

Formalismo Geométrico de la Mecánica Cuántica

Integradores Unitarios



Trabajo de Fin de Grado realizado por
Alfonso Lanuza García

bajo la dirección de
Dr. Jesús Jerónimo Clemente Gallardo
y Dr. José F. Cariñena Marzo

Junio 2016



Universidad
Zaragoza

Abstract

The following work consists of the design and study of numerical integrators capable of preserving the geometry behind Quantum Mechanics. More specifically, we will work on **unitary integrators** i.e. numerical methods for ordinary differential equations which preserve both, a Riemannian and a symplectic structure.

This work can be only understood as a part of a bigger project: **the geometrical formulation of Quantum Mechanics**. This has been an active research line since the late Seventies [4, 8, 15], to which my project directors have made several contributions [5, 9]. The advantages of the geometrical formulation over other formalisms [25] are various. On the one hand, it allows the usage of well-known mathematical disciplines such as differential geometry or tensor calculus, providing a strong mathematical background for the theory. On the other hand, geometry offers a common frame for all theories, being commonly used in classical mechanics and general relativity, and therefore it is a formalism capable of unifying different theories. This is illustrated by my colleagues in Refs. [11, 22], where they use the concept of algebra contractions within this formalism to reduce quantum dynamical systems into classical dynamical systems.

The structure of this paper is as follows. In Chapter 1, we introduce the geometrical formulation of QM. To do so, we will present Quantum Mechanics via the so called ‘Schrödinger picture’. Within this picture, a Hilbert space \mathcal{H} contains the quantum states of a system and Hermitian operators of \mathcal{H} are employed to represent the physical observables. The properties of the scalar product in \mathcal{H} gives rise to a geometric structure (a Kähler manifold) on the Hilbert space. A particularity of these structures, is that Kähler manifolds can be formulated as complex manifolds, being the manifold \mathbb{R} -dimension twice the \mathbb{C} -dimension. After presenting \mathcal{H} as a Kähler manifold, we project it over the projective space $\mathbb{P}\mathcal{H}$, which is the minimal container of the system’s physical information¹. To exemplify projective spaces, we present the Bloch sphere $\mathbb{C}\mathbb{P}^1 \cong S^2$.

After presenting the geometrical framework, we discuss in Chapter 2 the close relation between geometry and group theory. We start presenting the concept of Lie groups and Lie algebras, in order to state the quantum-dynamical evolution in terms of an ODE in the unitary group. Afterwards, we give actions of the unitary group on the sets describing quantum systems in the different pictures. These actions allow extending the solution of the dynamics to every picture.

In Chapter 3, we abandon the geometrical context for a while, to study numerical integrators for Ordinary Differential Equations (ODEs). We focus specifically in Runge-Kutta methods and characterize those preserving the symplecticity behind Hamiltonian ODEs. We also present the Gauss-Legendre point Runge-Kutta (Gauss RK) schemes and show that they result in being the only symplectic RK schemes preserving the distances as well. Such a symplectic and orthogonal schemes are, after complexification, unitary.

¹This statement will make sense later.

This will justify our choice of stating the dynamics over the unitary group: when representing this group as a set of matrices, we have the additional vectorial structure required to employ a RK method². Again, the actions of the group allow extending the numerical solutions to every picture.

Finally, in Chapter 4, we apply these methods to a practical case: a semiclassical model of light-matter interaction. The model consists of a qubit³ interacting with the electric field of a classical harmonic electromagnetic wave (see Ref. [18], pages 5-44). This model, although being low dimensional, is time-dependent and non integrable and hence it requires numeric integration methods. We use Bloch sphere to show the dynamics of this system and we compare the results of applying numerical integrators to this model by using Gauss RK schemes and explicit RK schemes.

²Let us notice that when a unitary RK scheme is applied to a unitary matrix (in $U(n)$), the result is also a unitary matrix but the intermediate matrices are not unitary (they are in $M(n, \mathbb{C}) \supsetneq U(n)$). This remarks the necessity of an additional linear structure for the algorithm to be applied.

³A ‘qubit’ or ‘quantum bit’ refers to any quantum system with two (energy) levels.

Índice de símbolos

Grupos de Lie

G	—	Grupo de Lie.
$GL(n, \mathbb{C})$	—	Grupo general lineal de grado n sobre \mathbb{C} .
$SL(n, \mathbb{C})$	—	Grupo especial lineal de grado n sobre \mathbb{C} .
$O(2n)$	—	Grupo ortogonal de grado $2n$.
$SO(2n)$	—	Grupo especial ortogonal de grado $2n$.
$Sp(2n)$	—	Grupo simpléctico de grado $2n$.
$U(n)$	—	Grupo unitario de grado n .
Ψ	—	Representación natural de un grupo de Lie matricial: $G \times \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$.
$\Psi_{\mathbb{P}}$	—	Acción de un grupo de Lie matricial sobre el proyectivo: $G \times \mathbb{CP}^{n-1} \rightarrow \mathbb{CP}^{n-1}$.

Álgebras de Lie

\mathfrak{g}	—	Álgebra de Lie asociada al grupo de Lie G .
$M(n, \mathbb{C})$	—	Conjunto de las matrices cuadradas $n \times n$ con entradas complejas.
$\mathfrak{sl}(n, \mathbb{C})$	—	Álgebra de Lie asociada a $SL(n, \mathbb{C})$.
$\mathfrak{so}(2n)$	—	Álgebra de Lie asociada a $SO(2n)$ y a $O(2n)$.
$\mathfrak{sp}(2n)$	—	Álgebra de Lie asociada a $Sp(2n)$.
$\mathfrak{u}(n)$	—	Álgebra de Lie asociada a $U(n)$.
Ad	—	Representación adjunta de un grupo de Lie: $G \times \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$.
Coad	—	Representación coadjunta de un grupo de Lie: $G \times \mathfrak{g}' \rightarrow \mathfrak{g}'$.

Física cuántica y análisis funcional

\mathcal{O}	—	Espacio de observables.
\mathcal{S}	—	Espacio de estados.
\mathcal{H}	—	Espacio de Hilbert.
\mathcal{H}'	—	Espacio dual topológico de \mathcal{H} .
Herm \mathcal{H}	—	Cjto. de operadores hermiticos sobre \mathcal{H} .
$\mathcal{L}(\mathcal{H})$	—	Cjto. de endomorfismos continuos (operadores) sobre \mathcal{H} .
$\mathbb{P}\mathcal{H}$	—	Espacio proyectivo de \mathcal{H} .
$\mathcal{D}(\mathcal{H})$	—	Conjunto de matrices densidad en \mathcal{H} .
$\mathcal{D}^1(\mathcal{H})$	—	Conjunto de proyectores ortogonales en \mathcal{H} de rango 1.
$ \psi\rangle$	—	<i>Ket</i> representando un elemento de \mathcal{H} .
$\langle\phi $	—	<i>Bra</i> representando el elemento de \mathcal{H}' dual de $ \phi\rangle \in \mathcal{H}$.
$\langle\phi \psi\rangle$	—	<i>Braket</i> representando el producto escalar en \mathcal{H} .
$\frac{ \psi\rangle\langle\psi }{\langle\psi \psi\rangle}$	—	Proyector ortogonal sobre la recta compleja definida por $ \psi\rangle \in \mathcal{H}$.
$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$	—	Matrices de Pauli.

Variedades diferenciables

M_Q	—	Variedad diferenciable cuántica.
ϑ	—	Carta coordenada canónica de M_Q .
$\{\vartheta\}^+$	—	Atlas maximal del atlas de una sola carta $\{\vartheta\}$.
$\mathfrak{X}(M_Q)$	—	Espacio de campos vectoriales en M_Q .
$\Lambda^2(M_Q)$	—	Espacio de 2-formas en M_Q .
$\text{Hol}(M_Q)$	—	Espacio de funciones holomorfas definidas sobre M_Q complexificado.
$\mathcal{C}^\infty(M_Q)$	—	Espacio de funciones infinitamente diferenciables definidas sobre M_Q .
J	—	Tensor de estructura compleja.
Δ	—	Campo de dilataciones en M_Q .
Γ	—	Campo generador de cambio de fases en M_Q .
h	—	Tensor métrico hermítico de M_Q complexificado.
g	—	Tensor métrico de M_Q .
G	—	Tensor contravariante asociado a g .
ω	—	Forma simpléctica de M_Q .
Ω	—	Tensor contravariante asociado a ω .
\mathcal{L}_X	—	Derivada de Lie respecto a un campo $X \in \mathfrak{X}(M_Q)$.
$\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$	—	Espacio proyectivo complejo de dimensión $n-1$ como variedad compleja.
π	—	Proyección canónica: $\mathbb{C}^n \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$.
S^n	—	Variedad diferenciable esférica de dimensión n .

Agradecimientos

El presente Trabajo de Fin de Grado ha sido realizado bajo la dirección del Dr. Jesús Jerónimo Clemente Gallardo y el Dr. José Fernando Cariñena Marzo, apoyados por Jorge Alberto Jover Galtier. A todos ellos quiero expresarles mi gratitud, por su extraordinaria dedicación y por todos los conocimientos que han compartido tan pacientemente conmigo. También me gustaría agradecerle a mi compañero Néstor González el haber compartido clases, consejos y enriquecedoras discusiones conmigo, siendo un gran apoyo en la realización de este trabajo.

Índice general

Abstract	I
Índice de símbolos	III
Agradecimientos	V
1. Formalismo geométrico de la mecánica cuántica	1
1.1. El espacio de estados \mathbb{C}^n como variedad de Kähler	2
1.2. El espacio proyectivo $\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$	5
1.3. La esfera de Bloch $\mathbb{C}\mathbb{P}^1 \cong S^2$	7
2. La geometría cuántica como grupo de transformaciones	9
2.1. Grupos y álgebras de Lie	9
2.2. El grupo de transformaciones de la mecánica cuántica	11
2.3. Evolución dinámica de un sistema cuántico sobre su grupo	12
3. Integradores numéricos unitarios	14
3.1. Integradores simplécticos	14
3.2. Integradores unitarios	16
4. Aplicación práctica: modelo de interacción luz-materia	19
Conclusiones	23
Bibliografía	24
Apéndices	1
A. Acciones del grupo unitario	2
A.1. Acción del grupo en la imagen de Schrödinger	3
A.2. Acción del grupo sobre el espacio proyectivo	3
A.3. Acción del grupo en la imagen de Heisenberg	4
A.4. Acción del grupo sobre el conjunto de matrices densidad	4
A.5. Acción del grupo sobre la esfera de Bloch	6
B. Integración numérica mediante algoritmos de Runge-Kutta	8
B.1. Métodos Runge-Kutta	8
B.2. Métodos de Gauss RK	10

Capítulo 1

Formalismo geométrico de la mecánica cuántica

Toda teoría física parte de definir matemáticamente el espacio \mathcal{S} de estados de un sistema, el espacio de observables \mathcal{O} , y un proceso de medida $\mathcal{S} \times \mathcal{O} \rightarrow \mathbb{R}$, cuyo resultado es la medición de cierto observable cuando el sistema se halla en un estado determinado. Una vez identificados estos conjuntos, se introduce una ecuación diferencial que determina la evolución dinámica del sistema. En física cuántica, se puede definir esa dinámica en \mathcal{S} mediante la **ecuación de Schrödinger**, o en \mathcal{O} mediante la **ecuación de Heisenberg**. Las dos maneras de introducir la dinámica ofrecen **imágenes** equivalentes de la mecánica cuántica.

Nosotros partiremos del formalismo de Schrödinger, para el cual los estados son elementos no nulos de un espacio de Hilbert \mathcal{H} complejo y separable,

$$\mathcal{S} = \hat{\mathcal{H}} = \{|\psi\rangle \in \mathcal{H} \mid |\psi\rangle \neq 0_{\mathcal{H}}\}.^1 \quad (1.1)$$

Así mismo, los observables de \mathcal{O} vienen matematizados como operadores hermíticos en \mathcal{H} , esto es,

$$\mathcal{O} = \text{Herm } \mathcal{H} = \left\{ A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \mid A = A^\dagger \right\} \quad (1.2)$$

donde $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ denota al conjunto de aplicaciones lineales complejas y continuas de \mathcal{H} en sí mismo y A^\dagger el adjunto hermítico de $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$. El proceso de medida macroscópico $\mathcal{S} \times \mathcal{O} \rightarrow \mathbb{R}$ que acopla sendos espacios viene dado por el *valor esperado*² $\langle A \rangle_\psi$ de un observable $A \in \mathcal{O}$, esto es

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} \times \text{Herm } \mathcal{H} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (|\psi\rangle, A) &\longmapsto \langle A \rangle_\psi := \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad \text{con } \hat{\mathcal{H}} := \mathcal{H} \setminus \{0_{\mathcal{H}}\}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Esto justifica que los operadores de \mathcal{O} sean hermíticos, ya que si no el resultado podría ser complejo.

