

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI
BOLOGNA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Augusto Righi”
Corso di Laurea in Fisica

Teoria di Floquet e sue applicazioni in meccanica quantistica

Relatore:
Prof. Pierbiagio Pieri

Presentata da:
Leonardo Spanu

Anno Accademico 2025/2026

*A mia nonna Mercedes,
il cui amore, coltivato in vita,
continua ancora oggi a dare i suoi frutti.*

Abstract

La soluzione generale dell'equazione di Schrödinger, quando l'hamiltoniana dipende esplicitamente dal tempo, è espressa tramite l'operatore di evoluzione temporale $U(t, t_0)$ nella forma di un esponenziale *time-ordered*. Tali soluzioni risultano analiticamente difficili da calcolare; tuttavia, si semplificano notevolmente quando l'hamiltoniana è periodica, $\hat{H}(t + T) = \hat{H}(t)$. In particolare, il teorema di Floquet stabilisce che le soluzioni del problema di Schrödinger possono essere scritte come prodotto di una componente periodica, avente lo stesso periodo dell'hamiltoniana, e una fase dipendente linearmente dal tempo.

In questo elaborato viene presentata la teoria di Floquet e il relativo formalismo nella meccanica quantistica, con le definizioni degli stati di Floquet e delle quasienergie del sistema. Viene inoltre discusso l'approccio di Shirley-Floquet, che riduce il problema di Schrödinger dipendente dal tempo a un problema agli autovalori indipendente dal tempo nello spazio di Hilbert esteso $\mathcal{H}_{ext} = \mathcal{L}_2[0, T] \otimes \mathcal{H}$.

Infine, la teoria viene applicata allo studio di un sistema a due livelli in campi oscillanti, modello che matematicamente descrive uno spin-1/2 in un esperimento NMR oppure una transizione ottica di un atomo interagente con una radiazione classica. Nel caso di polarizzazione circolare del campo, il problema ammette una soluzione analitica esatta. Per il caso della polarizzazione lineare, invece, vengono implementati tre metodi di approssimazione per le soluzioni: l'approssimazione di onda rotante (RWA), l'integrazione numerica dell'equazione di Schrödinger tramite il metodo di Runge-Kutta, per ottenere l'operatore di evoluzione temporale $U(t, t_0)$, e il metodo di Shirley-Floquet con il troncamento dello spazio di Hilbert esteso a un numero finito di modi di Fourier. Si discutono infine i risultati ottenuti e i loro limiti di validità.

Indice

Introduzione	ii
1 Fondamenti della teoria di Floquet in meccanica quantistica	1
1.1 Operatore di evoluzione temporale	1
1.2 Teorema di Floquet	3
1.3 Sistemi quantistici periodici	6
1.4 Struttura delle soluzioni e quasienergie	8
1.5 Approccio di Shirley-Floquet e spazio di Hilbert esteso	10
2 Applicazioni a sistemi a due livelli in campi oscillanti	13
2.1 Soluzione esatta per la polarizzazione circolare	14
2.2 Il caso della polarizzazione lineare	17
Conclusioni	28
Bibliografia	29
Appendici	30
A Hamiltoniane di interazione atomo-radiazione	31
A.1 Elettrodinamica classica nel formalismo lagrangiano . .	31
A.2 Formalismo quantistico	34
B Integrazione numerica di Runge-Kutta	37
C Codice di implementazione in C++	39

Introduzione

Gaston Floquet (1847-1920) fu un matematico francese che dedicò gran parte dei suoi studi alla teoria delle equazioni differenziali. Tra gli anni 1881 e 1883 pubblicò tre articoli dal titolo *Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques* (Ref. [2]), nei quali trattò lo studio e le soluzioni dei sistemi di equazioni differenziali a coefficienti periodici, teoria matematica che oggi porta il suo nome.

Nella fisica classica, la teoria di Floquet è lo strumento principale per verificare la stabilità o l'instabilità di sistemi perturbati periodicamente, descrivibili mediante un insieme di equazioni differenziali lineari. Attraverso l'analisi delle soluzioni di tali sistemi è possibile, ad esempio, rendere stabile un pendolo invertito facendo oscillare verticalmente il suo punto di sospensione. Inoltre, la teoria viene impiegata per determinare la frequenza di rotazione dei potenziali a sella che consente di confinare stabilmente particelle cariche nelle trappole ioniche di Paul. Nella meccanica quantistica, la linearità è garantita dall'equazione di Schrödinger e la teoria di Floquet trova applicazione ogni volta che l'hamiltoniana del sistema è periodica nel tempo:

$$\hat{H}(t + T) = \hat{H}(t), \quad (1)$$

dove T indica il periodo fondamentale. Tra le applicazioni di maggiore interesse nell'attuale ricerca figura il Floquet engineering, che consiste nell'ingegnerizzare hamiltoniane periodiche nel tempo in grado di conferire al sistema proprietà desiderate. Un primo esempio di questo è la localizzazione dinamica di un atomo neutro in un reticolo ottico guidato periodicamente.

L'obiettivo del presente elaborato è quello di introdurre la teoria di Floquet e il suo formalismo in meccanica quantistica, e successivamente mostrarne una semplice applicazione. In particolare, si analizzerà il problema di un sistema a due livelli guidato periodicamente; questo può essere uno spin-1/2 in un esperimento NMR o una transizione ottica di un atomo interagente con una radiazione classica quasi-risonante.

Capitolo 1

Fondamenti della teoria di Floquet in meccanica quantistica

Questo capitolo introduce i fondamenti della teoria di Floquet e la sua rilevanza in meccanica quantistica. Nella prima sezione si definisce l'operatore di evoluzione temporale di un sistema quantistico, evidenziando la struttura non banale delle soluzioni quando l'hamiltoniana dipende esplicitamente dal tempo. La trattazione adotta il formalismo bra-ket di Dirac, seguendo l'impostazione formale e le definizioni del testo *Modern Quantum Mechanics* (Ref. [7]). Successivamente, si espongono i principali risultati della teoria di Floquet per sistemi di equazioni differenziali lineari a coefficienti periodici, tratti con le relative dimostrazioni dal libro *Ordinary Differential Equations and Dynamical Systems* (Ref. [12]). Infine, seguendo l'approccio di M. Holthaus (Ref. [4]), tali risultati vengono applicati al caso quantistico di interesse e si definiscono gli stati di Floquet e le quasienergie del sistema.

1.1 Operatore di evoluzione temporale

Si consideri un sistema quantistico i cui stati corrispondono a raggi¹ in uno spazio di Hilbert complesso $\mathcal{H}$. Si assume che lo stato $|\psi(t)\rangle$ sia una funzione continua del tempo, ossia che per qualsiasi istante t_0

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\psi(t)\rangle = |\psi(t_0)\rangle. \quad (1.1)$$

¹Per definizione, un raggio in uno spazio di Hilbert è una classe di vettori dello spazio che differiscono per una costante moltiplicativa $\alpha \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$.

L'evoluzione temporale di $|\psi(t)\rangle$ è governata dall'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle, \quad (1.2)$$

dove $\hat{H}(t)$ è l'hamiltoniana del sistema, in generale anch'essa funzione del tempo.

È possibile definire una mappa lineare che trasforma uno stato iniziale $|\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle$ in uno stato a un istante successivo t :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_0\rangle, \quad (1.3)$$

dove $\hat{U}(t, t_0)$ è l'*operatore di evoluzione temporale*. La linearità della mappa discende direttamente dalla linearità dell'equazione di Schrödinger e garantisce che una combinazione lineare di soluzioni dell'Eq. (1.2) sia ancora una soluzione (proprietà nota come *principio di sovrapposizione*). La definizione (1.3) impone inoltre la condizione iniziale

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}. \quad (1.4)$$

Affinché la norma degli stati si conservi, l'operatore deve essere unitario:

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1}. \quad (\text{Proprietà 1})$$

Si richiede inoltre che soddisfi la seguente proprietà di composizione

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_1) \hat{U}(t_1, t_0), \quad (\text{Proprietà 2})$$

con $t_0 \leq t_1 \leq t$.

La condizione di continuità (1.1) implica che anche $\hat{U}(t, t_0)$ sia continuo nel tempo. Tutte queste proprietà sono soddisfatte dall'espansione infinitesima per $dt \rightarrow 0$

$$\hat{U}(t + dt, t) = \mathbb{1} - i\hat{\Omega} dt + o(dt) \quad \text{con } \hat{\Omega}^\dagger = \hat{\Omega}$$

ossia $\hat{\Omega}$ è un operatore autoaggiunto e le sue dimensioni sono l'inverso di un tempo. Identificando $\hat{\Omega} = \hat{H}/\hbar$, si ottiene l'equazione

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0), \quad (1.5)$$

che, assieme alla condizione iniziale (1.4), determina univocamente l'operatore di evoluzione temporale.

Integrando l'equazione di Schrödinger per $\hat{U}$ e utilizzando la condizione iniziale si ha

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \hat{U}(t_1, t_0).$$

Sostituendo l'espressione analoga per $\hat{U}(t_1, t_0)$ che compare nel membro destro e iterando tale procedimento, si ricava la serie di Dyson:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \cdots \hat{H}(t_n). \quad (1.6)$$

Poiché in generale gli operatori hamiltoniani valutati a tempi diversi non commutano, $[\hat{H}(t'), \hat{H}(t'')] \neq 0$, occorre garantire l'ordinamento degli operatori nella serie $\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \cdots \hat{H}(t_n)$ con $t \geq t_1 \geq t_2 \geq \cdots \geq t_n \geq t_0$.

La soluzione formale (1.6) può essere riscritta introducendo l'operatore $\mathcal{T}$ detto *time-ordering operator* (Ref. [5]). Esso riordina gli operatori che ha come argomento in modo da porre a sinistra quelli valutati a tempi maggiori. Ciò consente di esprimere la soluzione nella forma di esponenziale *time-ordered*²:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathcal{T} \left[\exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right) \right]. \quad (1.7)$$

1.2 Teorema di Floquet

Si consideri un sistema di equazioni differenziali lineari ordinarie e omogenee

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \sum_{j=1}^n a_{ij}(t) x_j(t), \quad i = 1, \dots, n, \quad (1.8)$$

con $a_{ij}(t)$ funzioni complesse di una variabile reale t e continue. Ponendo $\mathbf{x}(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))^T$ e definendo la matrice quadrata $A(t) = (a_{ij}(t))_{i,j=1,\dots,n}$, il sistema è riscrivibile nella forma

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) = A(t) \mathbf{x}(t). \quad (1.9)$$

²L'operatore esponenziale di un operatore $\hat{A}$ è definito dalla sua espansione di Taylor

$$e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!};$$

$\hat{A}^n$ è definito come l'applicazione in sequenza dell'operatore ripetuto n volte se $n > 0$ e corrisponde all'identità se $n = 0$.

La sua soluzione esiste ed è unica quando è data una condizione iniziale³. Per la linearità dell'Eq. (1.9), l'insieme delle sue soluzioni forma uno spazio vettoriale sul campo dei numeri complessi $\mathbb{C}$. Esiste pertanto una mappa lineare che evolve uno stato iniziale $\mathbf{x}_0$ dal tempo t_0 al tempo t :

$$\mathbf{x}(t) = \Pi(t, t_0)\mathbf{x}_0, \quad (1.10)$$

dove $\Pi(t, t_0)$ è detta *matrice fondamentale principale*.

