schrödinger simplement com una equació diferencial i transformar els operadors que defineixen els dos membres amb la mateixa matriu de transformació: $U^\dagger \hat{O} U$.

¹⁵ Cal no confondre ω que és la velocitat angular al voltant de l'eix vertical i $\boldsymbol{\omega}$ la representació aixil del tensor Ω . Més endavant se veurà la relació.

¹⁶ J. Planelles, Química Quàntica, Publicacions de la Universitat Jaume I 1996 (<http://www3.uji.es/~planelle/APUNTS/QQ/lilibreQQ.pdf>)

¹⁷ T.Koide, T. Kodama and K. Tsushima S. Duarte, *The Schrödinger equation in rotating frames by using the stochastic variational method*, in S. Duarte et al. (eds.), *Physical and Mathematical Aspects of Symmetries*, https://doi.org/10.1007/978-3-319-69164-0_32. També en <https://arxiv.org/abs/1611.07570>