La posibilidad de que el espacio de Hilbert tenga dimensión no finita³ ($\dim \mathcal{H} = \infty$) complica enormemente la teoría, forzando el uso de conceptos de análisis funcional desde la propia descripción de \mathcal{O} y \mathcal{S} . Debido a que trabajar en dimensión infinita sólo aporta dificultades técnicas que oscurecen el proceso de geometrización, de aquí en adelante trabajaremos únicamente con

¹Usaremos la *notación bra-ket* de Dirac, tan habitual en mecánica cuántica para representar los estados del sistema. Recordamos que bajo esta notación, los elementos duales de un *ket* $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ se denotan con un *bra* $\langle \phi| \in \mathcal{H}'$. Y así, el producto escalar se lee como un *braket* $\langle \phi | \psi \rangle \in \mathbb{R}$.

²La mecánica cuántica es, en última instancia, una herramienta de cálculo de probabilidades; aunque en este trabajo no haremos muchas más referencias a esto.

³La separabilidad de \mathcal{H} implica que, de ser infinita la dimensión de \mathcal{H} , es un infinito numerable.

espacios de Hilbert de dimensión finita ($\dim \mathcal{H} = n$ cuando \mathcal{H} se considere un \mathbb{C} -espacio vectorial, o $2n$ como \mathbb{R} -espacio vectorial). La justificación física para realizar esta simplificación, es doble. Por un lado, unos de los sistemas de mayor interés práctico son los de computación cuántica, cuya dimensión compleja es $n = 2^N$ (finita), siendo N el número de *qubits* de la computadora. Por otro lado, la mayoría de sistemas cuánticos que se encuentran en la naturaleza tienen una baja energía y, por tanto, su estado es aproximadamente una combinación lineal de los estados menos energéticos de la base vectorial.

En dimensión finita, \mathcal{H} es isométricamente isomorfo a \mathbb{C}^n , con lo cual los conjuntos de estados y de observables adquieren una definición más simple,

$$\mathcal{S} = \hat{\mathbb{C}}^n \quad \mathcal{O} = \left\{ A \in M(n, \mathbb{C}) \mid A = A^\dagger \right\}, \quad (1.4)$$

donde el adjunto hermítico se obtiene simplemente transponiendo la matriz compleja y conjugando sus componentes. El auténtico interés de estos conjuntos, radica en sus propiedades algebraicas. Centrándonos en el espacio de estados, donde sucede la evolución temporal bajo la imagen de Schrödinger, las propiedades algebraicas del producto escalar dan lugar a una estructura geométrica en el mismo.

1.1. El espacio de estados \mathbb{C}^n como variedad de Kähler

El primer paso a tomar para geometrizar la mecánica cuántica es dar una estructura de variedad diferenciable real al espacio $\mathcal{S} = \hat{\mathbb{C}}^n$ de estados. Pero como \mathbb{C}^n es un espacio vectorial real de dimensión $2n$, existe un isomorfismo $\vartheta : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{R}^{2n}$ que se puede usar para constituir un atlas real $\{\vartheta\}$ de una sola carta. Queda así constituida la variedad cuántica⁴ $M_Q = (\mathbb{C}^n, \{\vartheta\}^+)$, de dimensión $2n$.

Dada la \mathbb{C} -base canónica $\{|e_j\rangle\}_{j=1}^n$ de \mathbb{C}^n , definimos la carta global como

$$\begin{aligned} \vartheta : M_Q &\longrightarrow \mathbb{R}^{2n} \\ \sum_{j=1}^n (q_j + ip_j) |e_j\rangle &\longmapsto (q_1, q_2, \dots, q_n, p_1, p_2, \dots, p_n). \end{aligned} \quad (1.5)$$

Al tratarse de un espacio vectorial, el espacio tangente a cada punto coincide con la variedad, por lo que el fibrado tangente es $TM_Q = M_Q \times M_Q$. En la variedad M_Q podemos definir varios campos y tensores:

- Para cada $|\psi\rangle \in M_Q$, podemos definir el campo vectorial constante $X_{|\psi\rangle} \in \mathfrak{X}(M_Q)$ asignando el vector $|\psi\rangle$ a cada punto de la variedad⁵:

$$\begin{aligned} X_{|\psi\rangle} : M_Q &\longrightarrow TM_Q \\ |\chi\rangle &\longmapsto (|\chi\rangle, |\psi\rangle). \end{aligned} \quad (1.6)$$

- La unidad imaginaria $i \in \mathbb{C}$ se presenta en el espacio realificado M_Q como un isomorfismo

$$\begin{aligned} J : M_Q &\longrightarrow M_Q \\ \sum_{j=1}^n (q_j + ip_j) |e_j\rangle &\longmapsto \sum_{j=1}^n (-p_j + iq_j) |e_j\rangle. \end{aligned} \quad (1.7)$$

⁴En inglés, “*Quantum Manifold*” justifica la notación M_Q habitualmente usada.

⁵Estos campos constantes componen el álgebra de Lie asociada al grupo de Lie $(M_Q, +)$ (véase el Apartado 2.1).

Es inmediato comprobar que $J^2 = -I_{2n}$. Actuando sobre campos vectoriales, J es un tensor 1-1 denominado *tensor de estructura compleja*:

$$\begin{aligned} J : \mathfrak{X}(M_Q) &\longrightarrow \mathfrak{X}(M_Q) \\ X_{|\psi\rangle} &\longmapsto JX_{|\psi\rangle} := X_{J|\psi}. \end{aligned} \quad (1.8)$$

(Nótese que una vez definida la actuación de los tensores sobre campos constantes, la definición se extiende trivialmente a cualquier campo).

En las coordenadas canónicas $\{(q_j, p_j)\}$, correspondientes a la carta ϑ , este tensor adquiere la expresión

$$J = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial}{\partial p_j} \otimes dq_j - \frac{\partial}{\partial q_j} \otimes dp_j \right). \quad (1.9)$$

- El *campo de dilataciones* $\Delta \in \mathfrak{X}(M_Q)$, dado por

$$\begin{aligned} \Delta : M_Q &\longrightarrow TM_Q \\ |\psi\rangle &\longmapsto (|\psi\rangle, |\psi\rangle), \end{aligned} \quad (1.10)$$

codifica geoméricamente las dilataciones en M_Q debidas al “producto por un real no nulo”⁶. En coordenadas canónicas,

$$\Delta = \sum_{j=1}^n \left(q_j \frac{\partial}{\partial q_j} + p_j \frac{\partial}{\partial p_j} \right). \quad (1.11)$$

- El *generador de cambio de fases* $\Gamma = J(\Delta) \in \mathfrak{X}(M_Q)$, dado por

$$\begin{aligned} \Gamma : M_Q &\longrightarrow TM_Q \\ |\psi\rangle &\longmapsto (|\psi\rangle, J|\psi\rangle), \end{aligned} \quad (1.12)$$

codifica geoméricamente aquellas rotaciones en M_Q debidas al “producto por un número complejo de módulo uno”⁷. Esto resulta más evidente pasando de coordenadas canónicas a polares $\{(r_j, \theta_j)\}$,

$$\Gamma = \sum_{j=1}^n \left(-p_j \frac{\partial}{\partial q_j} + q_j \frac{\partial}{\partial p_j} \right) = \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial \theta_j}. \quad (1.13)$$

- Aparte de la estructura lineal compleja de \mathcal{H} , codificada en los tensores J , Δ , y Γ , también tenemos una estructura hermítica dada por el producto escalar. Si trabajásemos con M_Q como una variedad compleja, este producto se traduciría en un tensor holomorfo h definido por

$$\begin{aligned} h : \mathfrak{X}(M_Q) \times \mathfrak{X}(M_Q) &\longrightarrow \text{Hol}(M_Q) \\ (X_{|\psi_1\rangle}, X_{|\psi_2\rangle}) &\longmapsto h(X_{|\psi_1\rangle}, X_{|\psi_2\rangle}) = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle. \end{aligned} \quad (1.14)$$

En términos de la variedad real, este tensor holomorfo se desdobra en otros dos tensores: $h = g + i\omega$.

⁶Más específicamente, Δ es el generador infinitesimal de la acción del grupo de Lie (\mathbb{R}^+, \cdot) cuando actúa sobre M_Q como grupo de homotecias o dilataciones (para mayor familiaridad con estos conceptos, véase el Capítulo 2).

⁷ Γ es el generador infinitesimal de la acción de $U(1)$ actuando sobre M_Q como grupo de rotaciones (ver Capítulo 2).

- El *tensor métrico* g viene dado por

$$\begin{aligned} g : \mathfrak{X}(M_Q) \times \mathfrak{X}(M_Q) &\longrightarrow \mathcal{C}^\infty(M_Q) \\ (X_{|\psi_1}, X_{|\psi_2}) &\longmapsto g(X_{|\psi_1}, X_{|\psi_2}) = \operatorname{Re} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle, \end{aligned} \quad (1.15)$$

y se puede comprobar fácilmente que es simétrico y definido positivo. Por tanto, (M_Q, g) es una **variedad de Riemann**. En coordenadas canónicas, toma la forma

$$g = \sum_{j=1}^n (dq_j \otimes dq_j + dp_j \otimes dp_j). \quad (1.16)$$

- La *forma simpléctica* $\omega \in \wedge^2(M_Q)$ viene dada por

$$\begin{aligned} \omega : \mathfrak{X}(M_Q) \times \mathfrak{X}(M_Q) &\longrightarrow \mathcal{C}^\infty(M_Q) \\ (X_{|\psi_1}, X_{|\psi_2}) &\longmapsto \omega(X_{|\psi_1}, X_{|\psi_2}) = \operatorname{Im} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle, \end{aligned} \quad (1.17)$$

y es antisimétrica ($\omega(X, Y) = -\omega(Y, X) \quad \forall X, Y \in \mathfrak{X}(M_Q)$), cerrada ($d\omega = 0$) y no degenerada ($\forall X \in \mathfrak{X}(M_Q), \exists Y \in \mathfrak{X}(M_Q)$ t.q. $\omega(X, Y) \neq 0$). Así, (M_Q, ω) es una **variedad simpléctica**. En coordenadas canónicas, toma la expresión

$$\omega = \sum_{j=1}^n dq_j \wedge dp_j. \quad (1.18)$$

La estructuras riemanniana y simpléctica de M_Q se combinan en lo que se denomina “*variedad de Kähler*”⁸ (M_Q, J, g, ω) .

Definición 1.1.1. Una **variedad de Kähler** es una cuádrupla (M, J, g, ω) en la que:

- M es una variedad diferenciable.
- g es un tensor métrico que hace de (M, g) una variedad riemanniana.
- ω es una forma simpléctica que hace de (M, ω) una variedad simpléctica.
- J es un tensor de estructura compleja (J integrable con $J^2 = -I$) que relaciona a los tensores g y ω mediante la relación de compatibilidad

$$g(X, Y) = \omega(X, JY) \quad \forall X, Y \in \mathfrak{X}(M_Q). \quad (1.19)$$

En el caso de la variedad cuántica M_Q , la relación de compatibilidad se deduce de la sesquilinealidad⁹ del producto escalar en \mathbb{C}^n :

$$g(X_{|\psi_1}, X_{|\psi_2}) = \operatorname{Re} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \operatorname{Re} (-i \langle \psi_1 | i\psi_2 \rangle) = \operatorname{Im} \langle \psi_1 | i\psi_2 \rangle = \omega(X_{|\psi_1}, JX_{|\psi_2}) \quad (1.20)$$

Esto concluye la geometrización del espacio de Hilbert \mathcal{H} como la variedad de Kähler cuántica (M_Q, J, g, ω) . En el apartado siguiente, extendemos esta geometrización al espacio proyectivo $\mathbb{P}\mathcal{H}$.

⁸Para más información sobre variedades de Kähler, consultar Refs. [2, 14]. Ref. [2] presenta de manera extensa la teoría de variedades kählerianas, mientras que Ref. [14] es el artículo original de Kähler (existen traducciones en inglés).