Tale matrice è univocamente determinata dal problema ai valori iniziali

$$\frac{d}{dt}\Pi(t, t_0) = A(t)\Pi(t, t_0), \quad \Pi(t_0, t_0) = \mathbb{1}. \quad (1.11)$$

Inoltre, essa soddisfa la proprietà di composizione

$$\Pi(t, t_0) = \Pi(t, t_1)\Pi(t_1, t_0), \quad (1.12)$$

che discende dal fatto che entrambi i membri soddisfano lo stesso problema ai valori iniziali (1.11) e, per l'unicità della soluzione, essi devono coincidere. Si dimostra il seguente

Lemma. *Sia $\Pi(t, t_0)$ la matrice fondamentale soluzione di (1.11) e sia $A(t)$ periodica di periodo T , ovvero $A(t + T) = A(t)$. Allora,*

$$\Pi(t + T, t_0) = \Pi(t, t_0)M(t_0). \quad (1.13)$$

dove $M(t_0)$ è una matrice indipendente dal tempo t detta *matrice di monodromia*.

Dimostrazione. In virtù della proprietà di composizione (1.12) si può scrivere

$$\Pi(t + T, t_0) = \Pi(t + T, t_0 + T)\Pi(t_0 + T, t_0).$$

Per la periodicità di $A(t)$ si ha

$$\frac{d}{dt}\Pi(t + T, t_0 + T) = A(t + T)\Pi(t + T, t_0 + T) = A(t)\Pi(t + T, t_0 + T).$$

Inoltre $\Pi(t + T, t_0 + T)$ soddisfa la medesima condizione iniziale del problema (1.11) quando $t = t_0$, per cui, per unicità della soluzione,

$$\Pi(t, t_0) \equiv \Pi(t + T, t_0 + T). \quad (1.14)$$

³Questo è garantito dal teorema di Picard–Lindelöf per problemi ai valori iniziali. Una dimostrazione è fornita in Ref. [12].

Sostituendo nell'equazione di composizione si ottiene

$$\Pi(t + T, t_0) = \Pi(t, t_0)\Pi(t_0 + T, t_0).$$

La dimostrazione si conclude definendo la matrice di monodromia come

$$M(t_0) := \Pi(t_0 + T, t_0). \quad (1.15)$$

□

Si pone ora il problema di scrivere la matrice di monodromia in forma esponenziale. L'esistenza di una matrice $Q(t_0)$ tale che

$$M(t_0) = e^{Q(t_0)T} \quad (1.16)$$

è garantita se e solo se il determinante di $M(t_0)$ è diverso da zero⁴. Il determinante di una matrice di monodromia (e più in generale di una matrice fondamentale principale $\Pi(t, t_0)$), si ricava dalle sue proprietà. Per $\varepsilon \rightarrow 0$ si scrive

$$\Pi(t + \varepsilon, t_0) = \Pi(t + \varepsilon, t)\Pi(t, t_0) = (\mathbb{1} + A(t)\varepsilon + o(\varepsilon))\Pi(t, t_0).$$

Calcolandone il determinante si ottiene

$$\begin{aligned} \det \Pi(t + \varepsilon, t_0) &= \det (\mathbb{1} + A(t)\varepsilon + o(\varepsilon)) \det \Pi(t, t_0) = \\ &= (1 + \text{Tr}(A(t))\varepsilon + o(\varepsilon)) \det \Pi(t, t_0), \end{aligned}$$

che implica

$$\frac{d}{dt} \det \Pi(t, t_0) = \text{Tr}[A(t)] \det \Pi(t, t_0).$$

Si perviene così alla formula di Liouville

$$\det \Pi(t, t_0) = c \exp \left\{ \int_{t_0}^t dt' \text{Tr}[A(t')] \right\}. \quad (1.17)$$

⁴Dalla forma esponenziale risulta $\det M(t_0) = \exp\{\text{Tr}[Q(t_0)]T\}$; pertanto tale rappresentazione non può esistere se $\det M(t_0) = 0$. Se il determinante non è nullo, la matrice logaritmo di $M(t_0)$ è definita partendo dalla matrice nella forma di Jordan. Detto $A = \alpha \mathbb{1}_m + N$ un blocco di Jordan di dimensione m , si definisce

$$B = \ln(\alpha) \mathbb{1}_m + \sum_{k=1}^{m-1} \frac{(-1)^{k-1}}{k} \left(\frac{N}{\alpha} \right)^k,$$

e per costruzione $A = \exp(B)$ (una dimostrazione dettagliata è fornita in Ref. [12] cap. 3 sez. 3.8). Si nota che tale matrice non è unica poiché α è in generale complesso e il suo logaritmo non è univoco.

La condizione iniziale $\det \Pi(t_0, t_0) = \det \mathbb{1} = 1$ implica $c = 1$. Quindi

$$\det M(t_0) = \exp \left\{ \int_{t_0}^{t_0+T} dt \operatorname{Tr}[A(t)] \right\} = \exp \left\{ \int_0^T dt \operatorname{Tr}[A(t)] \right\} \neq 0 \quad (1.18)$$

risulta essere non nullo e indipendente da t_0 . Esiste dunque una matrice $Q(t_0)$ che consente di esprimere la matrice di monodromia nella forma esponenziale (1.16).

Per concludere, si può dimostrare il seguente

Teorema (Floquet). *Sia $A(t)$ periodica di periodo T . Allora la matrice fondamentale principale del sistema corrispondente ha la forma*

$$\Pi(t, t_0) = P(t, t_0) e^{Q(t_0)(t-t_0)}, \quad (1.19)$$

con $P(t, t_0)$ una matrice periodica avente lo stesso periodo di $A(t)$.

Dimostrazione. Sia $Q(t_0)$ una matrice tale che $M(t_0) = e^{Q(t_0)T}$. Allora, si definisce la matrice

$$P(t, t_0) := \Pi(t, t_0) e^{-Q(t_0)(t-t_0)}. \quad (1.20)$$

Essa è periodica di periodo T , come si verifica utilizzando l'Eq. (1.13) e la forma esponenziale di $M(t_0)$:

$$\begin{aligned} P(t+T, t_0) &= \Pi(t+T, t_0) e^{-Q(t_0)(t+T-t_0)} = \\ &= \Pi(t, t_0) M(t_0) e^{-Q(t_0)T} e^{-Q(t_0)(t-t_0)} = \\ &= \Pi(t, t_0) e^{-Q(t_0)(t-t_0)} = \\ &= P(t, t_0). \end{aligned} \quad (1.21)$$

□

1.3 Sistemi quantistici periodici

Nel contesto della meccanica quantistica si impiegano in generale operatori agenti su spazi di Hilbert di dimensione finita o infinita. Nel seguito si restringe la trattazione a spazi di Hilbert finito-dimensionali in modo che la teoria di Floquet discussa in precedenza sia direttamente applicabile alle rappresentazioni lineari dell'operatore di evoluzione temporale, evitando particolarità tecniche discusse in seguito.

Si consideri l'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad \text{con} \quad \hat{H}(t+T) = \hat{H}(t). \quad (1.22)$$

Grazie alla periodicit  dell'hamiltoniana, si pu  procedere in maniera del tutto analoga a quanto mostrato per l'Eq. (1.14) e dimostrare che

$$\widehat{U}(t, t_0) \equiv \widehat{U}(t + nT, t_0 + nT), \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (1.23)$$

L'equazione (1.13) pu  essere scritta per $\widehat{U}(t, t_0)$:

$$\widehat{U}(t + T, t_0) = \widehat{U}(t, t_0) \widehat{F}_0, \quad (1.24)$$

dove l'operatore

$$\widehat{F}_0 := \widehat{U}(t_0 + T, t_0) \quad (1.25)$$

  chiamato *operatore di Floquet* e corrispondente alla matrice di monodromia. Il pedice ricorda la dipendenza dall'istante iniziale scelto, t_0 . Come qualsiasi operatore di evoluzione temporale, $\widehat{F}_0$   unitario (Propriet  1). Ci  consente di scriverlo nella forma esponenziale

$$\widehat{F}_0 = e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_{F_0} T} \quad \text{con} \quad \widehat{H}_{F_0}^\dagger = \widehat{H}_{F_0}, \quad (1.26)$$

ossia $\widehat{H}_{F_0}$   un operatore autoaggiunto.

Si introduce ora l'operatore

$$\widehat{P}_0(t) := \widehat{U}(t, t_0) e^{+\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_{F_0} (t - t_0)}. \quad (1.27)$$

Esso   unitario (poich  prodotto di due operatori unitari) e periodico di periodo T :

$$\widehat{P}_0(t + T) = \widehat{P}_0(t), \quad (1.28)$$

come si verifica ripetendo la dimostrazione di periodicit  data in (1.21).

Si ottiene cos  la versione quantistica del teorema di Floquet:

$$\widehat{U}(t, t_0) = \widehat{P}_0(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_{F_0} (t - t_0)}. \quad (1.29)$$

Si osserva tuttavia che tale teorema non fornisce un metodo esplicito per calcolare $\widehat{P}_0(t)$, ma ne garantisce l'esistenza. Quando $\widehat{P}_0(t)$   noto, esso pu  essere interpretato come una trasformazione unitaria

$$|\psi(t)\rangle = \widehat{P}_0(t) |\psi'(t)\rangle \quad (1.30)$$

che rende il problema stazionario. Infatti, l'hamiltoniana per lo stato $|\psi'(t)\rangle$ risulta

$$\widehat{H}'(t) = \widehat{P}^{-1} \widehat{H} \widehat{P} - i\hbar \widehat{P}^{-1} \frac{d\widehat{P}}{dt}. \quad (1.31)$$

Sostituendo esplicitamente la definizione (1.27) di $\hat{P}_0(t)$ per calcolare il secondo termine, si ottiene

$$\begin{aligned} i\hbar\hat{P}^{-1}\frac{d\hat{P}}{dt} &= \hat{P}^{-1} \left[\left(i\hbar\frac{d\hat{U}}{dt} \right) e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{F_0}(t-t_0)} + i\hbar\hat{U}\frac{d}{dt} \left(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{F_0}(t-t_0)} \right) \right] = \\ &= \hat{P}^{-1} \left[\left(\hat{H}\hat{U} \right) e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{F_0}(t-t_0)} - \hat{U} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{F_0}(t-t_0)} \hat{H}_{F_0} \right] = \\ &= \hat{P}^{-1} \hat{H} \hat{P} - \hat{H}_{F_0}. \end{aligned}$$

Inserendo questo risultato nell'equazione (1.31) si trova infine

$$\hat{H}'(t) = \hat{H}_{F_0}. \quad (1.32)$$

Per questa ragione $\hat{H}_{F_0}$ è detta *hamiltoniana di Floquet*.

