Esta hoja es una continuación de la anterior. Recuerda que en ella habíamos aprendido a resolver la ecuación de Schrödinger para sistemas de dos estados con Hamiltonianos independientes del tiempo. Esto es, la ecuación

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \tag{1}$$

donde H es una matriz hermítica constante 2×2 y Ψ es un vector de dos coordenadas que dependen del tiempo. Como no hay posiciones, en realidad en (1) la derivada es total y estamos resolviendo una EDO (ecuación diferencial ordinaria). Si las coordenadas son $a(t)$ y $b(t)$, recuerda que la notación física habitual es $|\Psi\rangle = a(t)|+\rangle + b(t)|-\rangle$ donde $|+\rangle$ y $|-\rangle$. Los dos estados, no son más que el $\vec{e}_1$ y el $\vec{e}_2$ que escribimos los matemáticos. A veces las notaciones Ψ y $|\Psi\rangle$ encierran una sutil diferencia y cuando se escribe $|\Psi\rangle$ uno se refiere al estado, es decir, al multiplicar Ψ por una constante o normalizarla tenemos el mismo $|\Psi\rangle$, mientras que Ψ es más la función de ondas como función matemática. No lo tomes al pie de la letra porque es fácil encontrar excepciones.

Como ya te conté, en la resonancia magnética nuclear H depende del tiempo y no está claro que los métodos de la hoja anterior sirvan. Por eso hay que revisar la definición del operador de evolución temporal. La serie ahora es inútil (y evitaré denotarlo con la exponencial para no causar confusión) y lo que subsiste es la definición general: $U(t)$ es un operador, en nuestro caso una matriz 2×2, tal que la solución de (1) en tiempo t es $|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$. Por si te suena del curso de ecuaciones diferenciales de segundo, en matemáticas $U(t)$ es esencialmente lo que se llama *matriz fundamental* de la ecuación diferencial [dG75].

A pesar de que (1) es lineal, resolverla tiene más miga de lo que parece. Recordemos en primer lugar cómo se resolvían en segundo las lineales con coeficientes constantes, para escalares y vectores:

$$\left.\begin{array}{l} x'(t) = ax(t) \\ x(0) = x_0 \end{array}\right\} \Rightarrow\ x(t) = e^{at}x_0 \qquad\qquad \left.\begin{array}{l} \vec{x}\,'(t) = A\vec{x}(t) \\ \vec{x}(0) = \vec{x}_0 \end{array}\right\} \Rightarrow\ \vec{x}(t) = e^{At}\vec{x}_0$$

(a constante escalar) $\qquad\qquad$ (A matriz $n\times n$ constante)

En el lenguaje de la física se tiene que $U(t) = e^{At}$ es el operador de evolución temporal que lleva el dato inicial $\vec{x}_0$ en tiempo cero a la solución en tiempo t. Para los sistemas de dos estados ($n = 2$), según hemos visto, era fácil hallar e^{At} gracias a que A es hermítica y se puede escribir, salvo múltiplos de la identidad como una combinación lineal de las matrices de Pauli.

1) [Muy fácil] Si, a pesar de la hoja anterior, no te sientes cómodo con esto, recuerda cómo se definía la exponencial de una matriz en general y comprueba que realmente $e^{At}\vec{x}_0$ es solución del problema.

¿Qué ocurre en el caso escalar si $a = a(t)$? También sabemos resolverlo porque la ecuación es de variables separables. La fórmula es un poco más complicada

$$\text{(2)} \qquad \left.\begin{array}{l} x'(t) = a(t)x(t) \\ x(0) = x_0 \end{array}\right\} \quad \Rightarrow \quad x(t) = \exp\Big(\int_0^t a(u)\,du\Big)x_0.$$

2) Comprueba que esto es cierto y, para practicar, resuelve con esta fórmula la ecuación $x'(t) = x(t)/(1+t)$ con $x(0) = 10$.

Teniendo en cuenta lo anterior, uno apostaría a que en el caso vectorial el operador de evolución temporal es $U(t) = \exp\Big(\int_0^t A(u)\,du\Big)\vec{x}_0$, esto es, que

$$\text{(3)} \qquad \left.\begin{array}{l} \vec{x}\,'(t) = A(t)\vec{x}(t) \\ \vec{x}(0) = \vec{x}_0 \end{array}\right\} \quad \overset{(?)}{\Rightarrow} \quad \vec{x}(t) = \exp\Big(\int_0^t A(u)\,du\Big)\vec{x}_0$$

donde la integral de la matriz es elemento a elemento. Pues bien, esta implicación rara vez es cierta.

3) Encuentra un ejemplo simple de A no constante en que la implicación sea válida cualquiera que sea $\vec{x}_0$.