⁹Conviene aclarar que en física, el producto escalar complejo conjuga los escalares del primer argumento, dejando inalterados los del segundo. Esto es, $\langle \phi | \lambda \psi \rangle = \lambda \langle \phi | \psi \rangle = \langle \bar{\lambda} \phi | \psi \rangle \quad \forall \lambda \in \mathbb{C}$.

1.2. El espacio proyectivo $\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$

A pesar de que en el formalismo de Schrödinger se escoja en un principio el espacio de Hilbert $\hat{\mathcal{H}}$ como espacio \mathcal{S} de estados, debido a las comodidades que ofrece trabajar con un espacio vectorial, $\hat{\mathcal{H}}$ no representa ‘fielmente’ a los estados del sistema. Con esto queremos expresar que existen elementos distintos $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \hat{\mathcal{H}}$, $|\psi_1\rangle \neq |\psi_2\rangle$ que dan siempre los mismos resultados al hacer cualquier medición física: $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$ no se pueden distinguir en un laboratorio. Esto justifica afirmar que $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$ representan en realidad el mismo estado físico del sistema.

Para lidiar con esto, se procede a establecer una relación ρ de equivalencia, estableciendo que dos estados son equivalentes cuando tras medir cualquier observable el resultado de la medición (Ec. (1.3)) es el mismo:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle \rho |\psi_2\rangle &\iff \frac{\langle \psi_1 | A | \psi_1 \rangle}{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle} = \frac{\langle \psi_2 | A | \psi_2 \rangle}{\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle} \quad \forall A \in \text{Herm } \mathcal{H} \\ &\iff \exists \lambda \in \hat{\mathbb{C}} \text{ t.q. } |\psi_1\rangle = \lambda |\psi_2\rangle. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Para ver que la segunda definición equivale a la primera, la implicación \Leftarrow es una comprobación directa. Para la recíproca, \Rightarrow , basta tomar como operador hermítico A la proyección ortogonal sobre el vector $|\psi_1\rangle$ para obtener que $|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2 = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle$, usando la desigualdad de Cauchy-Schwarz se concluye que $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$ son linealmente dependientes. Notar que el escalar λ que los relaciona no puede ser $0_{\mathbb{C}}$ ya que los dos vectores son no nulos.

A la clase de equivalencia de un elemento $|\psi\rangle \in \hat{\mathcal{H}}$ la denotaremos como $[\psi] \in \hat{\mathcal{H}}/\rho$, mientras que al conjunto cociente $\hat{\mathcal{H}}/\rho$ se le denomina **espacio proyectivo** $\mathbb{P}\mathcal{H}$. El objetivo de esta sección es extender a este espacio la estructura geométrica que hemos obtenido en \mathcal{H} , para el caso de dimensión finita.

Para empezar, resulta necesario (por cuestiones topológicas) quitarle un punto a la variedad. Definimos así la subvariedad abierta $\hat{M}_Q := M_Q \setminus \{0_{\mathbb{C}^n}\}$. Notar que ϑ , una vez modificado su dominio de definición, sigue formando un atlas de una sola carta para \hat{M}_Q . Además, \hat{M}_Q y M_Q se diferencian globalmente, pero a efectos locales son idénticos; por tanto, $(\hat{M}_Q, J, g, \omega)$ sigue siendo una variedad de Kähler.

Consideremos ahora el subespacio vectorial $\mathbb{R}\langle \Delta, \Gamma \rangle \subset \mathfrak{X}(\hat{M}_Q)$ generado por los campos vectoriales Δ y Γ . Estos dos campos definen una distribución regular en \hat{M}_Q , esto es, sus respectivos valores en cada punto de la variedad son linealmente independientes.¹⁰ Como además los dos campos conmutan,

$$[\Delta, \Gamma] = \sum_{j,k=1}^n [q_j \partial_{q_j} + p_j \partial_{p_j}, -p_k \partial_{q_k} + q_k \partial_{p_k}] = \sum_{j,k=1}^n \delta_j^k (q_j \partial_{p_k} - p_j \partial_{q_k} + p_k \partial_{q_j} - q_k \partial_{p_j}) = 0, \quad (1.22)$$

dicho subespacio es un *álgebra de Lie abeliana* (Definición 2.1.3) respecto al conmutador de campos vectoriales. Por el *teorema de Frobenius* (Ref. [20]), esta condición implica que los campos Δ y Γ determinan una distribución completamente integrable y, por tanto, definen una foliación de la variedad.

Dicha foliación define una relación de equivalencia consistente en que dos puntos $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \hat{M}_Q$ están relacionados si y sólo si pertenecen a la misma *fibra* de la foliación, esto es, si y sólo si existe una curva integral $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow \hat{M}_Q$ de algún campo $X \in \mathbb{R}\langle \Delta, \Gamma \rangle$ que vaya de un punto

¹⁰No lo serían, sin embargo, en el origen de la variedad M_Q donde los dos campos se anulan. Es por ello que trabajamos con la variedad \hat{M}_Q .

a otro ($\gamma(0) = |\psi_1\rangle$ $\gamma(1) = |\psi_2\rangle$). Veamos que esta relación de equivalencia coincide con la ρ definida previamente. Dado un campo cualquiera $\mu\Delta + \nu\Gamma \in \mathbb{R}\langle\Delta, \Gamma\rangle$ (donde $\mu, \nu \in \mathbb{R}$), sus curvas integrales cumplen:

$$\frac{d}{dt}\gamma(t) = (\mu\Delta + \nu\Gamma)_{\gamma(t)} = (\mu\Delta + \nu J\Delta)_{\gamma(t)} = (\mu + \nu J)\Delta_{\gamma(t)} \quad (1.23)$$

Si usamos la identificación del fibrado tangente $T\hat{M}_Q$ con $\hat{\mathbb{C}}^n \times \mathbb{C}^n$ (complexificación), esta ecuación resulta más familiar y sencilla de resolver:

$$\frac{d}{dt}\gamma(t) = (\mu + \nu i)\gamma(t); \quad \gamma(t) = e^{(\mu + \nu i)t}\gamma(0); \quad |\psi_1\rangle = \gamma(1) = e^{\mu + \nu i}\gamma(0) = e^{\mu + \nu i}|\psi_2\rangle. \quad (1.24)$$

Vemos así que los dos puntos $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \hat{\mathbb{C}}^n$ están en la misma fibra de la foliación si y sólo si existe $e^{\mu + \nu i} \in \hat{\mathbb{C}}$ tal que $|\psi_1\rangle = e^{\mu + \nu i}|\psi_2\rangle$, en consonancia con la definición de ρ dada en Ec. (1.21).

Por ser una foliación, tenemos que el conjunto cociente \hat{M}_Q/ρ está dotado de una estructura de variedad diferenciable y la proyección canónica $\pi : \hat{M}_Q \rightarrow \hat{M}_Q/\rho$ es una submersión de variedades.

Ahora, nuestro objetivo es usar la submersión

$$\begin{aligned} \pi : \hat{M}_Q &\longrightarrow \mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1} \\ |\psi\rangle &\longmapsto [\psi] \end{aligned} \quad (1.25)$$

para trasladar la estructura geométrica de \hat{M}_Q al proyectivo mediante un “*pushforward*”. Para ello, debemos considerar la versión contravariante,

$$G = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial}{\partial q_j} \otimes \frac{\partial}{\partial q_j} + \frac{\partial}{\partial p_j} \otimes \frac{\partial}{\partial p_j} \right) \quad \Omega = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial}{\partial q_j} \wedge \frac{\partial}{\partial p_j} \right), \quad (1.26)$$

de los tensores covariantes g y ω . Para que estos tensores sean π -proyectables es necesario que sean constantes a lo largo de las fibras $\pi^{-1}([\psi]) \subset \hat{M}_Q$. Calculando las derivadas de Lie

$$\mathcal{L}_\Gamma G = 0 \quad \mathcal{L}_\Gamma \Omega = 0, \quad (1.27)$$

se comprueba que los tensores no cambian en la dirección de las fibras marcada por el campo Γ . No sucede lo mismo, sin embargo, con las derivadas de Lie

$$\mathcal{L}_\Delta G = -2G \quad \mathcal{L}_\Delta \Omega = -2\Omega, \quad (1.28)$$

que no se anulan. Esto obliga a definir unos nuevos tensores G y Ω que sí sean proyectables. La elección habitual consiste en reescalar por $\langle\psi|\psi\rangle \in \mathcal{C}^\infty(\hat{M}_Q)$ estos tensores para compensar la variación cuadrática observada en Ec. (1.28) a lo largo de la fibra; y a continuación sumarlos una combinación de tensores formados a partir de los campos Δ y Γ . Como estos campos son paralelos a la fibra, la proyección de tensores formados por ellos se anula y no afectan a la proyectabilidad del tensor. El resultado son los tensores

$$\begin{aligned} G_{\mathbb{P}} &:= \langle\psi|\psi\rangle G - \Delta \otimes \Delta - \Gamma \otimes \Gamma \\ \Omega_{\mathbb{P}} &:= \langle\psi|\psi\rangle \Omega - \Delta \otimes \Gamma + \Gamma \otimes \Delta. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Se puede comprobar que ahora sí se anulan todas las derivadas de Lie de estos tensores respecto a los campos Δ y Γ , con lo cual son π -proyectables. A sus *pushforwards* por π los denotaremos

$\pi_*(G_{\mathbb{P}})$ y $\pi_*(\Omega_{\mathbb{P}})$, respectivamente. Otra ventaja de esta asignación es que proporciona cierta coherencia a la construcción, ya que la versión covariante de estos bivectores es

$$\begin{aligned} g_{\mathbb{P}} &:= \frac{g}{\langle \psi | \psi \rangle} - \frac{\tilde{\Delta} \otimes \tilde{\Delta}}{\langle \psi | \psi \rangle^2} - \frac{\tilde{\Gamma} \otimes \tilde{\Gamma}}{\langle \psi | \psi \rangle^2} \\ \omega_{\mathbb{P}} &:= \frac{\omega}{\langle \psi | \psi \rangle} - \frac{\tilde{\Delta} \wedge \tilde{\Gamma}}{\langle \psi | \psi \rangle^2}, \end{aligned} \quad (1.30)$$

donde $\tilde{\Delta} = g(\Delta, \cdot)$ y $\tilde{\Gamma} = g(\Gamma, \cdot)$ son las 1-formas asociadas a los campos vectoriales Δ y Γ . Estos tensores covariantes $g_{\mathbb{P}}$ y $\omega_{\mathbb{P}}$ son, precisamente, el *pullback* de las estructuras covariantes sobre $\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$ asociadas a las contravariantes $\pi_*(G_{\mathbb{P}})$ y $\pi_*(\Omega_{\mathbb{P}})$. Con los tensores trasladados, el espacio proyectivo se constituye como una variedad de Kähler¹¹.

1.3. La esfera de Bloch $\mathbb{C}\mathbb{P}^1 \cong S^2$

Como ejemplo más simple de un sistema cuántico, vamos a estudiar un sistema de dos niveles o *qubit*¹². El espacio de estados de este sistema está generado por dos estados ortonormales, comúnmente denominados *estado fundamental* $|0\rangle$ y *estado excitado* $|1\rangle$, ya que habitualmente el primero es un estado menos energético (luego más estable) y que juegan el papel del 0 y el 1 del código binario en computación cuántica. Así, el espacio de estados es $\mathcal{S} = \hat{\mathbb{C}}^2$.

Una característica de este sistema (véase la Sección A.5) es que cualquier estado $|\psi\rangle = (q_1 + ip_1)|1\rangle + (q_2 + ip_2)|0\rangle \in \mathcal{S}$ queda físicamente determinado por la medición de los observables $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z \in \mathcal{O}$, que representan físicamente el *spin* del sistema en las direcciones del espacio determinadas eje x, y y z respectivamente. Matemáticamente, vienen dados en la base $\{|1\rangle, |0\rangle\}$ por las matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.31)$$

Definiendo unas coordenadas cartesianas $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ en base a los valores esperados de estos observables, p.e.

$$x := \langle \sigma_x \rangle_{\psi} = \frac{\langle \psi | \sigma_x | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{(q_1 - ip_1, \quad q_2 - ip_2) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 + ip_1 \\ q_2 + ip_2 \end{pmatrix}}{(q_1 - ip_1, \quad q_2 - ip_2) \begin{pmatrix} q_1 + ip_1 \\ q_2 + ip_2 \end{pmatrix}} = 2 \frac{q_1 q_2 + p_1 p_2}{q_1^2 + p_1^2 + q_2^2 + p_2^2}, \quad (1.32)$$

obtenemos las relaciones

$$\begin{cases} x = 2 \frac{q_1 q_2 + p_1 p_2}{q_1^2 + p_1^2 + q_2^2 + p_2^2} \\ y = 2 \frac{q_1 p_2 - q_2 p_1}{q_1^2 + p_1^2 + q_2^2 + p_2^2} \\ z = \frac{q_1^2 + p_1^2 - q_2^2 - p_2^2}{q_1^2 + p_1^2 + q_2^2 + p_2^2}, \end{cases} \quad (1.33)$$

¹¹Nótese que no ha sido necesario proyectar el tensor de estructura compleja, ya que una vez se tienen definidos un tensor métrico y una forma simpléctica en $\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$, el tensor de estructura se puede definir a partir de ellos usando la relación de compatibilidad (Ec. (1.19)).