1.4 Struttura delle soluzioni e quasienergie

I risultati precedenti permettono di costruire un insieme completo di soluzioni dell'equazione di Schrödinger periodica (1.22). Dato uno stato iniziale $|\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle$, lo stato del sistema a un generico istante t può essere scritto, sfruttando il teorema di Floquet (1.29), come

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, t_0) |\psi_0\rangle = \\ &= \hat{P}_0(t) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{F_0}(t-t_0)} |\psi_0\rangle. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Si consideri una base completa $\{|\phi_n\rangle\}$ dello spazio di Hilbert costituita da autostati dell'operatore di Floquet $\hat{F}_0$. L'esistenza di tale base è garantita, nel caso di dimensione finita, dal teorema spettrale dell'algebra lineare per ogni operatore normale (i.e. commutante con il suo aggiunto; la proprietà vale quindi per un operatore unitario). Nel caso di dimensione infinita lo spettro potrebbe invece essere continuo. Poiché $\hat{F}_0$ è unitario, i suoi autovallori (detti *moltiplicatori di Floquet*) giacciono sulla circonferenza unitaria del piano complesso. Si indica dunque il suo spettro come

$$\sigma(\hat{F}_0) = \left\{ \mu_n \in \mathbb{C} : \mu_n = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n T} \text{ con } \varepsilon_n \in \mathbb{R} \right\}. \quad (1.34)$$

I valori $\{\varepsilon_n\}$ sono detti *quasienergie* del sistema. Per un autostato di $\hat{F}_0$ si ha

$$\hat{F}_0 |\phi_n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{F_0}T} |\phi_n\rangle = \mu_n |\phi_n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n T} |\phi_n\rangle, \quad (1.35)$$

per cui le quasienergie coincidono con gli autovalori dell'hamiltoniana di Floquet $\hat{H}_{F_0}$. È tuttavia necessario osservare che esse sono definite modulo $\hbar\omega$, dove

$$\omega = \frac{2\pi}{T}. \quad (1.36)$$

Ciò deriva dalla ploidromia del logaritmo naturale di $\mu_n \in \mathbb{C}$: poiché $|\mu| = 1$, si ha

$$\ln(\mu_n) = i(\arg(\mu_n) + 2\pi m), \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (1.37)$$

In altre parole, la sostituzione $\varepsilon_n \longrightarrow \varepsilon_n + m\hbar\omega$ non modifica il moltiplicatore di Floquet corrispondente.

Lo stato iniziale può essere espanso nella base degli autostati di $\hat{F}_0$:

$$|\psi_0\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle, \quad a_n = \langle\phi_n|\psi_0\rangle. \quad (1.38)$$

Sostituendo questa espansione nella soluzione generale (1.33) si ottiene

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_n a_n \hat{P}_0(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{F_0}(t-t_0)} |\phi_n\rangle \\ &= \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_n(t-t_0)} \hat{P}_0(t) |\phi_n\rangle. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Si definiscono i *modi di Floquet*

$$|u_n(t)\rangle := \hat{P}_0(t) |\phi_n\rangle, \quad (1.40)$$

e gli *stati di Floquet*

$$|\psi_n(t)\rangle := e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_n(t-t_0)} |u_n(t)\rangle. \quad (1.41)$$

Poiché gli autostati $\{|\phi_n\rangle\}$ sono indipendenti dal tempo, i modi di Floquet sono periodici:

$$|u_n(t+T)\rangle = |u_n(t)\rangle. \quad (1.42)$$

Per costruzione,

$$|\psi_n(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\phi_n\rangle, \quad (1.43)$$

ossia gli stati di Floquet sono soluzioni dell'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo che soddisfano la condizione iniziale $|\psi_n(t_0)\rangle = |\phi_n\rangle$. Essi costituiscono quindi una base completa dello spazio di Hilbert nella quale l'evoluzione temporale è completamente incapsulata. Di conseguenza, lo stato generico al tempo t si scrive

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n |\psi_n(t)\rangle. \quad (1.44)$$

In ultima analisi, è possibile separare l'avanzamento a tempi stroboscopici $t_n = t_0 + nT$, dall'evoluzione all'interno di un singolo periodo $t' \in [t_0, t_0 + T]$. Risulta infatti

$$\begin{aligned}\widehat{U}(t' + nT, t_0) &= \widehat{U}(t' + nT, t_0 + nT) \widehat{U}(t_0 + nT, t_0) = \\ &= \widehat{U}(t', t_0) \widehat{U}(t_0 + nT, t_0) = \\ &= \widehat{U}(t', t_0) \widehat{F}_0^n,\end{aligned}\tag{1.45}$$

dove nell'ultimo passaggio si è applicata n volte la relazione (1.24) e si è usata la condizione iniziale $\widehat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$. Dunque, la conoscenza dell'operatore di evoluzione temporale in un periodo è sufficiente a determinare l'evoluzione del sistema a qualsiasi istante temporale.

1.5 Approccio di Shirley-Floquet e spazio di Hilbert esteso

Nella sezione precedente, le quasienergie $\{\varepsilon_n\}$ sono state definite a partire dai moltiplicatori di Floquet μ_n mediante la relazione $\mu_n = e^{-i\varepsilon_n T/\hbar}$. Questa definizione comporta un'indeterminazione delle ε_n , che era stata precedentemente ovviata imponendo arbitrariamente che esse fossero definite modulo $\hbar\omega$. Per eliminare tale arbitrarietà e ottenere una descrizione fisica più sistematica e completa del fenomeno, si ricorre all'approccio trattato per la prima volta da J. H. Shirley nel 1965 (Ref. [10]) e successivamente formalizzato da H. Sambe nel 1973 nello spazio di Hilbert esteso (Ref. [8]).

Inserendo gli stati di Floquet (1.41) nell'equazione di Schrödinger periodica (1.22) si ottiene

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d}{dt} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_n (t-t_0)} |u_n(t)\rangle \right] &= \varepsilon_n e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_n (t-t_0)} |u_n(t)\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_n (t-t_0)} i\hbar \frac{d}{dt} |u_n(t)\rangle \\ &= \widehat{H}(t) \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_n (t-t_0)} |u_n(t)\rangle \right].\end{aligned}\tag{1.46}$$

Semplificando il fattore esponenziale e definendo l'operatore

$$\widehat{K}(t) = \widehat{H}(t) - i\hbar \frac{d}{dt},\tag{1.47}$$

si ricava l'equazione

$$\widehat{K}(t) |u_n(t)\rangle = \varepsilon_n |u_n(t)\rangle.\tag{1.48}$$

Se a questo punto si considera il tempo t non più come la variabile di evoluzione, bensì come una coordinata aggiuntiva del sistema, l'equazione (1.48)

diventa un problema agli autovalori sullo spazio di Hilbert esteso di funzioni periodiche di periodo T :

$$\mathcal{H}_{ext} = \mathcal{L}_2[0, T] \otimes \mathcal{H}. \quad (1.49)$$

Il prodotto scalare in $\mathcal{H}_{ext}$ tra due stati $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ è definito da

$$\langle\langle\psi|\phi\rangle\rangle = \frac{1}{T} \int_0^T dt \langle\psi(t)|\phi(t)\rangle. \quad (1.50)$$

Lo spazio delle funzioni quadrato sommabili $\mathcal{L}_2[0, T]$ ha una base naturale data dalle funzioni di Fourier:

$$\varphi_m(t) = e^{im\omega t}, \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (1.51)$$

Si può riscrivere lo stato di Floquet nella forma

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_n + m\hbar\omega)(t-t_0)} \left[e^{im\omega(t-t_0)} |u_n(t)\rangle \right]. \quad (1.52)$$

Sostituendo questa espressione nell'equazione di Schrödinger si ottiene

$$\hat{K}(t) \left[e^{im\omega(t-t_0)} |u_n(t)\rangle \right] = (\varepsilon_n + m\hbar\omega) \left[e^{im\omega(t-t_0)} |u_n(t)\rangle \right]. \quad (1.53)$$

Ossia, diverse scelte delle quasienergie $\varepsilon_n + m\hbar\omega$ risultano essere diverse soluzioni del problema agli autovalori (1.48) nello spazio di Hilbert esteso, e ogni scelta è associata al medesimo stato di Floquet.

Per la loro periodicità, i modi di Floquet possono essere sviluppati in serie di Fourier:

$$|u_n(t)\rangle = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-im\omega t} |u_n^{(m)}\rangle, \quad (1.54)$$

dove $|u_n^{(m)}\rangle$ sono i componenti di Fourier del modo $|u_n(t)\rangle$. Analogamente, si espande l'hamiltoniana periodica:

$$\hat{H}(t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \hat{H}^{(k)} e^{-ik\omega t}, \quad (1.55)$$

dove

$$\hat{H}^{(k)} = \frac{1}{T} \int_0^T \hat{H}(t) e^{ik\omega t} dt. \quad (1.56)$$

Si sostituiscono ora tali espansioni nell'equazione agli autovalori (1.48):

$$\sum_{k,m} \hat{H}^{(k)} |u_n^{(m)}\rangle e^{-i(k+m)\omega t} - \sum_m \hbar m\omega e^{-im\omega t} |u_n^{(m)}\rangle = \varepsilon_n \sum_m e^{-im\omega t} |u_n^{(m)}\rangle. \quad (1.57)$$

Proiettando sulla base di Fourier, si perviene al seguente problema agli autovalori indipendente dal tempo a dimensione infinita:

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} (\hat{H}^{(l-m)} - m\hbar\omega \delta_{lm} \mathbb{1}) |u_n^{(m)}\rangle = \varepsilon_n |u_n^{(l)}\rangle, \quad \forall l \in \mathbb{Z}. \quad (1.58)$$

Questo sistema può essere espresso attraverso una matrice a dimensione infinita. Troncando tale matrice a un numero finito di componenti di Fourier e diagonalizzandola si ottengono un'approssimazione delle quasienergie $\{\varepsilon_n\}$ (gli autovalori) e dei modi di Floquet (gli autovettori).

In sintesi, l'approccio di Shirley-Floquet permette di ricondurre l'evoluzione di un sistema quantistico con hamiltoniana periodica nel tempo a un semplice problema agli autovalori indipendente dal tempo, fornendo anche una definizione univoca delle quasienergie.

Capitolo 2

Applicazioni a sistemi a due livelli in campi oscillanti

La teoria discussa nel capitolo precedente trova applicazione in due semplici modelli quantistici che condividono la stessa forma dell'hamiltoniana, differendo soltanto nel significato fisico dei parametri: uno spin-1/2 immerso in un campo magnetico oscillante e un atomo a due livelli interagente con una radiazione elettromagnetica oscillante¹.

Nel primo caso, lo spin è immerso in un campo magnetico $\mathbf{B}(t)$ costituito da una componente statica intensa B_z e da una componente trasversale oscillante a frequenza ω . Quest'ultima può avere polarizzazione circolare:

$$B_x(t) = B_\perp \cos \omega t \quad B_y(t) = B_\perp \sin \omega t \quad (2.1)$$

oppure lineare:

$$B_x(t) = B_\perp \cos \omega t \quad B_y = 0. \quad (2.2)$$

L'hamiltoniana del sistema assume la forma

$$\hat{H}(t) = \mu_B B_z \hat{\sigma}^z + \mu_B [B_x(t) \hat{\sigma}^x + B_y(t) \hat{\sigma}^y], \quad (2.3)$$

dove $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ è il magnetone di Bohr e $\hat{\sigma}^{x,y,z}$ sono le matrici di Pauli².

Nel secondo caso, un atomo a due livelli è accoppiato a una radiazione elettromagnetica classica oscillante alla frequenza ω , anch'essa con polarizzazione circolare o lineare. Le forme esplicite delle hamiltoniane utilizzate in questo

¹I calcoli e le interpretazioni fisiche presentati in questo capitolo seguono l'esposizione di G.E. Santoro nelle sue lecture notes *Introduction to Floquet* (Ref. [9]).