A pesar de que casi todo es un contraejemplo, no es tan fácil buscar una matriz $A(t)$ con la que se puedan hacer las cuentas razonablemente rápido. Te cuento el más sencillo que se me ha ocurrido, con indicaciones para que haya más de comprobar y menos de calcular.

4) Considera la ecuación diferencial de (3) con

$$A(t) = \begin{pmatrix} 1 & 2t \\ 0 & 2t \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad \vec{x}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

y comprueba que la solución tiene coordenadas $x_1(t) = 2e^t \int_0^t ue^{u^2-u}\,du$, $x_2(t) = e^{t^2}$. La integral está indicada porque no se puede expresar en términos de funciones elementales.

5) Ahora calcula $\exp\big(\int_0^t A(u)\,du\big)$. Para ello aprovecha (no hace falta que lo compruebes o deduzcas) que

$$\begin{pmatrix} t & t^2 \\ 0 & t^2 \end{pmatrix} = C\begin{pmatrix} t & 0 \\ 0 & t^2 \end{pmatrix}C^{-1} \quad \text{con} \quad C = \begin{pmatrix} 1 & t^2 \\ 0 & t^2-t \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad C^{-1} = \frac{1}{t^2-t}\begin{pmatrix} t^2-t & -t^2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

y la propiedad $e^{CAC^{-1}} = Ce^AC^{-1}$ que vimos en la primera hoja.

6) Comparando los dos ejercicios anteriores, deduce que $\exp\big(\int_0^t A(u)\,du\big)\vec{x}_0$ no es solución del problema planteado.

Ahora viene el problema interesante (que quizá te cueste):

7) ¿Qué es lo que falla en la implicación de (3)? Aparentemente si uno sustituye $\vec{x}(t) = \exp\big(\int_0^t A(u)\,du\big)\vec{x}_0$ sale que cumple $\vec{x}\,'(t) = A(t)\vec{x}(t)$ pero acabamos de encontrar un contraejemplo. ¿Cómo se explica esta paradoja?

El teorema que hay debajo es que la implicación de (3) es cierta si[1] $[A(t_1), A(t_2)] = 0$, es decir, si $A(t_1)$ y $A(t_2)$ conmutan, para cualesquiera t_1, t_2. Si el ejercicio siguiente se te hace muy cuesta arriba, pide ayuda.

8) Prueba este teorema empezando por ver que bajo esas hipótesis $B(t) = \int_0^t A(u)\,du$ y $B'(t) = A(t)$ conmutan.

Ahora volvamos a la mecánica cuántica. Según el teorema que acabamos de ver, podemos resolver con la fórmula (3) algunos ejemplos especiales correspondientes a sistemas de dos estados dependientes del tiempo.

9) El Hamiltoniano $H = -\cos(\omega t)S_z$ con $\omega > 0$ una constante, corresponde a un campo magnético variable en la dirección z que oscila con *frecuencia angular* ω. Calcula el operador de evolución temporal $U(t)$. Si se parte del estado inicial $|y+\rangle$, calcula la función que da probabilidad de medir $|y-\rangle$ en un instante dado t.

Con esto nos acercamos a la resonancia magnética. Si a un columpio lo empujamos con poca fuerza pero con la misma frecuencia a la que oscila, la amplitud irá creciendo. Se dice que hay resonancia. De la misma forma, si hacemos pequeñas variaciones del campo magnético con la misma frecuencia que la del movimiento de precesión, conseguiremos que el ángulo aumente.

En la resonancia magnética nuclear empleada en las imágenes médicas, se usa el movimiento de precesión de los protones (que al igual que los electrones, tienen espín) cuando se les somete a un campo magnético muy fuerte, digamos en la dirección del eje z, $\vec{B} = (0, 0, B_0)$ y se añade otro variable mucho más débil, producido por ondas de radio, en el plano xy oscilando armónicamente $\vec{B} = (B_1\cos(\omega t), -B_1\sin(\omega t), 0)$ donde $\omega > 0$ es una constante. En total, con lo visto en la hoja anterior, se tiene una Hamiltoniano del tipo

$$H = -v_1\cos(\omega t)S_x + v_1\sin(\omega t)S_y - v_0 S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} -v_0 & -v_1 e^{i\omega t} \\ -v_1 e^{-i\omega t} & v_0 \end{pmatrix} \tag{4}$$

donde $v_0 = \gamma B_0$ es grande y $v_1 = \gamma B_1$ es pequeño[2] y suponemos ambos positivos.

Ahora viene el jarro de agua fría:

[1] La notación $[A, B] = AB - BA$, el *conmutador*, es muy común en física y matemáticas para matrices u operadores.