¹²Del término inglés “*quantum bit*”, por su importancia en computación cuántica, donde este sistema reemplaza al dígito binario (“*binary digit*” o “*bit*”).

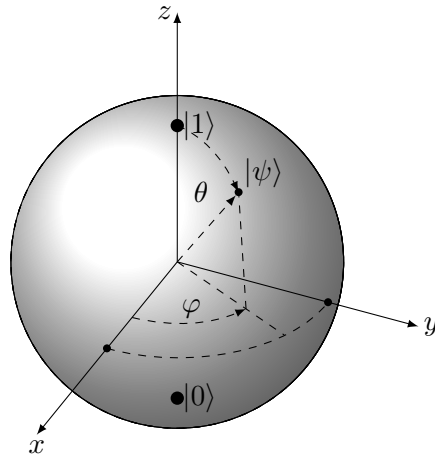


Figura 1.1: *Esfera de Bloch*

Representación del conjunto de estados cuánticos $|\psi\rangle$ de un sistema de dos niveles, $|0\rangle$ y $|1\rangle$.

de donde resulta directo comprobar que $x^2 + y^2 + z^2 = 1$. Esta construcción, conocida como *esfera de Bloch*, establece una relación biunívoca entre los estados de la recta compleja proyectiva $\mathbb{C}\mathbb{P}^1$ y los puntos de una esfera S^2 de radio 1 en \mathbb{R}^3 . A nivel de variedades, esta biyección es un difeomorfismo ($\mathbb{C}\mathbb{P}^1 \cong S^2$).¹³ Nótese en la expresión anterior que el estado excitado $|1\rangle$ se corresponde con el polo norte de la esfera $(0, 0, 1) \in S^2$, y el fundamental $|0\rangle$ con el polo sur $(0, 0, -1) \in S^2$.

Tanto el tensor métrico g_B de la esfera de Bloch, como la forma simpléctica ω_B (obtenidos mediante el proceso de proyección descrito en el Apartado 1.2), adquieren una expresión especialmente simple en coordenadas esféricas, $(\theta, \varphi) \in (0, \pi) \times (0, 2\pi)$ con

$$\begin{cases} \theta = \arccos(z) \\ \varphi = \arctan\left(\frac{y}{x}\right). \end{cases} \quad (1.34)$$

Dichas expresiones coordenadas son

$$g_B = d\theta \otimes d\theta + \sin^2 \theta d\varphi \otimes d\varphi \quad \omega_B = \sin \theta d\theta \wedge d\varphi \quad (1.35)$$

y permiten deducir, por ser estructuras compatibles (Ec. (1.19)), la expresión del tensor de estructura compleja J_B de la esfera de Bloch:

$$J_B = -\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \otimes d\varphi + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \otimes d\theta \quad (1.36)$$

Con lo que queda totalmente caracterizado $(S^2, J_B, g_B, \omega_B)$ como variedad de Kähler.

¹³No debe extrañarle al lector que dos variedades con distinto superíndice resulten difeomorfas, ya que en el caso de $\mathbb{C}\mathbb{P}^1$ el superíndice marca su dimensión compleja, mientras que nosotros lo tratamos como una variedad real de dimensión 2.

Capítulo 2

La geometría cuántica como grupo de transformaciones

Desde la publicación por parte de Felix Klein en 1872 de lo que se conoce como ‘Programa de Erlangen’ (Ref. [16]), el estudio de la geometría tras una teoría dada ha quedado íntimamente ligado al estudio del grupo de transformaciones que mantienen invariantes las propiedades de ésta. En este capítulo, identificamos el grupo de transformaciones de la mecánica cuántica. Esto nos permitirá enunciar la evolución dinámica de un sistema cuántico como una ecuación diferencial sobre el grupo. Este estudio se complementa en el Apéndice A con la traslación de esta dinámica a los distintos formalismos de la mecánica cuántica a través del concepto de *acción de un grupo*.

2.1. Grupos y álgebras de Lie

En física, los grupos que más se aplican al estudio de las simetrías de un sistema –aparte de los grupos finitos– son los *grupos de Lie*, que constituyen una clase especial de grupos topológicos.

Definición 2.1.1. *Un grupo de Lie G es un grupo dotado de una estructura de variedad diferenciable de tal forma que el producto y la toma de inverso en el grupo son aplicaciones diferenciables.*

Ejemplos 2.1.2. *Los ejemplos más típicos de grupos de Lie vienen dados por grupos de matrices invertibles, con la operación de grupo dada por el producto habitual de matrices:*

1.- Grupo general lineal: $GL(n, \mathbb{C}) = \{A \in M(n, \mathbb{C}) \mid \det A \neq 0\}$

2.- Grupo especial lineal: $SL(n, \mathbb{C}) = \{A \in M(n, \mathbb{C}) \mid \det A = 1\}$

3.- Grupo ortogonal: $O(2n) = \{A \in M(2n, \mathbb{R}) \mid A^T A = I_{2n}\}$

4.- Grupo simpléctico: $Sp(2n) = \{A \in M(2n, \mathbb{R}) \mid A^T W A = W\}; \quad W = \begin{pmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{pmatrix}$

5.- Grupo unitario: $U(n) = \{A \in M(n, \mathbb{C}) \mid A^\dagger A = I_n\}$

Notar que, aunque hemos usado la dimensión $2n$ cuando el cuerpo subyacente es \mathbb{R} , tiene perfecto sentido definir el grupo ortogonal de grado n impar, $O(n)$. No sucede lo mismo con $Sp(2n)$, que sólo puede definirse con grados pares debido a que precisa de una forma bilineal W anti-simétrica y no degenerada. La matriz W no es sino la versión matricial de la forma simpléctica ω expresada en coordenadas canónicas.¹

¹El **teorema de Darboux** afirma que para todo punto de una variedad simpléctica (M, ω) , existen coordenadas locales tales que la forma ω adquiere la expresión coordenada de la Ecuación (1.18). A dichas coordenadas se les denomina ‘*coordenadas canónicas*’.

Algunos ejemplos simples de grupos de Lie que representan simetrías de un sistema clásico, son la simetría bajo traslaciones espaciales (grupo $(\mathbb{R}^3, +)$) o la simetría bajo rotaciones (grupo especial ortogonal $SO(3)$). Para comprender mejor como son estos grupos, resulta esencial el siguiente concepto:

Definición 2.1.3. *Un álgebra de Lie $(\mathcal{A}, [\cdot, \cdot])$ es un espacio vectorial \mathcal{A} dotado de una ley de composición bilineal $[\cdot, \cdot] : \mathcal{A} \times \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ que:*

- *Es antisimétrica:* $[a, b] + [b, a] = 0 \quad \forall a, b \in \mathcal{A}$
- *Cumple la identidad de Jacobi:* $[a, [b, c]] + [b, [c, a]] + [c, [a, b]] = 0 \quad \forall a, b, c \in \mathcal{A}$

El ejemplo principal de álgebra de Lie lo constituyen los campos vectoriales de una variedad diferenciable, $(\mathfrak{X}(M), [\cdot, \cdot])$, con el paréntesis de Lie dado por el conmutador de campos vectoriales

$$[X, Y](f) = X(Y(f)) - Y(X(f)) \quad \forall X, Y \in \mathfrak{X}(M) \quad \forall f \in \mathcal{C}^\infty(M). \quad (2.1)$$

Cada grupo de Lie G está asociado a un álgebra de Lie \mathfrak{g} , constituida por los campos vectoriales de G invariantes por la izquierda (para más detalles, véase Ref. [6], pp. 119-134). El álgebra \mathfrak{g} es un subálgebra de $(\mathfrak{X}(G), [\cdot, \cdot])$ y tiene la misma dimensión como espacio vectorial que G como variedad diferenciable, ya que \mathfrak{g} es linealmente isomorfo al espacio tangente al grupo en el elemento neutro $(T_e G)$.

En el caso de grupos de Lie matriciales como los presentados previamente, el álgebra asociada también viene representada por un conjunto de matrices, de tal modo que el producto de Lie viene dado por el conmutador de matrices

$$[A, B] := AB - BA \quad \forall A, B \in M(n, \mathbb{C}) \quad (\text{o análogamente } \forall A, B \in M(2n, \mathbb{R})). \quad (2.2)$$

Además, siempre existe un difeomorfismo local de \mathfrak{g} en G , dado por la aplicación exponencial, que en el caso de matrices coincide con el conocido desarrollo en serie de potencias

$$\begin{aligned} \exp : \mathfrak{g} &\longrightarrow G \\ A &\longmapsto \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Ayudándonos de esta aplicación, podemos probar el siguiente lema, que relaciona los grupos y álgebras de Lie matriciales.

Lema 2.1.4. *Una solución $B(t)$ de la ecuación diferencial matricial*

$$\frac{d}{dt} B(t) = A(t)B(t) \quad (\text{con } A(t) \text{ y } B(t) \text{ matrices cuadradas}) \quad (2.4)$$

pertenece a un grupo de Lie matricial G para todo $t \in \mathbb{R}$ si y sólo si $B(t_0) \in G$ para algún $t_0 \in \mathbb{R}$ y $A(t)$ pertenece a su álgebra de Lie asociada \mathfrak{g} para todo $t \in \mathbb{R}$.

Demostración. Eligiendo cualquier $t_0 \in \mathbb{R}$, la solución de la ecuación es $B(t) = \exp(\int_{t_0}^t A(t)dt)B(t_0)$. Con lo cual si $B(t_0) \in G$ y $A(t) \in \mathfrak{g}$, por ser este álgebra un subespacio vectorial del espacio de matrices cuadradas, $\int_{t_0}^t A(t)dt \in \mathfrak{g}$, luego $\exp(\int_{t_0}^t A(t)dt) \in G$ y por ser G grupo, se tiene que $B(t) = \exp(\int_{t_0}^t A(t)dt)B(t_0) \in G$. Recíprocamente, si $B(t) = \exp(\int_{t_0}^t A(t)dt)B(t_0) \in G$, $B(t)B(t_0)^{-1} = \exp(\int_{t_0}^t A(t)dt) \in G$ luego $\int_{t_0}^t A(t)dt \in \mathfrak{g}$ y por ser \mathfrak{g} subespacio vectorial, $A(t) = \frac{d}{dt} \int_{t_0}^t A(t)dt \in \mathfrak{g}$. \square

Ejemplos 2.1.5. Las álgebras de Lie asociadas a los grupos de Lie presentados en Ejemplos 2.1.2, respectivamente, son los siguientes:

- 1.- $\mathfrak{gl}(n, \mathbb{C}) = M(n, \mathbb{C})$
- 2.- $\mathfrak{sl}(n, \mathbb{C}) = \{A \in M(n, \mathbb{C}) \mid \text{Tr}A = 0\}$
- 3.- $\mathfrak{so}(2n) = \{A \in M(2n, \mathbb{R}) \mid A^T = -A\}$ ²
- 4.- $\mathfrak{sp}(2n) = \{A \in M(2n, \mathbb{R}) \mid WA + A^T W = 0\}$
- 5.- $\mathfrak{u}(n) = \{A \in M(n, \mathbb{C}) \mid A^\dagger = -A\}$

El parecido entre $\mathfrak{u}(n)$ (conjunto de matrices anti-hermíticas) y $\text{Herm } \mathbb{C}^n$ (conjunto \mathcal{O} de observables) permite trasladar la estructura de álgebra de Lie de $\mathfrak{u}(n)$ a las matrices hermíticas, a través del isomorfismo lineal

$$\begin{aligned} \alpha : \mathfrak{u}(n) &\longrightarrow \text{Herm } \mathbb{C}^n \\ A &\longmapsto iA. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Para ello, basta definir la ley de composición

$$[A, B]_- := \alpha[\alpha^{-1}(A), \alpha^{-1}(B)] = -i(AB - BA) \quad \forall A, B \in \text{Herm } \mathbb{C}^n, \quad (2.6)$$

para estructurar al espacio de observables \mathcal{O} como el álgebra de Lie $(\text{Herm } \mathbb{C}^n, [\cdot, \cdot]_-)$.³

2.2. El grupo de transformaciones de la mecánica cuántica

En la Sección 1.1, caracterizábamos al espacio \mathcal{S} de estados cuánticos como un espacio vectorial kähleriano, esto es, con un tensor métrico y una forma simpléctica compatible. La geometría cuántica viene dada por el grupo de transformaciones que preserven estas estructuras.