²

$$\hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

capitolo sono giustificate in Appendice A. L'hamiltoniana della polarizzazione circolare (per l'atomo a due livelli) assume la forma

$$\hat{H}_{CP}(t) = \frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{\sigma}^z + \frac{\hbar\Omega}{2}(\hat{\sigma}^x \cos(\omega t) + \hat{\sigma}^y \sin(\omega t)), \quad (2.4)$$

dove Ω è la frequenza di Rabi. Per la polarizzazione lineare si ha invece

$$\hat{H}_{LP}(t) = \frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{\sigma}^z + \hbar\Omega \hat{\sigma}^x \cos(\omega t). \quad (2.5)$$

Queste espressioni coincidono con l'hamiltoniana dello spin-1/2 una volta poste le corrispondenze $\mu_B B_z \equiv \frac{\hbar\omega_0}{2}$ e $\mu_B B_\perp \equiv \hbar\Omega$ (per la polarizzazione lineare) oppure $\mu_B B_\perp \equiv \frac{\hbar\Omega}{2}$ (per la polarizzazione circolare). In entrambi i casi le hamiltoniane operano nello stesso spazio di Hilbert bidimensionale $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$. Esse sono scritte nella base standard degli autostati di $\hat{\sigma}^z$, che coincidono con gli stati fisici dell'atomo a due livelli in assenza di radiazione: $|es\rangle$ (stato eccitato, energia $+\hbar\omega_0/2$) e $|gs\rangle$ (stato fondamentale, energia $-\hbar\omega_0/2$). Inoltre, le hamiltoniane sono periodiche di periodo $T = 2\pi/\omega$.

2.1 Soluzione esatta per la polarizzazione circolare

Al fine di ricavare l'hamiltoniana di Floquet per il caso della polarizzazione circolare, si applica una trasformazione unitaria e periodica $\hat{P}_0(t)$ che renda il problema stazionario. Si sceglie l'istante iniziale $t_0 = 0$. Per la forma assunta dall'hamiltoniana, è conveniente utilizzare una rotazione attorno all'asse z , la cui rappresentazione in $\mathbb{C}^2$ è

$$\hat{X}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta(t)\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{S}}} = e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}^z}. \quad (2.6)$$

Si osserva tuttavia che $\hat{X}(0) \neq \hat{X}(\frac{2\pi}{\omega})$, ossia non è una trasformazione periodica, come invece richiede la teoria matematica. Per renderla tale, è sufficiente moltiplicare per il fattore $e^{i\frac{\omega t}{2}}$, ottenendo

$$\hat{P}_0(t) = e^{i\frac{\omega t}{2}(\mathbb{1} - \hat{\sigma}^z)}. \quad (2.7)$$

Infatti,

$$\begin{aligned}
\widehat{P}_0(t+T) &= e^{i\frac{\omega(t+T)}{2}(\mathbb{1}-\hat{\sigma}^z)} \\
&= e^{i\frac{\omega}{2}\left(t+\frac{2\pi}{\omega}\right)(\mathbb{1}-\hat{\sigma}^z)} \\
&= e^{i\left(\frac{\omega t}{2}+\pi\right)(\mathbb{1}-\hat{\sigma}^z)} \\
&= e^{i\frac{\omega t}{2}(\mathbb{1}-\hat{\sigma}^z)} \cdot e^{i\pi(\mathbb{1}-\hat{\sigma}^z)} \\
&= \widehat{P}_0(t) \cdot \mathbb{1} \\
&= \widehat{P}_0(t).
\end{aligned} \tag{2.8}$$

L'hamiltoniana trasformata è dunque

$$\widehat{H}'(t) = \widehat{P}^{-1} \widehat{H} \widehat{P} - i\hbar \widehat{P}^{-1} \frac{d\widehat{P}}{dt}. \tag{2.9}$$

Il secondo termine è immediato:

$$-i\hbar \widehat{P}^\dagger \frac{d\widehat{P}}{dt} = \frac{\hbar\omega}{2} (\mathbb{1} - \hat{\sigma}^z). \tag{2.10}$$

Per calcolare il primo termine conviene utilizzare le forme matriciali esplicite. Poiché $\widehat{P}(t)$ è l'esponenziale di una matrice diagonale, è sufficiente esponenziare i suoi elementi diagonali, ottenendo così

$$\widehat{P}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\omega t} \end{pmatrix}, \quad \widehat{P}^{-1}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t} \end{pmatrix}. \tag{2.11}$$

Svolgendo i prodotti tra matrici si ottiene

$$\begin{cases} \widehat{P}^\dagger(t) \hat{\sigma}^x \widehat{P}(t) = \hat{\sigma}^x \cos(\omega t) - \hat{\sigma}^y \sin(\omega t) \\ \widehat{P}^\dagger(t) \hat{\sigma}^y \widehat{P}(t) = \hat{\sigma}^y \cos(\omega t) + \hat{\sigma}^x \sin(\omega t) \\ \widehat{P}^\dagger(t) \hat{\sigma}^z \widehat{P}(t) = \hat{\sigma}^z. \end{cases} \tag{2.12}$$

Dunque, l'hamiltoniana trasformata è

$$\widehat{H}'_{\text{CP}} = \frac{\hbar\omega}{2} \mathbb{1} + \frac{\hbar(\omega_0 - \omega)}{2} \hat{\sigma}^z + \frac{\hbar\Omega}{2} \hat{\sigma}^x \equiv \widehat{H}_{\text{F}_0}. \tag{2.13}$$

Si osserva che è indipendente dal tempo, e perciò corrisponde esattamente all'hamiltoniana di Floquet. Le quasienergie sono i suoi autovalori

$$\varepsilon_{\pm} = \frac{\hbar\omega}{2} \pm \frac{\sqrt{\hbar^2(\omega_0 - \omega)^2 + \hbar^2\Omega^2}}{2} \pmod{\hbar\omega}. \tag{2.14}$$

Introducendo il *detuning* $\Delta := \omega - \omega_0$ e la *frequenza di Rabi generalizzata* $\Omega_e := \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}$, si riscrive

$$\varepsilon_{\pm} = \frac{\hbar}{2} (\omega \pm \Omega_e) \pmod{\hbar\omega}. \quad (2.15)$$

I corrispondenti autostati sono

$$\begin{cases} |\phi_+\rangle = \sqrt{\frac{\Omega_e - \Delta}{2\Omega_e}} |es\rangle + \sqrt{\frac{\Omega_e + \Delta}{2\Omega_e}} |gs\rangle \\ |\phi_-\rangle = \sqrt{\frac{\Omega_e + \Delta}{2\Omega_e}} |es\rangle - \sqrt{\frac{\Omega_e - \Delta}{2\Omega_e}} |gs\rangle. \end{cases} \quad (2.16)$$

Definendo l'angolo θ tramite

$$\tan \theta = -\frac{\Omega}{\Delta}, \quad (2.17)$$

si può scrivere in forma più compatta

$$\begin{cases} |\phi_+\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |es\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |gs\rangle \\ |\phi_-\rangle = \sin \frac{\theta}{2} |es\rangle - \cos \frac{\theta}{2} |gs\rangle. \end{cases} \quad (2.18)$$

Utilizzando le equazioni del capitolo precedente, si ottengono i modi di Floquet (Eq. (1.40)):

$$\begin{cases} |u_+(t)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |es\rangle + e^{i\omega t} \sin \frac{\theta}{2} |gs\rangle \\ |u_-(t)\rangle = \sin \frac{\theta}{2} |es\rangle - e^{i\omega t} \cos \frac{\theta}{2} |gs\rangle, \end{cases} \quad (2.19)$$

e gli stati di Floquet (Eq. (1.41)):

$$\begin{cases} |\psi_+(t)\rangle = e^{-i\frac{(\omega+\Omega_e)t}{2}} \left[\cos \frac{\theta}{2} |es\rangle + e^{i\omega t} \sin \frac{\theta}{2} |gs\rangle \right] \\ |\psi_-(t)\rangle = e^{-i\frac{(\omega-\Omega_e)t}{2}} \left[\sin \frac{\theta}{2} |es\rangle - e^{i\omega t} \cos \frac{\theta}{2} |gs\rangle \right]. \end{cases} \quad (2.20)$$

Supponendo lo stato iniziale $|\psi(0)\rangle = |gs\rangle$, allora

$$\begin{cases} a_+ = \langle \phi_+ | gs \rangle = \sin \frac{\theta}{2} \\ a_- = \langle \phi_- | gs \rangle = -\cos \frac{\theta}{2}. \end{cases} \quad (2.21)$$

Dunque lo stato $|\psi(t)\rangle$ si scrive come

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= a_+ |\psi_+(t)\rangle + a_- |\psi_-(t)\rangle = \\ &= e^{-i\frac{\omega t}{2}} \left(-i \sin \theta \sin \frac{\Omega_e t}{2} \right) |es\rangle + e^{i\frac{\omega t}{2}} \left(\cos \frac{\Omega_e t}{2} + i \cos \theta \sin \frac{\Omega_e t}{2} \right) |gs\rangle. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Infine, la probabilità di transizione dallo stato $|gs\rangle$ allo stato $|es\rangle$ al tempo t è

$$\mathcal{P}_{g \rightarrow e}(t) = |\langle es | \psi(t) \rangle|^2 = \sin^2 \theta \sin^2 \frac{\Omega_e t}{2} = \frac{\Omega^2}{\Omega_e^2} \sin^2 \frac{\Omega_e t}{2}. \quad (2.23)$$

Si osserva che in condizioni di risonanza ($\omega = \omega_0$), la probabilità si riduce a

$$\mathcal{P}_{res}(t) = \sin^2 \frac{\Omega t}{2} \quad (2.24)$$

e oscilla alla frequenza di Rabi Ω , con ampiezza unitaria. In caso contrario, il detuning $\Delta = \omega - \omega_0 \neq 0$ fa sì che la probabilità oscilli alla frequenza generalizzata $\Omega_e > \Omega$ con ampiezza massima $\Omega^2/\Omega_e^2 < 1$.

2.2 Il caso della polarizzazione lineare

La polarizzazione lineare non ammette una soluzione esatta semplice, poiché non è immediato ricavare la trasformazione unitaria e periodica $\hat{P}_0(t)$ in grado di rendere stazionario il problema. Applicando la medesima trasformazione del caso circolare all'hamiltoniana (2.5), con lo stesso istante iniziale $t_0 = 0$, si ottiene

$$\hat{H}'_{LP}(t) = \frac{\hbar\omega}{2} \mathbb{1} + \frac{\hbar(\omega_0 - \omega)}{2} \hat{\sigma}^z + \frac{\hbar\Omega}{2} \hat{\sigma}^x + \frac{\hbar\Omega}{2} (\hat{\sigma}^x \cos(2\omega t) - \hat{\sigma}^y \sin(2\omega t)). \quad (2.25)$$

Per analizzare questo sistema si ricorre a tre approcci differenti, nessuno dei quali lo risolve esattamente, ma i cui risultati possono essere confrontati entro i rispettivi limiti di validità.

Il primo metodo è l'approssimazione di onda rotante (*Rotating Wave Approximation*). Esso consiste nel trascurare i termini che oscillano a frequenza 2ω ; in questo modo l'hamiltoniana trasformata coincide con quella di Floquet (2.13) del caso circolare e i risultati sono equivalenti.

Il secondo metodo consiste nel calcolo numerico dell'operatore di Floquet. A tal fine si integra numericamente l'equazione di Schrödinger per l'hamiltoniana non trasformata (2.5), che in forma matriciale si scrive

$$\begin{pmatrix} \dot{\psi}_1(t) \\ \dot{\psi}_2(t) \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} \frac{\omega_0}{2} & \Omega \cos \omega t \\ \Omega \cos \omega t & -\frac{\omega_0}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

dove $\psi_1(t) = \langle es|\psi(t)\rangle$ e $\psi_2(t) = \langle gs|\psi(t)\rangle$ sono le componenti dello stato $|\psi(t)\rangle$ nella base standard $\{|es\rangle, |gs\rangle\}$.