[2] Para los protones $\gamma = 2{,}6751 \cdot 10^8$, en el sistema internacional, y en la práctica médica $B_0 \approx 2$ y $B_1 \approx 10^{-6}$.

10) Comprueba que para H como en (4), en general no se tiene $[H(t_1), H(t_2)] = 0$.

Esto lleva a plantearnos de nuevo si existe una fórmula mágica para resolver (3). Los físicos dicen que basta reemplazar exp por la *time ordered exponential* Texp que apareció de pasada en algo que te mandé leer pero eso es en la práctica dar un nombre a la solución general de la ecuación, Texp no tiene ninguna fórmula manejable.

Lo que vamos a hacer es extender el teorema: Supongamos que existe una matriz no singular $B(t)$ tal que $\widetilde{A}(t) = -B^{-1}(t)B'(t) + B^{-1}(t)A(t)B(t)$ tiene la propiedad de conmutación $[\widetilde{A}(t_1), \widetilde{A}(t_2)] = 0$, entonces la solución de (3) es $\vec{x}(t) = B(t)\exp\Big(\int_0^t \widetilde{A}(u)\,du\Big)B^{-1}(0)\vec{x}_0$.

Nota que esto efectivamente extiende el teorema porque para $B(t) = \mathrm{Id}$ obtenemos lo de antes ya que $\widetilde{A}(t) = A(t)$.

11) Prueba el nuevo teorema. Indicación: Es mucho más fácil de lo que parece porque se reduce al anterior. Basta con que compruebes que la ecuación $\vec{y}\,'(t) = \widetilde{A}(t)\vec{y}(t)$, con el cambio de variable $\vec{x}(t) = B(t)\vec{y}(t)$ se transforma en la ecuación original $\vec{x}\,'(t) = A(t)\vec{x}(t)$. Quizá necesites notar que la derivada de $\mathrm{Id} = B(t)B^{-1}(t)$ es nula.

Con esto ya estamos preparados para atacar el problema de la resonancia magnética. Con el Hamiltoniano (4), la ecuación de Schrödinger (1) corresponde a la EDO (3) con

$$A(t) = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} v_0 & v_1 e^{i\omega t} \\ v_1 e^{-i\omega t} & -v_0 \end{pmatrix}.$$

Ahora nos inventamos $B(t) = e^{i\omega t\sigma_z/2}$. Esto no viene tan llovido del cielo como parece. Representa en la esfera de Bloch un giro de frecuencia angular ω alrededor del eje z y en un sistema de referencia de este tipo veríamos el campo magnético estático, por tanto el término $B^{-1}(t)A(t)B(t)$ que aparece en $\widetilde{A}$ debería ser constante. De hecho no vamos a tener que utilizar el teorema en toda su fuerza, la propia $\widetilde{A}$ será constante.

12) Prueba que con la elección de $B(t) = e^{i\omega t\sigma_z/2}$ se tiene

$$\widetilde{A}(t) = \frac{i}{2}\big(v_1\sigma_x + (v_0-\omega)\sigma_z\big)$$

y deduce de ello que el operador de evolución temporal es

$$U(t) = e^{i\omega t\sigma_z/2}\Big(\mathrm{Id}\cos\big(\frac{tL}{2}\big) + i\big(\frac{v_1}{L}\sigma_x + \frac{v_0-\omega}{L}\sigma_z\big)\sin\big(\frac{tL}{2}\big)\Big)$$

donde $L = \sqrt{v_1^2 + (v_0-\omega)^2}$.

Sólo vamos a hacer la multiplicación en casos especiales.

13) Bajo la hipótesis inicial de que v_1 es mucho menor que v_0, deduce que si ω es también mucho menor que v_0, entonces

$$U(t) \approx U_1(t) := \mathrm{Id}\cos\big(\frac{t}{2}(\omega+L)\big) + i\sigma_z \sin\big(\frac{t}{2}(\omega+L)\big);$$

mientras que si $\omega = v_0$ (resonancia)

$$U(t) \approx U_2(t) := \Big(\mathrm{Id}\cos\big(\frac{v_0 t}{2}\big) + i\sigma_z \sin\big(\frac{v_0 t}{2}\big)\Big)\Big(\mathrm{Id}\cos\big(\frac{v_1 t}{2}\big) + i\sigma_x \sin\big(\frac{v_1 t}{2}\big)\Big).$$

Indicación: No te líes con cuentas largas, lo único que quiero es que aproximes v_1/L y $(v_0-\omega)/L$ por 0 ó 1, según corresponda.