Definición 2.2.1. En una variedad de Riemann (M, g) , una **isometría** es un difeomorfismo $f : M \rightarrow M$ que preserva la métrica, es decir,

$$f^*(g) = g \quad (2.7)$$

donde f^* denota el pullback de f .

El conjunto de isometrías de (M, g) , armado con la composición de funciones, constituye un grupo de dimensión finita cuyos generadores infinitesimales son los *campos vectoriales de Killing*,

$$X \in \mathfrak{X}(M) \quad \text{t.q.} \quad \mathcal{L}_X(g) = 0. \quad (2.8)$$

Los campos de Killing forman un subálgebra de Lie de $(\mathfrak{X}(M), [\cdot, \cdot])$, esto es, el conmutador de campos de Killing es otro campo de Killing.

Definición 2.2.2. En una variedad simpléctica (M, ω) , un **simplectomorfismo** es un difeomorfismo $f : M \rightarrow M$ que preserva la forma simpléctica, esto es,

$$f^*(\omega) = \omega. \quad (2.9)$$

²Como el grupo especial ortogonal $\text{SO}(2n) = \text{O}(2n) \cap \text{SL}(2n, \mathbb{R})$ es la componente conexa de $\text{O}(2n)$ que contiene al elemento neutro I_{2n} , los álgebras de Lie asociados a estos dos grupos coinciden.

³Más aún, el espacio de observables se puede estructurar como un álgebra de Lie-Jordan-Banach (véase cualquiera de las Refs. [5, 9, 11, 22]).

De nuevo, el conjunto de simplectomorfismos de una variedad (M, ω) forma un grupo respecto a la composición de funciones, esta vez de dimensión infinita. Pueden obtenerse a partir del flujo de los *campos vectoriales localmente hamiltonianos*

$$X \in \mathfrak{X}(M) \quad \text{t.q.} \quad \mathcal{L}_X(\omega) = 0, \quad (2.10)$$

que forman un subálgebra de Lie de $(\mathfrak{X}(M), [\cdot, \cdot])$.

Los grupos de isometrías y –sobre todo– el de simplectomorfismos de una variedad de Kähler pueden ser complicados; pero en el caso mecano-cuántico también es necesario preservar la estructura lineal del espacio de estados. Nótese que cuando un endomorfismo lineal de \mathbb{R}^{2n} viene dado por la matriz A en la base canónica, entonces dicho endomorfismo es un difeomorfismo si y sólo si A es regular, es decir, $A \in \text{GL}(2n, \mathbb{R})$. Como en esta misma base los tensores métrico y simpléctico vienen representados por las matrices I_{2n} y W (Ecs. (1.16) y (1.18)) respectivamente, y el jacobiano de la aplicación lineal en cada punto vuelve a ser A , las Ecuaciones (2.7) y (2.9) vienen dadas por

$$A^T I_{2n} A = I_{2n} \quad \text{y} \quad A^T W A = W. \quad (2.11)$$

Vemos por tanto que el grupo de isometrías lineales en M_Q es $\text{O}(2n)$, y el grupo de simplectomorfismos lineales es $\text{Sp}(2n)$. Como además basta que se conserven el tensor métrico y la forma simpléctica para que también se conserve el tensor de estructura compleja compatible, concluimos que el grupo que codifica la geometría cuántica es $\text{O}(2n) \cap \text{Sp}(2n)$.

Por otra parte, viendo el espacio de estados como una variedad compleja, es bien sabido que las únicas transformaciones lineales de \mathbb{C}^n que preservan su producto escalar (y por tanto el tensor holomorfo h), componen $\text{U}(n)$. Esto no entra en conflicto con lo anterior, puesto que los existe un isomorfismo de grupos de Lie que los relaciona, esto es, un difeomorfismo que preserva el producto en los grupos. Dicho isomorfismo viene dado por la relación biunívoca

$$\begin{aligned} \text{U}(n) &\iff \text{O}(2n) \cap \text{Sp}(2n) \\ U &\mapsto \left(\begin{array}{c|c} \text{Re } U & -\text{Im } U \\ \hline \text{Im } U & \text{Re } U \end{array} \right) \\ R + iS &\longleftarrow \left(\begin{array}{c|c} R & -S \\ \hline S & R \end{array} \right), \end{aligned} \quad (2.12)$$

donde los bloques $\text{Re } U$ e $\text{Im } U$ denotan las matrices de $\text{M}(n, \mathbb{R})$ formados a partir de las partes real e imaginaria de la cada una de las entradas de la matriz U . Con lo que identificamos los dos grupos de Lie $\text{U}(n) \cong \text{O}(2n) \cap \text{Sp}(2n)$ con el grupo de transformaciones en mecánica cuántica.

2.3. Evolución dinámica de un sistema cuántico sobre su grupo

La evolución dinámica de un sistema cuántico se puede entender como una transformación del sistema $U(t_1, t_0) \in \text{U}(n)$ de un instante t_0 a otro t_1 ($t_0, t_1 \in \mathbb{R}$). Naturalmente, esta evolución $t_0 \rightarrow t_1$ se puede entender como la composición de dos evoluciones $t_0 \rightarrow t_2 \rightarrow t_1$, es decir,

$$U(t_1, t_0) = U(t_1, t_2)U(t_2, t_0) \quad \forall t_0, t_1, t_2 \in \mathbb{R}. \quad (2.13)$$

Nótese que ni t_1 tiene porqué ser mayor que t_0 , ni t_2 tiene que ser un instante intermedio.⁴ Por lo tanto, esta relación implica que

$$U(t, t) = I_n \quad \wedge \quad U(t_0, t_1) = U^{-1}(t_1, t_0) \quad \forall t, t_0, t_1 \in \mathbb{R}. \quad (2.14)$$

Fijando un instante inicial $t_0 \in \mathbb{R}$, se tiene que la evolución infinitesimal del sistema viene dada por

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}U(t, t_0) &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{U(t + \delta, t_0) - U(t, t_0)}{\delta} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{U(t + \delta, t)U(t, t_0) - U(t, t_0)}{\delta} = \\ &= \left(\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{U(t + \delta, t) - I_n}{\delta} \right) U(t, t_0) \quad \text{con} \quad U(t_0, t_0) = I_n. \end{aligned} \quad (2.15)$$

El límite entre paréntesis es una matriz dependiente de t que, según el Lema 2.1.4, debe pertenecer al álgebra de Lie asociada al grupo, $\mathfrak{u}(n)$. Esto resulta fácil de comprobar:

$$\begin{aligned} \left(\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{U(t + \delta, t) - I_n}{\delta} \right)^\dagger &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{U^\dagger(t + \delta, t) - I_n}{\delta} = \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0} U^{-1}(t + \delta, t) U(t + \delta, t) \frac{U^{-1}(t + \delta, t) - I_n}{\delta} = \lim_{\delta \rightarrow 0} U^{-1}(t + \delta, t) \frac{I_n - U(t + \delta, t)}{\delta} = \\ &= U^{-1}(t, t) \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{I_n - U(t + \delta, t)}{\delta} = - \left(\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{U(t + \delta, t) - I_n}{\delta} \right) \implies \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{U(t + \delta, t) - I_n}{\delta} \in \mathfrak{u}(n) \end{aligned} \quad (2.16)$$

Por la relación que guarda el álgebra $\mathfrak{u}(n)$ con $\text{Herm } \mathbb{C}^n$, dada por la aplicación α (Ec. (2.5)), podemos definir el operador hermítico

$$H(t) := \alpha \left(\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{U(t + \delta, t) - I_n}{\delta} \right) = \lim_{\delta \rightarrow 0} i \frac{U(t + \delta, t) - I_n}{\delta} \quad (2.17)$$

que determina la evolución del sistema. Dicho observable $H \in \text{Herm } \mathbb{C}^n$ se conoce como el *operador hamiltoniano* del sistema, y su valor esperado $\langle H \rangle_\psi$ da cuenta de la energía del sistema.

Denotando abreviadamente $U(t) \equiv U(t, t_0)$ y usando el operador hamiltoniano, la Ec. (2.15) se reescribe dando lugar a la *ecuación maestra* que define la evolución dinámica del sistema:

$$\boxed{\frac{d}{dt}U(t) = -iH(t)U(t) \quad U(t_0) = I_n} \quad (2.18)$$

En los siguientes capítulos, trabajaremos directamente con esta ecuación para integrar la dinámica del sistema. La evolución dinámica así obtenida, podrá ser trasladada a los distintos formalismos mediante las acciones del grupo unitario (Apéndice A).

⁴También existen modelos matemáticos para sistemas cuánticos “sin memoria” (sistemas *markovianos*), que sí precisan de la condición $t_0 \leq t_1 \leq t_2$. Aquí no discutiremos este tipo de sistemas; para una discusión sobre éstos véase por ejemplo Ref. [11], pp. 8-10.

Capítulo 3

Integradores numéricos unitarios

La inmensa mayoría de ecuaciones diferenciales que aparecen al estudiar la dinámica de un sistema físico tienen soluciones no analíticas, por lo que resulta imprescindible el uso de integradores numéricos para obtener soluciones aproximadas. De entre éstos, los *integradores geométricos* son aquellos capaces de preservar el comportamiento asintótico o los invariantes bajo el flujo de la solución exacta. Mientras que el objetivo al crear un integrador numérico es minimizar el error de la solución aproximada, la ventaja de un integrador geométrico es que sus soluciones aproximadas tienen el mismo comportamiento cualitativo (Ref. [26]).

En particular, los *integradores simplécticos* o *integradores canónicos* han sido muy estudiados recientemente (Refs. [17, 21, 23, 24]) por su capacidad de preservar la geometría de los sistemas dinámicos hamiltonianos. Aunque se ha encontrado una amplia variedad de distintos métodos con este fin, nosotros nos centraremos en los métodos de Runge-Kutta, por ser los más clásicos y manejables. Una amplia introducción a los métodos de Runge-Kutta (RK) y de Gauss-Legendre Runge-Kutta (Gauss RK) puede verse en el Apéndice B.

Al final del capítulo, podremos apoyarnos en los algoritmos simplécticos para encontrar una familia de integradores unitarios.

3.1. Integradores simplécticos

El estudio de integradores simplécticos surge como la aplicación de integradores geométricos a los *sistemas hamiltonianos*.

Definición 3.1.1. *Un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias se dice **sistema hamiltoniano** si existe una función de clase $\mathcal{C}^2(\Omega)$, llamada **hamiltoniano del sistema**¹*

$$\begin{aligned} H : \Omega \subseteq \mathbb{R}^{2n} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (q, p) &\longmapsto H(q, p) \end{aligned} \quad \text{con } \Omega \text{ abierto,} \quad (3.1)$$

tal que el sistema de ecuaciones se escribe como

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}q = \frac{\partial H}{\partial p} \\ \frac{d}{dt}p = -\frac{\partial H}{\partial q} \end{cases} \quad (3.2)$$

donde denotamos $\frac{\partial H}{\partial p} = \left(\frac{\partial H}{\partial p_1}, \dots, \frac{\partial H}{\partial p_n} \right)$ y $\frac{\partial H}{\partial q} = \left(\frac{\partial H}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial H}{\partial q_n} \right)$.

¹En esta sección, trabajamos por simplicidad con sistemas hamiltonianos independientes del tiempo ($\partial_t H(q, p) = 0$). Sin embargo no hay pérdida de generalidad en esto, porque la dependencia temporal en t se puede introducir como una de las componentes de q , complementándose con una variable auxiliar u entre las componentes de p (véase Ref. [1]).

Los sistemas hamiltonianos encuentran su principal aplicación en la dinámica clásica. Y su relación con la geometría simpléctica es que, en una variedad simpléctica, las curvas integrales correspondientes a *campos hamiltonianos* (un subálgebra de Lie de los campos vectoriales localmente hamiltonianos, Ec. (2.10)) satisfacen en coordenadas canónicas las ecuaciones de Hamilton (3.2).