Integrando separatamente l'equazione a partire dagli stati iniziali della base standard $|es\rangle$ e $|gs\rangle$, è possibile ricavare l'operatore di evoluzione temporale $\hat{U}(t, 0)$ per qualunque istante. In particolare, valutandolo al tempo $t = T$ si ottiene direttamente l'operatore di Floquet $\hat{F}_0$. Grazie al risultato (1.45), è sufficiente calcolare l'operatore di evoluzione su un singolo periodo per determinare lo stato del sistema a tempi arbitrari.

L'integrazione numerica è stata effettuata con il metodo di Runge-Kutta di quarto ordine, descritto nell'Appendice B. Il codice C++ di implementazione è riportato nell'Appendice C.

L'operatore $\hat{F}_0$ così ottenuto viene diagonalizzato numericamente per ricavarne gli autovalori (moltiplicatori di Floquet) $\mu_{\pm}$. Le quasienergie sono quindi estratte attraverso la relazione

$$\varepsilon_{\pm} = -\frac{\hbar}{T} \arg(\mu_{\pm}) \pmod{\hbar\omega}. \quad (2.27)$$

I risultati numerici sono confrontati con quelli ottenuti nell'approssimazione di onda rotante (RWA) — nella quale le quasienergie sono calcolate mediante la relazione (2.15) — e vengono riportati nella Tabella 2.1 per quattro regimi rappresentativi.

Tabella 2.1: Confronto delle quasienergie $\varepsilon_{\pm}$ tra l'approssimazione RWA e l'integrazione numerica RK4 per quattro regimi rappresentativi. I calcoli sono stati eseguiti con le frequenze in unità di ω_0 e le energie in unità di $\hbar\omega_0$. Le quantità $|\Delta\varepsilon_{\pm}|$ indicano le differenze in valore assoluto $|\varepsilon_{\pm}^{\text{num}} - \varepsilon_{\pm}^{\text{RWA}}|$, approssimate a una cifra significativa (il valore è identico per ε_+ ed ε_- entro l'approssimazione).

Regime	Δ	Ω	$\varepsilon_+^{\text{RWA}}$	$\varepsilon_+^{\text{num}}$	$\varepsilon_-^{\text{RWA}}$	$\varepsilon_-^{\text{num}}$	$ \Delta\varepsilon_{\pm} $
1	0.00	0.02	0.5100000	0.5099999	0.4900000	0.4900001	1×10^{-7}
2	0.50	0.01	1.0000490	1.0000400	0.4999500	0.4999600	1×10^{-5}
3	0.30	0.40	0.9000000	0.8887797	0.4000000	0.4112203	1×10^{-2}
4	0.00	1.00	1.0000000	0.9804750	0.0000000	0.0195250	2×10^{-2}

Le quasienergie risultano particolarmente utili per descrivere l'evoluzione stroboscopica del sistema. Denotati con $|\phi_{\pm}\rangle$ gli autostati di $\hat{F}_0$, lo stato del sistema a tempi stroboscopici, partendo da uno stato iniziale $|\psi(0)\rangle$, risulta infatti

$$|\psi(nT)\rangle = a_+ e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_+ nT} |\phi_+\rangle + a_- e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_- nT} |\phi_-\rangle, \quad a_{\pm} = \langle\phi_{\pm}|\psi(0)\rangle. \quad (2.28)$$

Si osserva che l'approssimazione di onda rotante (RWA) fornisce risultati in migliore accordo con il calcolo numerico quando si è in risonanza ($\Delta = 0$) e la frequenza di Rabi Ω è piccola rispetto alla frequenza del campo ω , ovvero quando si è nel regime di campo elettromagnetico debole e ad alta frequenza. La probabilità di transizione dallo stato fondamentale $|gs\rangle$ allo stato eccitato $|es\rangle$ al tempo t è quindi calcolabile semplicemente dall'elemento di matrice dell'operatore di evoluzione temporale:

$$\mathcal{P}_{g \rightarrow e}(t) = \left| \langle es | \hat{U}(t, 0) | gs \rangle \right|^2 = |U_{eg}(t)|^2. \quad (2.29)$$

Il terzo metodo per analizzare il caso di polarizzazione lineare è l'approccio di Shirley-Floquet, trattato nell'ultima sezione del capitolo precedente. Si consideri l'hamiltoniana del problema non trasformata (2.5). La sua espansione di Fourier si ottiene in modo diretto:

$$\hat{H}_{LP}(t) = \frac{\hbar\omega_0}{2} \hat{\sigma}^z + \hbar\Omega \hat{\sigma}^x \cos(\omega t) = \frac{\hbar\omega_0}{2} \hat{\sigma}^z + \frac{\hbar\Omega}{2} \hat{\sigma}^x e^{i\omega t} + \frac{\hbar\Omega}{2} \hat{\sigma}^x e^{-i\omega t}. \quad (2.30)$$

Le uniche componenti di Fourier diverse da zero sono quindi

$$\hat{H}_{LP}^{(0)} = \frac{\hbar\omega_0}{2} \hat{\sigma}^z, \quad \hat{H}_{LP}^{(1)} = \hat{H}_{LP}^{(-1)} = \frac{\hbar\Omega}{2} \hat{\sigma}^x, \quad (2.31)$$

mentre $\hat{H}_{LP}^{(k)} = 0$ per $|k| > 1$.

Il problema agli autovalori di dimensione infinita dell'Eq. (1.58) può essere ricondotto a un problema matriciale facilmente risolubile troncando a un numero finito di componenti di Fourier. Si considerano tutti gli indici m compresi tra $-M$ e M (e analogamente per l). Nel caso $M = 1$ si ottiene la matrice a blocchi autoaggiunta

$$\begin{pmatrix} \hat{H}^{(0)} + \hbar\omega \mathbb{1} & \hat{H}^{(-1)} & 0 \\ \hat{H}^{(1)} & \hat{H}^{(0)} & \hat{H}^{(-1)} \\ 0 & \hat{H}^{(1)} & \hat{H}^{(0)} - \hbar\omega \mathbb{1} \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

La sua diagonalizzazione fornisce 6 autovettori, che costituiscono una base ortonormale di $\mathcal{H}_{ext}$ troncato (rispetto al prodotto scalare (1.50)). Le loro componenti sulla base di Fourier (1.51) sono i coefficienti di Fourier $|u_n^{(m)}\rangle \in \mathcal{H}$. I modi di Floquet approssimati si ricostruiscono quindi come

$$|u_n(t)\rangle \approx \sum_{m=-1}^1 e^{-im\omega t} |u_n^{(m)}\rangle, \quad (2.33)$$

che, per ogni t fissato, sono elementi di $\mathcal{H}$. Si può quindi ricavare una soluzione approssimata dell'equazione di Schrödinger per lo stato del sistema al tempo t e con stato iniziale $|gs\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle \approx \sum_{n=1}^6 a_n e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} |u_n(t)\rangle, \quad \text{con} \quad a_n = \langle u_n^{(0)} | gs \rangle. \quad (2.34)$$

La probabilità che il sistema si trovi allo stato eccitato al tempo t è calcolata attraverso la relazione

$$\mathcal{P}_{g \rightarrow e}(t) = \left| \sum_{n=1}^6 a_n e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} \langle es | u_n(t) \rangle \right|^2 \quad (2.35)$$

I risultati dei tre metodi sono stati confrontati graficamente per i quattro regimi della Tabella 2.1, calcolando le probabilità di transizione $\mathcal{P}_{g \rightarrow e}(t)$ attraverso il codice riportato nell'Appendice C. Tali confronti sono illustrati nelle Figure 2.1–2.7. Ogni figura si compone di due pannelli: quello superiore mostra l'andamento di $\mathcal{P}_{g \rightarrow e}(t)$ ottenuto con i tre metodi, mentre quello inferiore evidenzia la differenza $|\mathcal{P}_{\text{Shirley-Floquet}} - \mathcal{P}_{\text{RK4}}|$. Le probabilità sono state calcolate su un intervallo temporale pari a un periodo delle oscillazioni di Rabi, fino al tempo $t = 2\pi/\Omega_e$. Dai grafici emerge come l'approssimazione di onda rotante trascuri le oscillazioni a frequenza 2ω (nel regime 1, tali oscillazioni veloci sono evidenti in un intervallo di integrazione minore, pari a $t = 2\pi/\omega$, riportato in Fig. 2.2). Nei regimi 1 e 2, il metodo di Shirley-Floquet e l'integrazione numerica RK4 forniscono risultati in forte accordo, con differenze massime dell'ordine di 10^{-4} e 10^{-8} , rispettivamente. Al contrario, nei regimi 3 e 4, caratterizzati da una frequenza di Rabi Ω più elevata, si nota una differenza sostanziale tra i due approcci. Per questi ultimi regimi si è quindi esteso il calcolo di Shirley-Floquet includendo i termini fino a $|m| = 3$ nella ricostruzione dei modi di Floquet; i relativi grafici sono presentati nelle Figure 2.5 e 2.7. L'accordo con l'integrazione numerica migliora sensibilmente: la differenza si riduce da valori massimi dell'ordine di 10^{-1} a 10^{-4} nel regime 3 e da 10^{-1} a 10^{-2} nel regime 4.

Nel grafico in Fig. 2.6 sono state tagliate probabilità superiori all'unità, risultanti con il metodo di Shirley-Floquet, in quanto fisicamente prive di significato. Tali risultati derivano dal troncamento dello spazio esteso a un numero eccessivamente ridotto di modi di Fourier. Infatti, i modi di Floquet ottenuti dalla diagonalizzazione della matrice di Shirley (2.32) formano un insieme ortonormale solamente nello spazio esteso:

$$\langle\langle u_i | u_j \rangle\rangle = \sum_{l=-1}^1 \sum_{m=-1}^1 \delta_{lm} \langle u_i^{(l)} | u_j^{(m)} \rangle = \sum_{m=-1}^1 \langle u_i^{(m)} | u_j^{(m)} \rangle = \delta_{ij}, \quad (2.36)$$

per cui risulta la condizione per i coefficienti dell'espansione (2.34)

$$\sum_n |a_n|^2 = 1. \quad (2.37)$$

La norma dello stato $|\psi(t)\rangle$ nello spazio di Hilbert $\mathcal{H}$, invece, è data da

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \sum_i \sum_j a_i^* a_j e^{i(\varepsilon_i - \varepsilon_j)t/\hbar} \sum_l \sum_m e^{i(l-m)\omega t} \langle u_i^{(l)} | u_j^{(m)} \rangle. \quad (2.38)$$

Questa espressione si riduce alla (2.37) ad ogni istante t soltanto quando le sommatorie sui coefficienti di Fourier siano estese all'infinito. In tal caso vale infatti l'ortonormalità dei modi di Floquet:

$$\langle u_i(t) | u_j(t) \rangle = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i(l-m)\omega t} \langle u_i^{(l)} | u_j^{(m)} \rangle = \delta_{ij}. \quad (2.39)$$

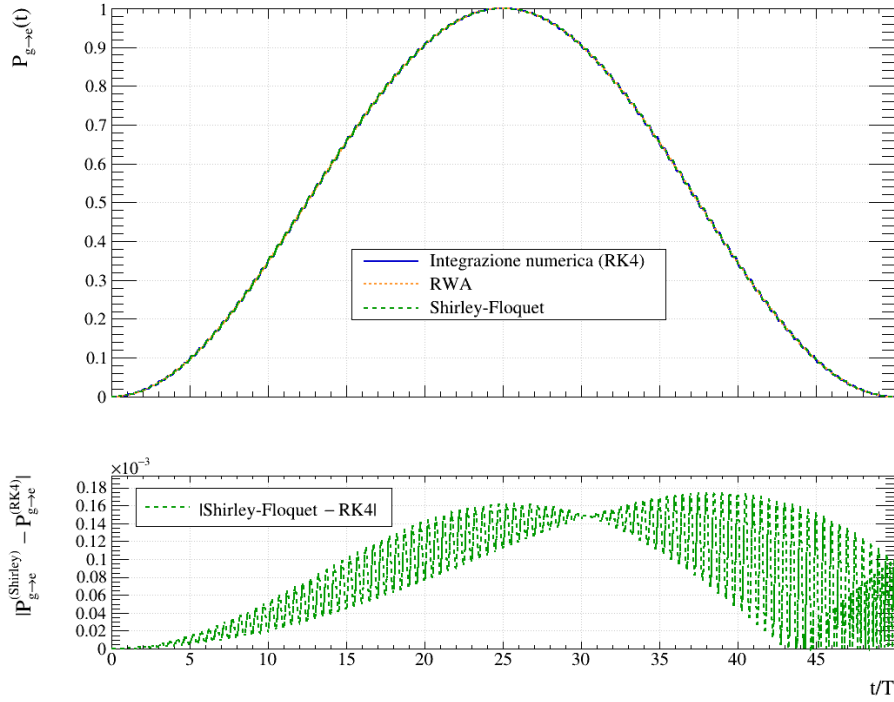


Figura 2.1: Regime 1 ($\Delta = 0.00$, $\Omega = 0.02$, in unità di ω_0).