14) Prueba que $U_1(t)|+\rangle$ es el vector constante $(0,0,1)$ en la esfera de Bloch mientras que para t cercano a $\pi/(2v_1)$ pero con $v_0 t$ variando (esto es posible porque v_0 es mucho mayor que v_1), se tiene

$$U_2(t)|+\rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2}} e^{iv_0 t/2}\big(|+\rangle + ie^{-iv_0 t}|-\rangle\big)$$

que en la esfera de Bloch corresponde a un vector que gira en el plano XY. Físicamente, lo que ocurre es que el estado $|+\rangle$, que fuera de la frecuencia de resonancia permanece casi constante, muestra grandes oscilaciones cuando se produce la resonancia.

Te explico por encima lo que sé acerca de cómo se usa esto en las imágenes médicas. El campo B_1 en realidad no es uniforme, varía de punto en punto. Como hemos visto en el último ejercicio, para cierto rango de t relacionado con B_1 se producen oscilaciones planas muy rápidas de los protones (núcleos de hidrógeno) en ese punto, lo cual es detectable porque emiten ondas electromagnéticas particulares. Si no recibimos nada es que ese punto está vacío de protones. Esto es lo básico para tener una imagen en blanco y negro pero no es demasiado preciso. Se usan dos parámetros más. Igual que los péndulos a la larga se paran si no damos cuerda al reloj, aunque en teoría la precesión una vez iniciada no debe parar, cuando se reduce v_1 a cero el giro tiende cesar y además como v_0 es tan grande, el estado tiende a $|+\rangle$ para alinearse con $\vec{B}$. El "rozamiento" que causa estas paradas es la influencia de los protones y átomos circundantes. Resulta que estos tiempos de parada y de recuperación al estado inicial, llamados T_2 y T_1 (la definición de verdad es algo más complicada) caracterizan en parte ciertos tipos de tejidos con lo cual se pueden distinguir en la imagen final.

En [Wik16] hay una animación con unas gráficas que te puede aclarar la situación. Hay también otra con una bola y unas flechas pero ahí aparecen cosas que no hemos visto.

Si te interesa el tema, sobre todo en tu vertiente práctica te recomiendo que des un vistazo al artículo [Dor04]. No lo tomes como obligación, sólo si tienes tiempo y ganas. Lo puedes encontrar en `http://www.ias.ac.in/article/fulltext/reso/010/12/0203-0216` y en otros sitios, seguramente de descarga más rápida.

Hace años vi un libro por la red [Hor14] sobre el tema. Lo he mirado poco pero parece interesante.

Ahora vamos con lo que tienes que escribir para tu trabajo y entregarme. El máximo son unas seis páginas a no ser que después de leer lo que comento al final de esta hoja quieras ampliarlas.

15) Escribe sobre lo que has aprendido de los sistemas de dos estados en las dos últimas hojas, siguiendo las siguientes directrices:

Hoja 4:

1. Habla del ejemplo (1), resolviendo **1)** y añadiendo lo que quieras (que puede ser nada) de **2)**, **3)** y **4)**.
2. Pon unas palabras para introducir (2) y resuelve **6)**.
3. Habla de los sistemas de dos estados y resuelve **8)**.

Hoja 5:

1. Explica por qué el $U(t)$ no necesariamente la exponencial de la matriz $-itH/\hbar$ si hay dependencia del tiempo.
2. Enuncia la segunda versión del teorema y pruébala, ejercicio **11)**.
3. Escribe algo para introducir el Hamiltoniano (4) de la resonancia magnética nuclear.
4. Completa el punto anterior con las soluciones de **12)**, **13)** y **14)**.

Ahora que me lo he mirado con más cuidado para elaborar esta hoja, el tema de la resonancia magnética nuclear y su aplicación médica me ha gustado mucho. Quizá incluso escriba algún articulito sobre ello para ponerlo en mi web. Si a ti te también te ha gustado, a lo mejor quieres hablar más en tu trabajo sobre ello (incluso se podría orientar en esa dirección). En ese caso quitaríamos alguna de las otras secciones. Lo más obvio sería reducir al mínimo lo de la ecuación de Dirac. Por favor, elige la opción que prefieras sin dejarte condicionar por mis gustos. Simplemente, házmelo saber cuando tomes la decisión.

Referencias

[dG75] M. de Guzmán. *Ecuaciones diferenciales ordinarias*. Alhambra, Madrid, 1975. Teoría de estabilidad y control.

[Dor04] K. Dorai. Magnetic Resonance Imaging: Window to a Water World. *Resonance*, 9(5):203–216, 2004.

[Hor14] J.P. Hornak. The basics of NMR. `http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/`, 2014.

[Wik16] Wikipedia. Relaxation (nmr) — wikipedia, the free encyclopedia, 2016. [Online; accessed 12-October-2016].