Definición 3.1.2. Una *transformación canónica* es un cambio de coordenadas canónicas, es decir, un difeomorfismo $(q, p) \mapsto (Q, P)$ que transforma Ecs. (3.2) en otro sistema hamiltoniano, independientemente de cuál sea el hamiltoniano H de partida.

En \mathbb{R}^2 , queda bien definida la forma simpléctica

$$\omega = dq \wedge dp = dq_1 \wedge dp_1 + \dots dq_n \wedge dp_n, \quad (3.3)$$

que permite caracterizar a las transformaciones canónicas como los simplectomorfismos que la preservan ($dq \wedge dp = dQ \wedge dP$). En otras palabras, una transformación es canónica si su jacobiano, evaluado en cada punto, pertenece al grupo simpléctico $\text{Sp}(2n)$.

Un método de RK es un *integrador simpléctico* si cada iteración del método aplicado a un sistema hamiltoniano es una transformación canónica. El siguiente teorema caracteriza a los algoritmos RK simplécticos.

Teorema 3.1.3. El método Runge-Kutta que define la tabla de Butcher (B.4), aplicado a un sistema hamiltoniano como (3.2), es un integrador simpléctico si todos los coeficientes

$$m_{ij} := b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, s) \quad (3.4)$$

se anulan.

Demostración. Sean (q, p) las coordenadas en un cierto instante $t \in \mathbb{R}$ y (Q, P) las coordenadas transformadas mediante el método RK, que aproximan la solución del sistema en un instante posterior $t + h$. Entonces (Q, P) vienen dadas por

$$Q = q + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \quad P = p + h \sum_{i=1}^s b_i l_i \quad (3.5)$$

donde

$$k_i = \frac{\partial H}{\partial p}(Y_i, Z_i) \quad l_i = -\frac{\partial H}{\partial q}(Y_i, Z_i) \quad (3.6)$$

y además

$$Y_i = q + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j \quad Z_i = p + h \sum_{j=1}^s a_{ij} l_j. \quad (3.7)$$

A partir de estas relaciones, se tiene

$$dQ \wedge dP = dq \wedge dp + h \sum_{i=1}^s b_i (dk_i \wedge dp + dq \wedge dl_i) + h^2 \sum_{i,j=1}^s b_i b_j dk_i \wedge dl_j \quad (3.8)$$

y se tiene

$$dY_i \wedge dl_i = dq \wedge dl_i + h \sum_{j=1}^s a_{ij} dk_j \wedge dl_i \quad dk_i \wedge dZ_i = dk_i \wedge dp + h \sum_{j=1}^s a_{ij} dk_i \wedge dl_j. \quad (3.9)$$

Despejando $dq \wedge dl_i$ y $dk_i \wedge dp$ de éstas últimas, y substituyendo en (3.8), se obtiene

$$dQ \wedge dP = dq \wedge dp + h \sum_{i=1}^s b_i (dk_i \wedge dZ_i + dY_i \wedge dl_i) + h^2 \sum_{i,j=1}^s (b_i b_j - b_i a_{ij} - b_j a_{ji}) dk_i \wedge dl_j, \quad (3.10)$$

o lo que es lo mismo,

$$dQ \wedge dP - dq \wedge dp = h \sum_{i=1}^s b_i (dk_i \wedge dZ_i + dY_i \wedge dl_i) - h^2 \sum_{i,j=1}^s m_{ij} dk_i \wedge dl_j. \quad (3.11)$$

Sin embargo, cada sumando que acompaña a h ,

$$\begin{aligned} dk_i \wedge dZ_i + dY_i \wedge dl_i &= \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q}(Y_i, Z_i) dY_i \wedge dZ_i + \frac{\partial^2 H}{(\partial p)^2}(Y_i, Z_i) dZ_i \wedge dZ_i \\ &\quad - \frac{\partial^2 H}{(\partial q)^2}(Y_i, Z_i) dY_i \wedge dY_i - \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p}(Y_i, Z_i) dY_i \wedge dZ_i, \end{aligned} \quad (3.12)$$

se anula por la antisimetría del producto exterior y porque las derivadas parciales cruzadas de $H \in \mathcal{C}^2(\Omega)$ coinciden. Así, tenemos que la variación de la forma simpléctica es cuadrática en h ,

$$dQ \wedge dP - dq \wedge dp = -h^2 \sum_{i,j=1}^s m_{ij} dk_i \wedge dl_j, \quad (3.13)$$

y que no varía en absoluto si $m_{ij} = 0 \quad \forall i, j \in \{1, 2, \dots, s\}$. \square

En particular, como los métodos de Gauss RK cumplen esta condición (véase p.e. Teorema 4.6 de Ref. [10]), son integradores simplécticos.

3.2. Integradores unitarios

En la Sección 2.3, veíamos que la evolución dinámica de un sistema cuántico viene dada por la ecuación

$$\frac{d}{dt}U(t) = -iH(t)U(t) \quad U(t_0) = I_n, \quad (3.14)$$

donde $U(t) \in U(n)$ y $H(t) \in \text{Herm } \mathbb{C}^n$. En este apartado, nos centramos en encontrar integradores apropiados para esta ecuación. Nótese que, como la ecuación diferencial es lineal, cada iteración de un método Runge-Kutta (B.4) supone una transformación también lineal de U_n en

$$U_{n+1} = U_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i =: \Phi_n U_n \quad (3.15)$$

debido a que las (esta vez) matrices k_i se obtienen del sistema de ecuaciones lineales

$$\left\{ k_i = -iH(t_n + hc_i)[U_n + \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j] \quad (i = 1, \dots, s). \right. \quad (3.16)$$

Así, la *matriz de transferencia* Φ_n es la matriz que define la transformación lineal que supone la n -ésima iteración del método. Cuando $U_n \in U(n)$, el resultado U_{n+1} de aplicar el método seguirá siendo una matriz unitaria si y sólo si Φ_n es unitaria. Diremos por tanto que un **método RK** es **unitario**, cuando al aplicarse a ecuaciones diferenciales de este tipo siempre resulta en matrices de transferencia unitarias.

Nótese que para el caso más sencillo, en que $U(t) \in U(1)$ es un número complejo de módulo 1 y $H \in \text{Herm } \mathbb{C}^1$ es una constante real, recuperamos el PVI test (B.5). Así, la matriz de transferencia viene dada en este caso por $\phi(ihH)$ donde $\phi(z)$ es la función meromorfa definida en Ec. (B.6), y la transferencia será unitaria si y sólo si $|\phi(ihH)| = 1$. Por tanto, una condición necesaria para que un algoritmo RK sea unitario, es que

$$|\phi(z)| = 1 \quad \forall z \in \mathbb{C} \text{ t.q. } \text{Re } z = 0. \quad (3.17)$$

Esta condición permite descartar como integradores unitarios a los métodos RK explícitos, como el Método de Euler o el Método RK de orden 4 (véase su región de estabilidad en la Tabla B.1), pero no a otros métodos A-estables como la regla del trapecio o los métodos de Gauss RK.

Teorema 3.2.1. *Los métodos de Gauss-Legendre Runge-Kutta son integradores unitarios.*

Demostración. Usando la notación del isomorfismo de grupos (2.12), definimos la matriz por bloques

$$A(t) := \left(\begin{array}{c|c} \frac{\text{Im } H(t)}{-\text{Re } H(t)} & \frac{\text{Re } H(t)}{\text{Im } H(t)} \\ \hline & 0_{2n} \end{array} \middle| \begin{array}{c|c} & 0_{2n} \\ \hline -\text{Im } H^T(t) & \text{Re } H^T(t) \\ -\text{Re } H^T(t) & -\text{Im } H^T(t) \end{array} \right) \in M(4n, \mathbb{R}). \quad (3.18)$$

Como

$$\begin{aligned} & \left(\begin{array}{c|c} 0_{2n} & I_{2n} \\ \hline -I_{2n} & 0_{2n} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c|c} \frac{\text{Im } H(t)}{-\text{Re } H(t)} & \frac{\text{Re } H(t)}{\text{Im } H(t)} \\ \hline & 0_{2n} \end{array} \middle| \begin{array}{c|c} & 0_{2n} \\ \hline -\text{Im } H^T(t) & \text{Re } H^T(t) \\ -\text{Re } H^T(t) & -\text{Im } H^T(t) \end{array} \right) + \\ & + \left(\begin{array}{c|c} \frac{\text{Im } H^T(t)}{\text{Re } H^T(t)} & \frac{-\text{Re } H^T(t)}{\text{Im } H^T(t)} \\ \hline & 0_{2n} \end{array} \middle| \begin{array}{c|c} & 0_{2n} \\ \hline -\text{Im } H(t) & -\text{Re } H(t) \\ \text{Re } H(t) & -\text{Im } H(t) \end{array} \right) \left(\begin{array}{c|c} 0_{2n} & I_{2n} \\ \hline -I_{2n} & 0_{2n} \end{array} \right) = \\ & = \left(\begin{array}{c|c} 0_{2n} & \frac{-\text{Im } H^T(t)}{-\text{Re } H^T(t)} \frac{\text{Re } H^T(t)}{-\text{Im } H^T(t)} \\ \hline \frac{-\text{Im } H(t)}{\text{Re } H(t)} & \frac{-\text{Re } H(t)}{-\text{Im } H(t)} \end{array} \middle| \begin{array}{c|c} & 0_{2n} \\ \hline & \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c|c} 0_{2n} & \frac{\text{Im } H^T(t)}{\text{Re } H^T(t)} \frac{-\text{Re } H^T(t)}{\text{Im } H^T(t)} \\ \hline \frac{\text{Im } H(t)}{-\text{Re } H(t)} & \frac{\text{Re } H(t)}{\text{Im } H(t)} \end{array} \middle| \begin{array}{c|c} & 0_{2n} \\ \hline & \end{array} \right) = 0_{4n}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

tenemos que $A(t) \in \mathfrak{sp}(4n)$. Por el Lema 2.1.4, el PVI

$$\frac{d}{dt} B(t) = A(t)B(t) \quad B(t_0) = I_{4n} \quad (3.20)$$

tiene una solución simpléctica $B(t) \in \text{Sp}(4n)$. Pero notemos que como $H(t)$ es hermítico, $\text{Re } H(t) = \text{Re } H^T(t)$ e $\text{Im } H(t) = -\text{Im } H^T(t)$, por lo que en realidad los dos bloques $2n \times 2n$ en la diagonal de $A(t)$ son iguales. Así, al aplicar un algoritmo de Gauss RK a la ecuación anterior, esta estructura por bloques se preserva dando lugar a una matrices de transferencia de la forma

$$\left(\begin{array}{c|c} \Phi_n & 0_{2n} \\ \hline 0_{2n} & \Phi_n \end{array} \right). \quad (3.21)$$

Como los métodos de Gauss RK son simplécticos, esta matriz pertenece también a $\text{Sp}(4n)$, es decir

$$\left(\begin{array}{c|c} \Phi_n^T & 0_{2n} \\ \hline 0_{2n} & \Phi_n^T \end{array} \right) \left(\begin{array}{c|c} 0_{2n} & I_{2n} \\ \hline -I_{2n} & 0_{2n} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c|c} \Phi_n & 0_{2n} \\ \hline 0_{2n} & \Phi_n \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c|c} 0_{2n} & I_{2n} \\ \hline -I_{2n} & 0_{2n} \end{array} \right), \quad (3.22)$$

de donde se deduce que $\Phi_n^T \Phi_n = I_{2n}$ (i.e. $\Phi_n \in O(2n)$). Pero además,

$$\begin{aligned} & \left(\begin{array}{c|c} 0_n & I_n \\ \hline -I_n & 0_n \end{array} \right) \left(\begin{array}{c|c} \operatorname{Im} H(t) & \operatorname{Re} H(t) \\ \hline -\operatorname{Re} H(t) & \operatorname{Im} H(t) \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c|c} \operatorname{Im} H^T(t) & -\operatorname{Re} H^T(t) \\ \hline \operatorname{Re} H^T(t) & \operatorname{Im} H^T(t) \end{array} \right) \left(\begin{array}{c|c} 0_n & I_n \\ \hline -I_n & 0_n \end{array} \right) = \\ & = \left(\begin{array}{c|c} -\operatorname{Re} H(t) & \operatorname{Im} H(t) \\ \hline -\operatorname{Im} H(t) & -\operatorname{Re} H(t) \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c|c} \operatorname{Re} H(t) & -\operatorname{Im} H(t) \\ \hline \operatorname{Im} H(t) & \operatorname{Re} H(t) \end{array} \right) = 0_{2n} \end{aligned} \quad (3.23)$$

por lo que estos bloques de $A(t)$ también definen un sistema simpléctico, para el cual Φ_n es la matriz de transferencia. De nuevo, por ser simplécticos los métodos de Gauss RK, se tiene que $\Phi_n \in \operatorname{Sp}(2n)$. Por ser ortogonal y simpléctica, Φ_n es isomorfa por (2.12) a una matriz unitaria. \square

En Ref. [19], además se esta demostración, se prueba que los métodos de Gauss RK son de hecho los únicos métodos Runge-Kutta unitarios. Además, también se generaliza este resultado al caso en el que Ec. (3.14) pierde la linealidad permitiendo que el hamiltoniano $H \equiv H(t, U)$ dependa de t y U .