$\mathcal{P}_{g \rightarrow e}(t)$, $t \in [0, 2\pi/\Omega_e]$, calcolate con i tre metodi Runge-Kutta 4, RWA e Shirley-Floquet. Pannello inferiore: differenza $|\mathcal{P}_{Shirley} - \mathcal{P}_{RK4}|$.

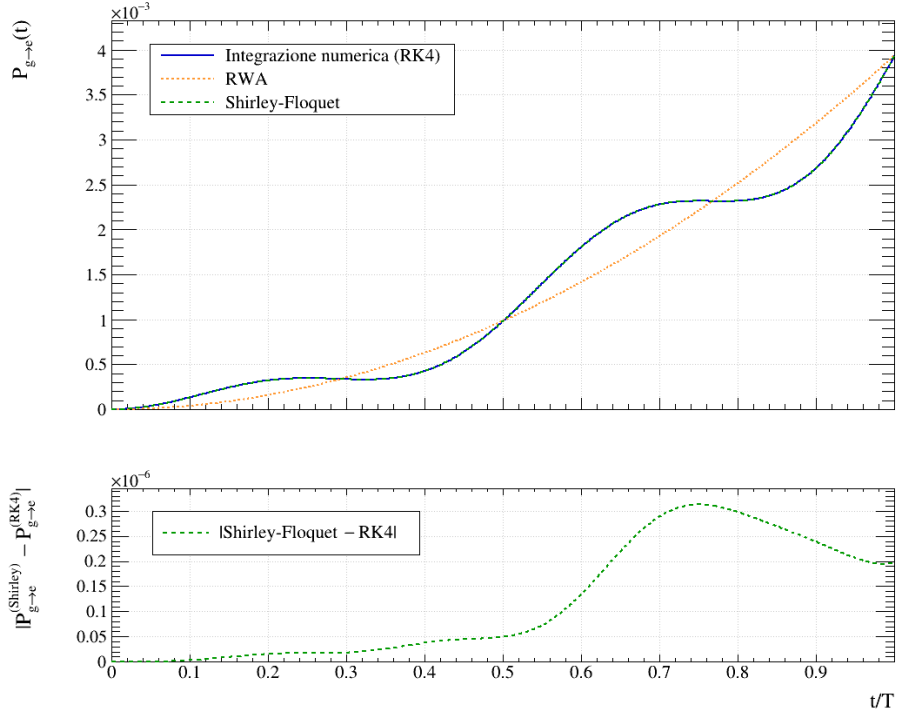


Figura 2.2: Regime 1 ($\Delta = 0.00$, $\Omega = 0.02$, in unità di ω_0). $\mathcal{P}_{g \rightarrow e}(t)$, $t \in [0, 2\pi/\omega]$, calcolate con i tre metodi Runge-Kutta 4, RWA e Shirley-Floquet. Pannello inferiore: differenza $|\mathcal{P}_{Shirley} - \mathcal{P}_{RK4}|$.

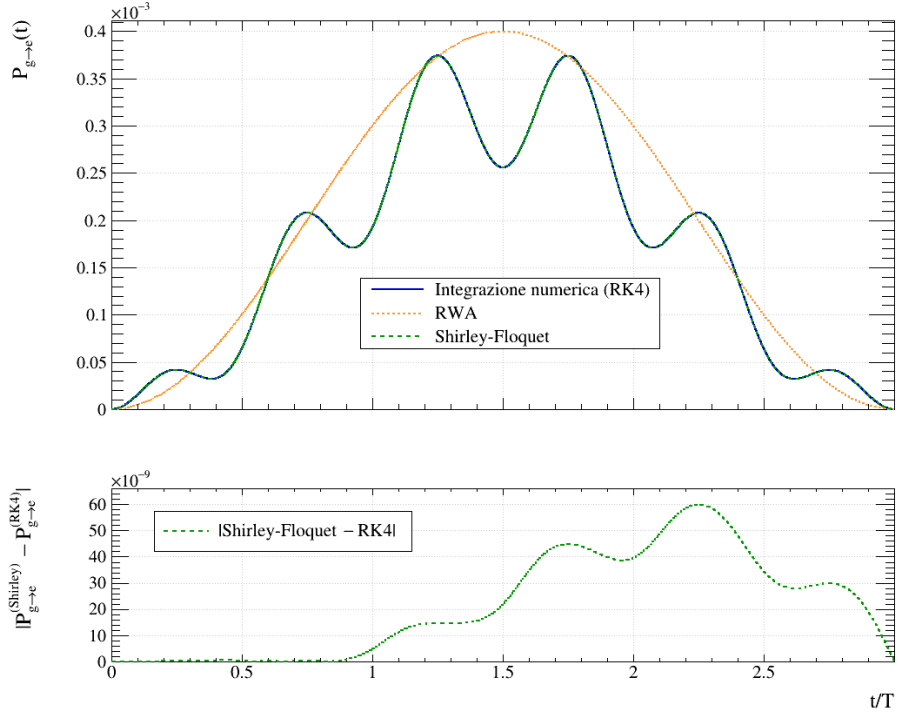


Figura 2.3: Regime 2 ($\Delta = 0.50$, $\Omega = 0.01$, in unità di ω_0). $\mathcal{P}_{g \rightarrow e}(t)$, $t \in [0, 2\pi/\Omega_e]$, calcolate con i tre metodi Runge-Kutta 4, RWA e Shirley-Floquet. Pannello inferiore: differenza $|\mathcal{P}_{\text{Shirley}} - \mathcal{P}_{\text{RK4}}|$.

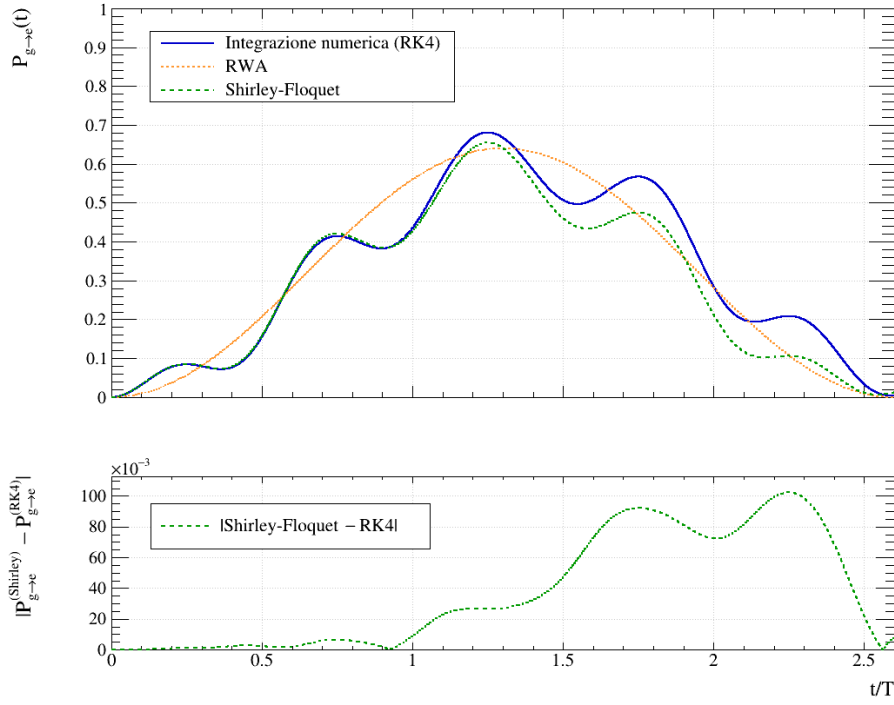


Figura 2.4: Regime 3 ($\Delta = 0.30$, $\Omega = 0.40$, in unità di ω_0). $\mathcal{P}_{g \rightarrow e}(t)$, $t \in [0, 2\pi/\Omega_e]$, calcolate con i tre metodi Runge-Kutta 4, RWA e Shirley-Floquet. Pannello inferiore: differenza $|\mathcal{P}_{Shirley} - \mathcal{P}_{RK4}|$.

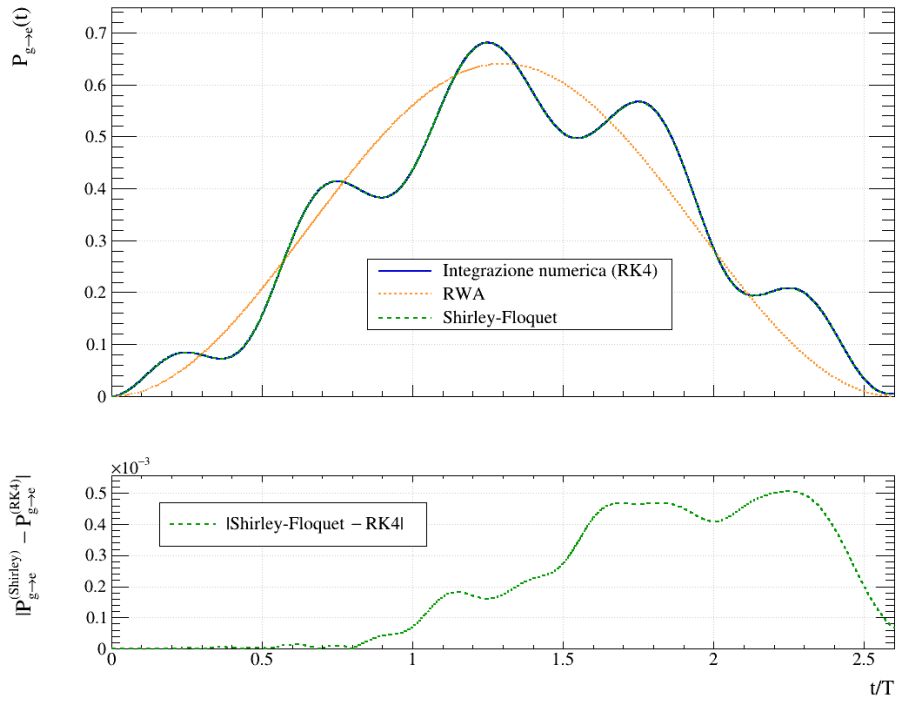


Figura 2.5: Regime 3 ($\Delta = 0.30$, $\Omega = 0.40$, in unità di ω_0). Shirley-Floquet esteso a $|m| \leq 3$. Confronto $\mathcal{P}_{g \rightarrow e}(t)$, $t \in [0, 2\pi/\Omega_e]$, tra RK4, RWA e Shirley-Floquet. Pannello inferiore: differenza $|\mathcal{P}_{Shirley} - \mathcal{P}_{RK4}|$.

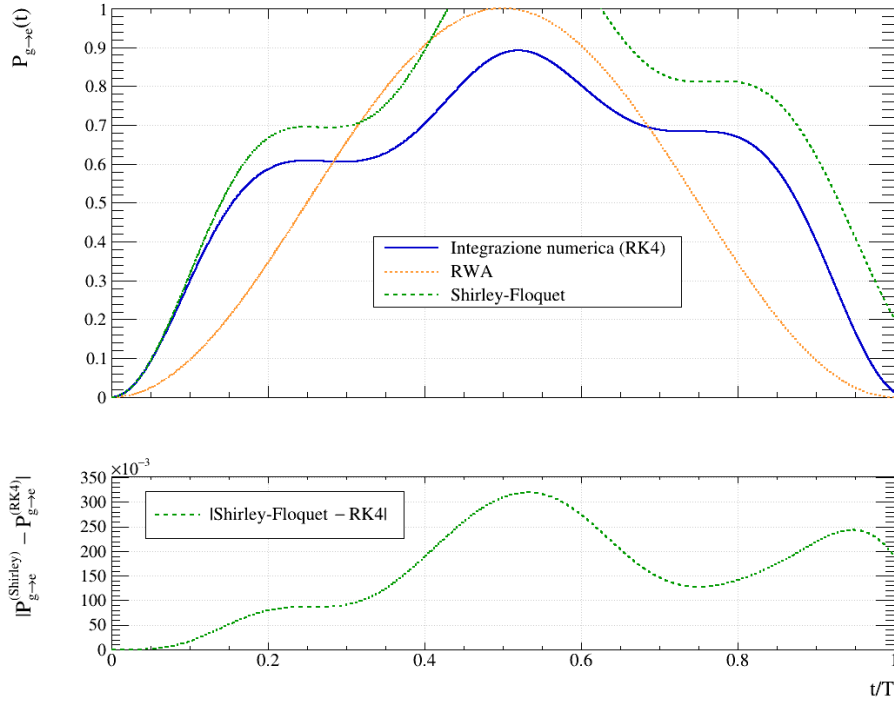


Figura 2.6: Regime 4 ($\Delta = 0.00$, $\Omega = 1.00$ in unità di ω_0). $\mathcal{P}_{g \rightarrow e}(t)$, $t \in [0, 2\pi/\Omega_e]$, calcolate con i tre metodi Runge-Kutta 4, RWA e Shirley-Floquet. Pannello inferiore: differenza $|\mathcal{P}_{Shirley} - \mathcal{P}_{RK4}|$.

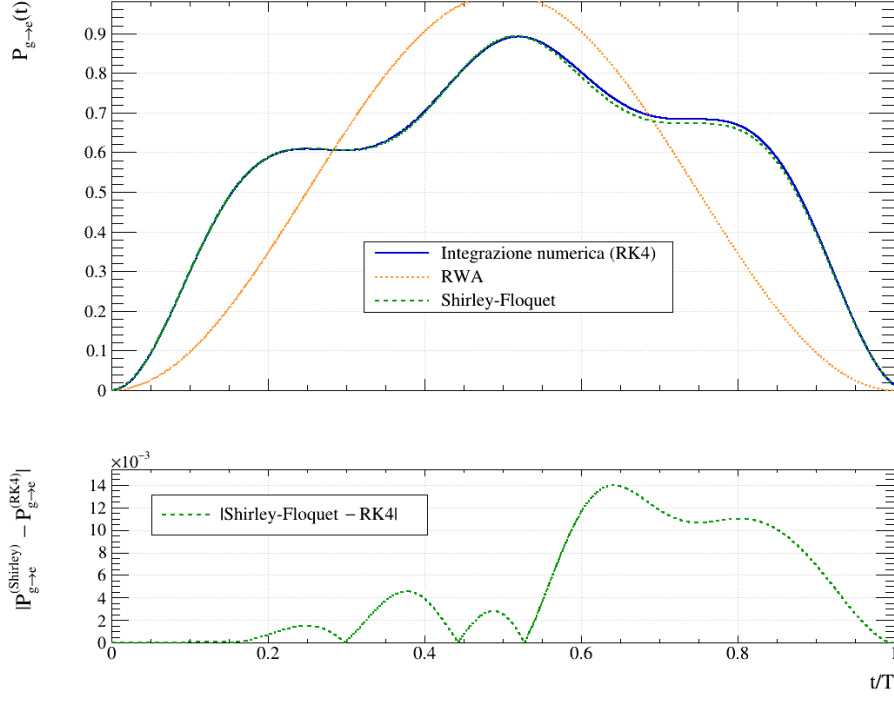


Figura 2.7: Regime 4 ($\Delta = 0.00$, $\Omega = 1.00$, in unità di ω_0). Shirley-Floquet esteso a $|m| \leq 3$. Confronto $\mathcal{P}_{g \rightarrow e}(t)$, $t \in [0, 2\pi/\Omega_e]$, tra RK4, RWA e Shirley-Floquet. Pannello inferiore: differenza $|\mathcal{P}_{\text{Shirley}} - \mathcal{P}_{\text{RK4}}|$.

Conclusioni

Nella presente trattazione si è derivato matematicamente il teorema di Floquet e se ne è illustrata l'applicazione naturale a sistemi quantistici descritti da spazi di Hilbert di dimensione finita. Si è inoltre discussa l'indeterminazione delle quasienergie, originata matematicamente dalla multivalenza del logaritmo complesso. L'approccio introdotto da J. H. Shirley ha permesso di rimuovere l'arbitrarietà nella scelta delle quasienergie, fornendo al contempo un metodo particolarmente efficace per il calcolo numerico delle soluzioni del problema.

Il metodo di Shirley-Floquet fornisce una giustificazione diretta della risolubilità analitica del caso di polarizzazione circolare. L'elemento di matrice dell'hamiltoniana risulta infatti

$$\hat{H}_{CP}^{(m-m')} = \frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{\sigma}^z\delta_{m,m'} + \frac{\hbar\Omega}{2}(\hat{\sigma}^+\delta_{m,m'+1} + \hat{\sigma}^-\delta_{m,m'-1}). \quad (2.40)$$

Sono quindi permesse le sole transizioni dallo stato fondamentale con indice m' allo stato eccitato con $m = m' + 1$, e viceversa. Questo rende la matrice di Shirley diagonale a blocchi indipendenti, ciascuno con un proprio valore di m , e dunque il problema è risolubile esattamente. Nel caso di polarizzazione lineare, gli elementi di matrice risultano non nulli per entrambi i siti adiacenti a m . Dunque, la matrice di Shirley non è più riducibile a blocchi indipendenti e un suo troncamento fornisce solo un'approssimazione del risultato. All'aumentare dell'intensità del campo, gli accoppiamenti verso settori con $|m|$ più elevati diventano rilevanti, rendendo necessario includere un numero maggiore di componenti di Fourier per una descrizione accurata.

La formulazione sviluppata per spazi di Hilbert di dimensione finita può essere estesa a problemi definiti su spazi infinito-dimensionali, purché questi ammettano, in buona approssimazione, un troncamento a un sottospazio di dimensione finita. Questo è proprio il metodo adottato da M. Holthaus (Ref. [4]) nello studio di un atomo neutro in un reticolo ottico guidato periodicamente. Nell'articolo, partendo dall'Ansatz per le soluzioni contemporaneamente previste dai teoremi di Bloch e di Floquet, sono state calcolate numericamente le bande di quasienergia $\varepsilon(k)$ nella prima zona di Brillouin.

Bibliografia

- [1] Claude Cohen-Tannoudji, Jacques Dupont-Roc, and Gilbert Grynberg. *Photons and Atoms: Introduction to Quantum Electrodynamics*. Wiley, New York, 1989.
- [2] Gaston Floquet. Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques. *Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure*, 12:47–88, 1883.
- [3] Nicholas J. Giordano and Hisao Nakanishi. *Computational Physics*. Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 2nd edition, 2006.
- [4] Martin Holthaus. Floquet engineering with quasienergy bands of periodically driven optical lattices. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 49(1):013001, 2016.
- [5] Robert L. Jaffe and Washington Taylor. 8.321 quantum theory i: Lecture notes. MIT OpenCourseWare, 2017. Lecture 8. Disponibile all'indirizzo: <https://ocw.mit.edu/courses/8-321-quantum-theory-i-fall-2017/>.
- [6] Andrei B. Klimov and Sergei M. Chumakov. *A Group-Theoretical Approach to Quantum Optics: Models of Atom-Field Interactions*. Wiley-VCH, Weinheim, 2009.
- [7] J. J. Sakurai and Jim Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, 2nd edition, 2011.
- [8] Hideo Sambe. Steady states and quasienergies of a quantum-mechanical system in an oscillating field. *Physical Review A*, 7(6):2203–2213, 1973.
- [9] Giuseppe E. Santoro. Introduction to floquet. Lecture notes, SISSA, 2019. https://www.ggi.infn.it/sft/SFT_2019/LectureNotes/Santoro.pdf.

- [10] Jon H. Shirley. Solution of the schrödinger equation with a hamiltonian periodic in time. *Physical Review*, 138:B979–B987, 1965.
- [11] Daniel A. Steck. Quantum and atom optics. Lecture notes, 2007. Disponibile online (revisioni successive): <http://steck.us/teaching>.
- [12] Gerald Teschl. *Ordinary Differential Equations and Dynamical Systems*, volume 140 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, Providence, RI, 2012.

Appendice A

Hamiltoniane di interazione atomo-radiazione

La derivazione dell'hamiltoniana classica e la quantizzazione canonica seguono fedelmente il libro *Photons and Atoms: Introduction to Quantum Electrodynamics* (Ref. [1]). Per ricavare le forme operatoriali delle hamiltoniane utilizzate nel capitolo 2 si è infine fatto riferimento al libro *Quantum and Atom Optics* (Ref. [11]).