Capítulo 4

Aplicación práctica: modelo de interacción luz-materia

Este capítulo es una aplicación práctica de los anteriores. En computación cuántica, un modelo sencillo (y sin embargo no integrable, pero muy usado) es un modelo semiclásico de interacción luz-materia. En este sistema, la materia (ya sea una molécula vibrando en el seno de un gas, electrones orbitando en torno a un átomo, o un punto cuántico¹) se modeliza como un sistema cuántico de dos estados: su estado fundamental $|0\rangle$ y el primer estado excitado $|1\rangle$.² La luz sin embargo, se trata de manera clásica³ como una onda electromagnética armónica plana, que interactúa con la materia a través de su campo eléctrico.

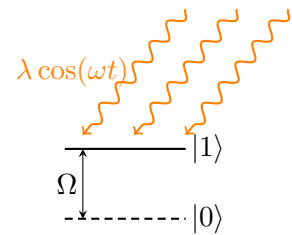


Figura 4.1: Diagrama de niveles de un *qubit* sometido a radiación electromagnética.

En *unidades naturales*⁴ –habituales en física teórica– el hamiltoniano de este sistema viene dado por

$$H(t) = \frac{1}{2}\Omega\sigma_z + \lambda \cos(\omega t)\sigma_x, \quad (4.1)$$

donde Ω es el salto energético del *qubit* entre el nivel fundamental y el excitado, λ es la constante de acoplo entre el *qubit* y la onda electromagnética, ω es la frecuencia angular de la onda ($\Omega, \omega, \lambda \in \mathbb{R}^+$) y σ_z, σ_x denotan las respectivas matrices de Pauli (Ec. (1.31)).

Este hamiltoniano está compuesto por dos términos

$$H(t) = H_0 + H_{int}(t) \quad H_0 = \frac{1}{2}\Omega\sigma_z \quad \wedge \quad H_{int}(t) = \lambda \cos(\omega t)\sigma_x, \quad (4.2)$$

que se corresponden con el hamiltoniano H_0 del *qubit* cuando éste evoluciona libremente y el hamiltoniano $H_{int}(t)$ de interacción con la onda electromagnética. En particular, la evolución

¹Los puntos cuánticos o “*quantum-dots*” son nanoestructuras creadas artificialmente, generalmente con el fin de servir de *qubits* en computación cuántica.

²En la práctica, casi todos los sistemas cuánticos tienen infinitos estados energéticos; sin embargo, sí es común encontrar sistemas en los que el segundo, tercer y sucesivos estados excitados sean demasiado energéticos como para ser alcanzados con la energía proporcionada por la luz incidente. Para estos sistemas este modelo supone una buena aproximación.

³Para conocer cómo cambia este modelo al tratar a la luz de manera cuántica, véase Ref. [13].

⁴El sistema de unidades se escoge de manera que las constantes universales tengan valor igual a 1 ($c = \hbar = G = k_e = k_B = 1$). Por ello, no deberá resultarle extraño al lector si a lo largo del capítulo tratamos a energías E como frecuencias angulares ω o viceversa, ya que ambas vienen identificadas por la *relación de Planck-Einstein* $E = \hbar\omega$.

dinámica (Ec. 2.18) del sistema desacoplado resulta fácil de calcular:

$$\frac{d}{dt}U_0(t) = -iH_0U_0(t) \quad U_0(0) = I_2; \quad U_0(t) = \exp(-itH_0) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\Omega t}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\Omega t}{2}} \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Podemos usar la matriz $U_0(t)$ para hacer un cambio de variable

$$U(t) = U_0(t)V(t) \quad (4.4)$$

con el que poder simplificar la ecuación diferencial Ec. 2.18 del sistema acoplado,

$$\begin{aligned} -i(H_0 + H_{int}(t))U(t) &= \frac{d}{dt}U(t) = \frac{d}{dt}(U_0(t)V(t)) = -iH_0U_0(t)V(t) + U_0(t)\frac{d}{dt}V(t); \\ \frac{d}{dt}V(t) &= -iU_0^\dagger(t)H_{int}(t)U_0(t)V(t) = -i\tilde{H}(t)V(t). \end{aligned} \quad (4.5)$$

La nueva variable $V(t)$ da cuenta de cuánto difiere la solución del sistema cuando interactúa con la onda electromagnética a cuando evoluciona libremente, y vemos que su evolución dinámica

$$\frac{d}{dt}V(t) = -i\tilde{H}(t)V(t) \quad V(0) = I_2 \quad (4.6)$$

viene dada por el hamiltoniano

$$\tilde{H}(t) = U_0^\dagger(t)H_{int}(t)U_0(t) = \begin{pmatrix} 0 & \lambda e^{i\Omega t} \cos(\omega t) \\ \lambda e^{-i\Omega t} \cos(\omega t) & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Para el caso $\omega = \Omega = 0$, la solución del sistema es $V(t) = \cos(\lambda t)I_2 - i \sin(\lambda t)\sigma_x$. Esta solución armónica –conocida como *oscilaciones de Rabi*– es muy importante en computación cuántica,⁵ donde se utiliza para pasar el sistema del estado fundamental al excitado o viceversa en un intervalo de tiempo $\Delta t = \pi/(2\lambda)$ (véase Fig. 4.3).

En el resto de casos, nos vemos obligados a recurrir a los algoritmos numéricos desarrollados en el Capítulo 3 para estudiar la evolución dinámica del sistema. En Fig. 4.2, representamos cuatro ejemplos de la dinámica sobre la esfera de Bloch: el caso 4.2.(a) se corresponde con oscilaciones de Rabi; 4.2.(b) es otro caso en el que también se produce resonancia ($\Omega = \omega$) entre el *qubit* y la luz incidente; en 4.2.(c) la onda electromagnética introduce demasiada energía en el sistema ($\Omega > \omega$), provocando una trayectoria muy irregular; y en 4.2.(d) la onda es demasiado poco energética ($\omega < \Omega$) como para ayudar a salvar el desnivel energético del *qubit*, así que el sistema no se distancia del estado fundamental. En cualquier caso, no se puede excitar totalmente el *qubit* sin un haz de luz resonante.

Método de Euler	Gauss RK de orden 2
$\begin{pmatrix} 1 & -i\lambda h \cos(\omega t_n) e^{i\Omega t_n} \\ -i\lambda h \cos(\omega t_n) e^{-i\Omega t_n} & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{4-\lambda^2 h^2 \cos^2(\omega(t_n + \frac{h}{2}))}{4+\lambda^2 h^2 \cos^2(\omega(t_n + \frac{h}{2}))} & \frac{-4i\lambda h e^{i\Omega(t_n + h/2)} \cos(\omega(t_n + \frac{h}{2}))}{4+\lambda^2 h^2 \cos^2(\omega(t_n + \frac{h}{2}))} \\ \frac{-4i\lambda h e^{-i\Omega(t_n + h/2)} \cos(\omega(t_n + \frac{h}{2}))}{4+\lambda^2 h^2 \cos^2(\omega(t_n + \frac{h}{2}))} & \frac{4-\lambda^2 h^2 \cos^2(\omega(t_n + \frac{h}{2}))}{4+\lambda^2 h^2 \cos^2(\omega(t_n + \frac{h}{2}))} \end{pmatrix}$

Tabla 4.1: Matrices de transferencia generadas por el método de Euler (no unitaria) y el método de Gauss RK de orden 2 (unitaria), aplicados a la Ecuación (4.6).

El método numérico que hemos usado para estas simulaciones es el de Gauss Runge-Kutta de orden 2. Gracias a que el método es unitario, las trayectorias numéricas no abandonan la

⁵En realidad, en la práctica el parámetro de control suele ser λ ya que depende, entre otras, de la intensidad de la luz a la que se somete el *qubit*; por lo que las oscilaciones de Rabi se generan elevando mucho este parámetro hasta que $\lambda \gg \Omega, \omega$.

superficie de la esfera de Bloch (véase Sec. A.5). En la Tabla 4.1, se presentan las matrices de transferencia debidas a este método y –para comparar– al método de Euler, que es explícito y por tanto no unitario (véase la Tabla B.1).

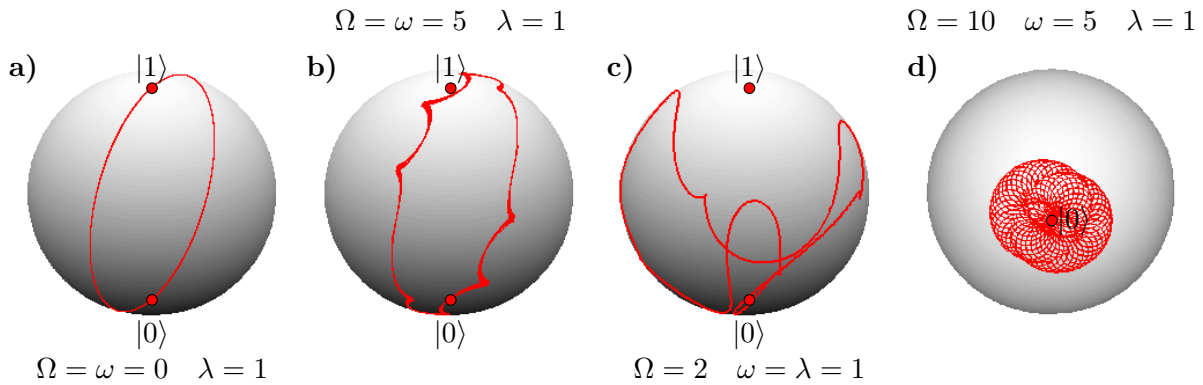


Figura 4.2: Trayectorias sobre la esfera de Bloch del sistema (4.6) bajo distintos valores de los parámetros $\Omega, \omega, \lambda \in \mathbb{R}^+$ y partiendo del estado fundamental $|0\rangle$. Simulación realizada con el método de Gauss RK de orden 2 y paso de iteración $h = 0,01$.

Para finalizar, veamos las ventajas que ofrece trabajar con un método numérico unitario frente a otros métodos de Runge-Kutta. En la Figura 4.3, mostramos –en función del tiempo t de evolución del sistema– la probabilidad $\text{Pr}_{0-1}(t)$ de que el *qubit* se excite tras haber partido del estado fundamental $|0\rangle$. Esta probabilidad se puede obtener como el valor esperado (Ec. (1.3)) del proyector ortogonal $|1\rangle\langle 1|$ que define el estado excitado:

$$\text{Pr}_{0-1}(t) = \frac{\langle 0|V^\dagger(t)|1\rangle\langle 1|V(t)|0\rangle}{\langle 0|V^\dagger(t)V(t)|0\rangle} = |\langle 1|V(t)|0\rangle|^2. \quad (4.8)$$

Sobre la gráfica, se han dibujado las soluciones numéricas obtenidas con los métodos de Euler y Gauss RK de orden 2. Se puede observar que, pese a ser dos métodos RK con el mismo número de pasos ($s = 1$), el método de Gauss RK logra aproximar mejor el sistema, ya que tiene un orden mayor. Pero además, la solución calculada con el método de Euler acaba dando lugar a probabilidades mayores que 1, lo que ejemplifica claramente las consecuencias que puede tener el no respetar la geometría del problema.

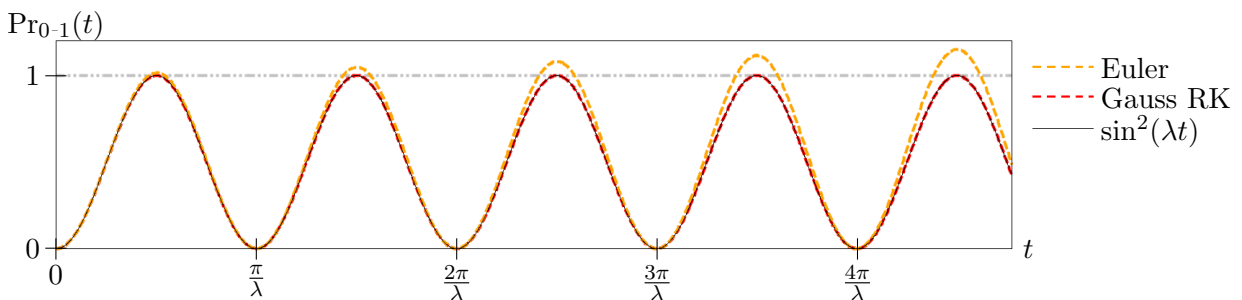


Figura 4.3: Probabilidad de excitación $\text{Pr}_{0-1}(t)$ de un *qubit* que parte del estado $|0\rangle$ y evoluciona durante un tiempo t produciendo oscilaciones de Rabi ($\Omega = \omega = 0$). En línea naranja discontinua se muestra la solución simulada mediante el método de Euler, y en rojo discontinuo la simulada mediante el método de Gauss RK de orden 2, ambas con un paso de iteración $h = (100\lambda)^{-1}$. Superponiéndose a la simulación de Gauss RK, se ha mostrado en negro la solución exacta $\text{Pr}_{0-1}(t) = \sin^2(\lambda t)$.

Lo que en el fondo sucede, es que mientras que los métodos unitarios no sacan la solución simulada de la superficie de la esfera de Bloch, los métodos no unitarios sí. Para ilustrar esto, en la Figura 4.4 hemos mostrado la evolución de dos magnitudes relacionadas con la *matriz de*

densidad $\rho(t) = V(t) |0\rangle \langle 0| V^\dagger(t)$ del sistema (véanse los Apartados A.4 y A.5). La primera, es su traza $\text{Tr}\rho$ que debería ser uno⁶ por ser $\rho(t) \in \mathcal{D}(\mathbb{C}^2)$, y la segunda es su *pureza*

$$\text{Tr}\rho^2 = \frac{1 + \|\vec{x}\|_2^2}{2} \quad \text{con } \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \text{ definido por } \frac{1}{2}I_2 + \frac{1}{2}\vec{x} \cdot \vec{\sigma} = \rho, \quad (4.9)$$

que debería ser también uno, esta vez por ser $\rho(t) \in \mathcal{D}^1(\mathbb{C}^2)$. Vemos que sin embargo las simulaciones sólo respetan estas características del sistema cuántico cuando se ejecutan usando métodos unitarios. En concreto, mientras que el método de Euler aumenta estas cantidades, el método de Runge-Kutta de cuarto orden las reduce. Para este último, hemos usado un paso de iteración mucho más grande para poder apreciar el error que este método de alto orden introduce en el sistema.

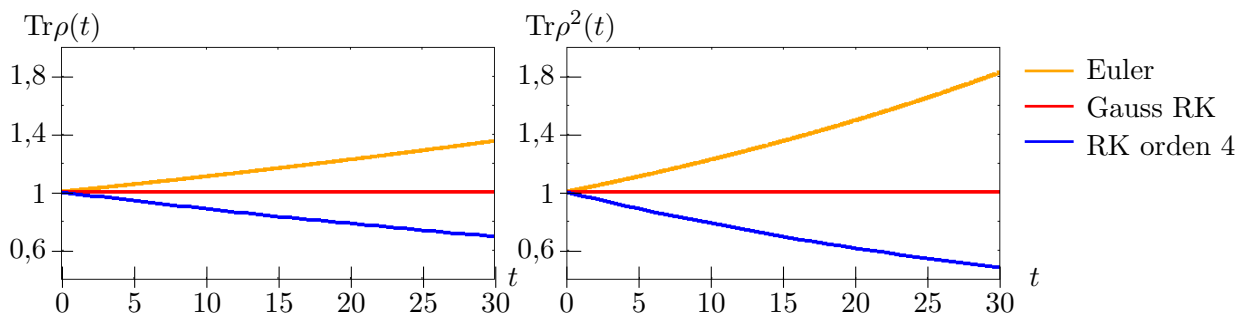


Figura 4.4: Simulaciones de la traza $\text{Tr}\rho(t)$ y pureza $\text{Tr}\rho^2(t)$ asociadas a la matriz de densidad del sistema, cuando parte del estado fundamental y se somete a oscilaciones de Rabi ($\Omega = \omega = 0$, $\lambda = 1$) durante un tiempo t . En naranja, la simulación obtenida mediante el método de Euler con un paso de iteración $h = 0,01$; en rojo, la obtenida mediante el método de Gauss RK de orden 2 y paso $h = 0,01$; y en azul, la obtenida mediante el método RK de orden 4 y paso $h = 1$.

⁶Esta condición tiene su razón de ser en la interpretación probabilística de la mecánica cuántica: del mismo modo que la probabilidad de encontrar al *qubit* en el estado excitado se calcula como $\langle 1| \langle 1|_\rho$ (siendo ρ la matriz de densidad que define el estado del sistema), la probabilidad del *suceso seguro* se calcula como $\langle I_2|_\rho$; por lo tanto $1 = \text{Tr}(\rho I_2) = \text{Tr}\rho$.

Conclusiones

En este trabajo hemos formulado la mecánica cuántica en términos geométricos, estructurando el espacio de estados del formalismo de Schrödinger como una variedad de Kähler. Esta geometrización nos ha ayudado a identificar el grupo de transformaciones mecano-cuánticas con el grupo unitario $U(n)$ (en el caso de dimensión compleja n). Este grupo de Lie, que condensa toda la geometría cuántica, ha probado ser útil en muchos aspectos:

- Primero, permite ver si dos formulaciones distintas son equivalentes analizando si sus grupos de transformaciones son isomorfos. En nuestro caso, comprobábamos que la formulación de la física cuántica en términos de una variedad de Kähler real y compleja coinciden, dando el isomorfismo $O(2n) \cap Sp(2n) \cong U(n)$.
- Segundo, permite encontrar de manera natural la evolución dinámica del sistema a partir de un elemento del álgebra de Lie asociada al grupo. En nuestro caso, dicho elemento es $-iH$ donde H es el operador hamiltoniano.
- Tercero, permite relacionar las distintas imágenes o formalismos de la teoría con las distintas representaciones del grupo. Ejemplos de esto son la asociación entre la imagen de Schrödinger y la representación natural del grupo unitario, entre la imagen de Heisenberg y la representación adjunta, o el formalismo de matrices de densidad de von Neumann y la representación coadjunta.
- Cuarto, el grupo supone un soporte matemático apropiado para aplicar integradores numéricos que además, si respetan la estructura del grupo, son integradores geométricos pues respetan la geometría tras la teoría.

En relación a este último aspecto, también hemos podido identificar a los métodos de Gauss RK como la única familia de integradores de tipo Runge-Kuta unitarios. Una cuestión abierta que dejamos para futuras investigaciones, es si existen otro tipo de métodos, más allá de los métodos RK, que también sean unitarios. Una respuesta parcial a esta pregunta se da en Ref. [19], donde también prueban que no existen *métodos lineales multipaso* unitarios. Sin embargo, se han descubierto muchos otros tipos de integradores simplécticos (Ref. [17]) que, por ser precisamente simplécticos, son buenos candidatos a ser unitarios.

Otra cuestión abierta, es si se pueden generalizar todos nuestros resultados al caso de que el espacio de Hilbert \mathcal{H} sobre el que se postula la mecánica cuántica tenga dimensión infinita. En ese caso, la topología –de la cual no hemos hablado, aunque siempre ha estado presente a través de la definición de variedad diferenciable– adquiere un papel más activo en la teoría. Por ejemplo, el espacio de operadores se puede dotar de la topología uniforme, la topología fuerte, la débil, etc. Aunque en dimensión finita son todas equivalentes, un buen paso hacia la generalización infinito-dimensional sería hacer una referencia más explícita a la topología usada en las demostraciones.

Bibliografía

- [1] ASOREY, M., CARIÑENA, J. F., AND IBORT, L. A. Generalized canonical transformations for time-dependent systems. *Journal of Mathematical Physics* 24, 12 (1983), 2745–2750.
- [2] BALLMANN, W. *Lectures on Kähler Manifolds*. ESI lectures in mathematics and physics. European Mathematical Society, 2006.
- [3] BUTCHER, J. C. Implicit Runge-Kutta Processes. *Mathematics of Computation* 18, 85 (1964), 50–64.
- [4] CANTONI, V. The Riemannian structure on the states of quantum-like systems. *Communications in Mathematical Physics* 56, 2 (1977), 189–193.
- [5] CARIÑENA, J. F., CLEMENTE-GALLARDO, J., AND MARMO, G. Geometrization of quantum mechanics. *Theoretical and Mathematical Physics* 152, 1 (2007), 894–903.
- [6] CARIÑENA, J. F., IBORT, A., MARMO, G., AND MORANDI, G. *Geometry from Dynamics, Classical and Quantum*. Springer Netherlands, 2015.
- [7] CARNICER, J. *Análisis Numérico*. Departamento de Matemática Aplicada, Universidad de Zaragoza, 2014.
- [8] CIRELLI, R., AND LANZAVECCHIA, P. Hamiltonian vector fields in quantum mechanics. *Il Nuovo Cimento B* 79, 2 (1984), 271–283.
- [9] CLEMENTE-GALLARDO, J. The Geometrical Formulation of Quantum Mechanics. *Revista Real Academia de Ciencias de Zaragoza* 67 (2012), 51–103.
- [10] DEKKER, K., AND VERWER, J. G. *Stability of Runge-Kutta Methods for Stiff Nonlinear Differential Equations*. Amsterdam: North-Holland, 1984.
- [11] FRANCO, A. Formalismo geométrico de la Mecánica Cuántica y sus aplicaciones. *Trabajo de fin de grado. Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza* (2015).
- [12] ISERLES, A. *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, 1996.
- [13] JAYNES, E. T., AND CUMMINGS, F. W. Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser. *Proceedings of the IEEE* 51, 1 (1963), 89–109.
- [14] KÄHLER, E. Über eine bemerkenswerte Hermitesche Metrik. *Abhandlungen aus dem Mathematischen Seminar der Universität Hamburg* 9, 1 (1933), 173–186.
- [15] KIBBLE, T. W. B. Geometrization of quantum mechanics. *Comm. Math. Phys.* 65, 2 (1979), 189–201.
- [16] KLEIN, F. A comparative review of recent researches in geometry. *Bull. New York Math. Soc.* 2, 10 (07 1893), 215–249.

- [17] KONG, L., LIU, R., AND ZHENG, X. A survey on symplectic and multi-symplectic algorithms. *Applied Mathematics and Computation* 186, 1 (2007), 670 – 684.
- [18] LE BELLAC, M. *A Short Introduction to Quantum Information and Quantum Computation*. Cambridge University Press, 2006.
- [19] LUCA DIECI, ROBERT D. RUSSELL, E. S. V. V. Unitary Integrators and Applications to Continuous Orthonormalization Techniques. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 31, 1 (1994), 261–281.
- [20] LUNDELL, A. T. A Short Proof of the Frobenius Theorem. *Proceedings of the American Mathematical Society* 116, 4 (1992), 1131–1133.
- [21] QIN, M.-Z., AND ZHU, W.-J. Canonical Runge-Kutta-Nyström (RKN) methods for second order ordinary differential equations. *Computers & Mathematics with Applications* 22, 9 (1991), 85 – 95.
- [22] SALA, P. Formulación simpléctica de la Mecánica Cuántica. *Trabajo de fin de grado. Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza* (2015).
- [23] SANZ-SERNA, J. M. Runge-Kutta schemes for Hamiltonian systems. *BIT Numerical Mathematics* 28, 4 (1988), 877–883.
- [24] SANZ-SERNA, J. M. Symplectic integrators for Hamiltonian problems: an overview. *Acta Numerica* 1 (1 1992), 243–286.
- [25] STYER, D. F., BALKIN, M. S., BECKER, K. M., BURNS, M. R., DUDLEY, C. E., FORTH, S. T., GAUMER, J. S., KRAMER, M. A., OERTEL, D. C., PARK, L. H., RINKOSKI, M. T., SMITH, C. T., AND WOTHERSPOON, T. D. Nine formulations of quantum mechanics. *American Journal of Physics* 70, 3 (2002), 288–297.
- [26] TSE, P.-S. P. Lie Group Methods in Geometric Integration. *MSc thesis. University of Auckland, New Zealand* (2003).