A.1 Elettrodinamica classica nel formalismo lagrangiano

Si considera un insieme di particelle di massa m_α e carica elettrica q_α immerse in un campo elettromagnetico. Si assume che tali particelle siano sufficientemente vicine tra loro da poter approssimare la loro mutua interazione come puramente coulombiana. In questo modo, ogni particella subisce una forza di Lorentz

$$\mathbf{F}_\alpha^L = q_\alpha (\mathbf{E}(\mathbf{r}_\alpha, t) + \dot{\mathbf{r}}_\alpha \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha, t)), \quad (\text{A.1})$$

dovuta all'interazione con la radiazione esterna, e una forza coulombiana

$$F_\alpha^C = -\nabla_{\mathbf{r}_\alpha} V_C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N), \quad \text{con } V_C = \sum_{\alpha < \beta} \frac{q_\alpha q_\beta}{|\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|}. \quad (\text{A.2})$$

Introducendo i potenziali vettore $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ e scalare $\phi(\mathbf{r}, t)$ attraverso le equazioni

$$\begin{cases} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \phi(\mathbf{r}, t) - \partial_t \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \end{cases}, \quad (\text{A.3})$$

è possibile riscrivere le forze di Lorentz nella forma

$$\mathbf{F}_\alpha^L = q_\alpha \left[-\nabla\phi - \partial_t \mathbf{A} + \nabla(\dot{\mathbf{r}}_\alpha \cdot \mathbf{A}) - (\dot{\mathbf{r}}_\alpha \cdot \nabla) \mathbf{A} \right]. \quad (\text{A.4})$$

Il sistema di equazioni (A.3) definisce i potenziali $\mathbf{A}$ e ϕ a meno di una trasformazione di gauge

$$\begin{cases} \mathbf{A}' \mapsto \mathbf{A} + \nabla\xi \\ \phi' \mapsto \phi - \partial_t \xi \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

dove $\xi(\mathbf{r}, t)$ è una generica funzione scalare. Il moto delle particelle è dunque determinato classicamente dalle equazioni di Newton

$$m_\alpha \ddot{\mathbf{r}}_\alpha = \mathbf{F}_\alpha^C + \mathbf{F}_\alpha^L. \quad (\text{A.6})$$

Affinché tali equazioni corrispondano alle equazioni di Eulero-Lagrange nel formalismo lagrangiano

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_\alpha} \right) - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_\alpha} = 0, \quad (\text{A.7})$$

è sufficiente definire la lagrangiana del sistema come

$$L = \sum_\alpha \frac{1}{2} m_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha^2 - V_C(\{\mathbf{r}_\gamma\}) + \sum_\alpha [q_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha, t) - q_\alpha \phi(\mathbf{r}_\alpha, t)]. \quad (\text{A.8})$$

Assumendo che le particelle siano localizzate in una regione spaziale sufficientemente piccola attorno all'origine, è possibile sviluppare in serie di Taylor i potenziali nella lagrangiana, tenendo soltanto i termini non nulli di ordine più basso:

$$\sum_\alpha [q_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha, t) - q_\alpha \phi(\mathbf{r}_\alpha, t)] \approx \sum_\alpha q_\alpha [\dot{\mathbf{r}}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}, t) - \mathbf{r}_\alpha \cdot \nabla \phi(\mathbf{0}, t)], \quad (\text{A.9})$$

dove si è assunto che la carica totale del sistema sia nulla, $\sum_\alpha q_\alpha = 0$. L'approssimazione (A.9) è nota come *approssimazione di dipolo*. Per un'onda monocromatica interagente con l'elettrone di un atomo, essa risulta valida quando la lunghezza d'onda λ della radiazione è molto maggiore delle dimensioni caratteristiche dell'atomo r_a ¹.

Definendo il momento di dipolo elettrico

$$\mathbf{d} = \sum_\alpha q_\alpha \mathbf{r}_\alpha, \quad (\text{A.10})$$

¹L'approssimazione risulta in particolare lecita per transizioni ottiche di elettroni di valenza stimolati da laser. Le dimensioni tipiche dell'atomo sono infatti dell'ordine dell'ångström, mentre la lunghezza d'onda di una radiazione ottica è dell'ordine delle centinaia di nm.

la lagrangiana può essere riscritta nella forma

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - V_C(\{\mathbf{r}_{\gamma}\}) + \dot{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}, t) - \mathbf{d} \cdot \nabla \phi(\mathbf{0}, t). \quad (\text{A.11})$$

Si applica ora alla lagrangiana (A.11) la trasformazione di gauge generata dalla funzione

$$\xi(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}, t). \quad (\text{A.12})$$

I potenziali trasformati diventano

$$\begin{cases} \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{A}(\mathbf{0}, t) \\ \phi'(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t) + \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{0}, t) \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

che implicano

$$\begin{cases} \mathbf{A}'(\mathbf{0}, t) = \mathbf{0} \\ \nabla \phi'(\mathbf{0}, t) = \nabla \phi(\mathbf{0}, t) + \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{0}, t) = -\mathbf{E}(\mathbf{0}, t). \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

La lagrangiana nel nuovo gauge risulta quindi

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - V_C(\{\mathbf{r}_{\gamma}\}) + \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{0}, t). \quad (\text{A.15})$$

Tale trasformazione di gauge è chiamata *trasformazione di Goeppert-Mayer*, in onore della fisica teorica M. Goeppert-Mayer, seconda donna ad aver vinto il Premio Nobel per la Fisica nel 1963.

L'hamiltoniana del sistema è quindi ricavata tramite una trasformata di Legendre della funzione (A.15) e risulta

$$H = \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + V_C(\{\mathbf{r}_{\gamma}\}) - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{0}, t), \quad (\text{A.16})$$

in funzione dei momenti coniugati

$$\mathbf{p}_{\alpha} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}. \quad (\text{A.17})$$

Nell'ipotesi in cui tutte le particelle abbiano posizione fissa, eccetto una di carica $-e$ e massa m_e , l'hamiltoniana (A.16) si riduce a

$$H = \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} + V_C(\mathbf{r}_e) - \mathbf{d}_e \cdot \mathbf{E}(\mathbf{0}, t), \quad (\text{A.18})$$

con $\mathbf{d}_e = -e\mathbf{r}_e$. Questa hamiltoniana descrive correttamente la dinamica dell'elettrone di valenza di un atomo alcalino interagente con una radiazione esterna, sostituendo il potenziale coulombiano $V_C(\mathbf{r}_e)$ con uno effettivo $V(r_e)$ dipendente solo dal modulo $r_e = |\mathbf{r}_e|$ e che tenga conto della struttura dell'atomo stesso.

A.2 Formalismo quantistico

In un framework quantistico, si promuovono le variabili canoniche $\mathbf{r}_e$ e $\mathbf{p}_e$ a operatori $\hat{\mathbf{r}}_e$ e $\hat{\mathbf{p}}_e$ che rispettano le regole di commutazione

$$\begin{cases} [\hat{r}_i, \hat{r}_j] = 0 \\ [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \\ [\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}. \end{cases} \quad (\text{A.19})$$

L'operatore hamiltoniano è definito come

$$\hat{H} = H(\hat{\mathbf{r}}_e, \hat{\mathbf{p}}_e) = \frac{\hat{\mathbf{p}}_e^2}{2m_e} + V(\hat{\mathbf{r}}_e) - \hat{\mathbf{d}}_e \cdot \mathbf{E}(\mathbf{0}, t), \quad (\text{A.20})$$

dove $\hat{\mathbf{d}}_e = -e\hat{\mathbf{r}}_e$. Si identificano due termini dell'operatore, che descrivono rispettivamente l'atomo libero

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}_e^2}{2m_e} + V(\hat{\mathbf{r}}_e) \quad (\text{A.21})$$

e l'interazione tra l'atomo e la radiazione

$$\hat{H}_{int} = -\hat{\mathbf{d}}_e \cdot \mathbf{E}(\mathbf{0}, t). \quad (\text{A.22})$$

Si assume che il campo elettrico sia un'onda monocromatica

$$\mathbf{E}(t) = \hat{\epsilon}E_0 \cos(\omega t) \quad (\text{A.23})$$

con frequenza angolare ω quasi-risonante con una particolare transizione elettronica dell'atomo di frequenza ω_0 , e distante da tutte le altre frequenze di transizione. In tale regime è lecito restringere la dinamica ai soli due livelli coinvolti. Questi sono denotati con $|gs\rangle$ (stato fondamentale) ed $|es\rangle$ (stato eccitato) e, per definizione, sono due autostati di $\hat{H}_0$. Si vogliono dunque determinare gli elementi di matrice di $\hat{H}_{int}$ nella base $\{|gs\rangle, |es\rangle\}$.

L'operatore $\hat{\mathbf{d}}_e$ è un'osservabile e in quanto tale dev'essere autoaggiunto,

$$\langle es|\hat{\mathbf{d}}_e|gs\rangle = \langle gs|\hat{\mathbf{d}}_e|es\rangle^*. \quad (\text{A.24})$$

Scegliendo le fasi degli autostati $|es\rangle$ e $|gs\rangle$ in modo da rendere reale l'elemento di matrice, si fanno quindi coincidere gli elementi non diagonali di $\hat{H}_{int}$. Si definisce quindi la frequenza di Rabi

$$\Omega := \frac{|\langle es|\hat{\mathbf{d}}_e \cdot \hat{\epsilon}|gs\rangle E_0|}{\hbar}, \quad (\text{A.25})$$

e gli elementi fuori dalla diagonale si scrivono come

$$\langle es|\hat{H}_{int}|gs\rangle = \langle gs|\hat{H}_{int}|es\rangle = -\hbar\Omega \cos(\omega t). \quad (\text{A.26})$$

Gli elementi sulla diagonale risultano invece nulli. Questo può essere dimostrato attraverso l'operatore di parità $\hat{\Pi}$, definito dalla trasformazione

$$\hat{\Pi} \hat{\mathbf{r}} \hat{\Pi}^\dagger = -\hat{\mathbf{r}}. \quad (\text{A.27})$$

$\hat{\Pi}$ è un operatore unitario e autoaggiunto, e i suoi autovalori sono quindi $\pi_\pm = \pm 1$. Esso inoltre commuta con l'hamiltoniana dell'atomo libero $\hat{H}_0$, perciò gli autostati $|gs\rangle$ ed $|es\rangle$ sono anche autostati di $\hat{\Pi}$ con autovalori $\pi_{e,g} = \pm 1$. Sfruttando l'unitarietà si deduce

$$\begin{aligned} \langle gs|\hat{r}|gs\rangle &= \langle gs|(\hat{\Pi}^\dagger \hat{\Pi})\hat{r}(\hat{\Pi}^\dagger \hat{\Pi})|gs\rangle = \\ &= \pi_g^2 \langle gs|-\hat{r}|gs\rangle = \\ &= -\langle gs|\hat{r}|gs\rangle = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

e analogamente per $|es\rangle$, dimostrando quanto affermato.

Fissando l'energia dello stato fondamentale a $-\hbar\omega_0/2$ e quella dello stato eccitato a $+\hbar\omega_0/2$, l'hamiltoniana dell'atomo a due livelli nella base degli autostati dell'energia si scrive

$$\hat{H}_0 + \hat{H}_{int} = \frac{\hbar\omega_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \hbar\Omega \cos(\omega t) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.29})$$

Per una polarizzazione circolare del campo elettrico

$$\mathbf{E}(t) = E_0 [\hat{\mathbf{i}} \cos(\omega t) + \hat{\mathbf{j}} \sin(\omega t)], \quad (\text{A.30})$$

si procede in maniera del tutto analoga al caso precedente. Si utilizza il risultato (tratto da Ref. [6], secondo capitolo, sezione 2.3) per cui una transizione stimolata tra lo stato fondamentale e lo stato eccitato è ammessa solo se

$$\langle es|\hat{d}_x|gs\rangle = i \langle es|\hat{d}_y|gs\rangle, \quad (\text{A.31})$$

e dunque

$$\langle gs|\hat{d}_x|es\rangle = -i \langle gs|\hat{d}_y|es\rangle. \quad (\text{A.32})$$

Questo consente di definire nuovamente la frequenza di Rabi

$$\Omega = \frac{2 \left| \langle gs|\hat{\mathbf{d}}|es\rangle \cdot E_0 \hat{\mathbf{i}} \right|}{\hbar} = \frac{2 \left| \langle gs|\hat{\mathbf{d}}|es\rangle \cdot E_0 \hat{\mathbf{j}} \right|}{\hbar}. \quad (\text{A.33})$$

L'hamiltoniana diventa quindi

$$\begin{aligned}\hat{H}_{int} &= \begin{pmatrix} \langle es|\hat{H}_{int}|es\rangle & \langle es|\hat{H}_{int}|gs\rangle \\ \langle gs|\hat{H}_{int}|es\rangle & \langle gs|\hat{H}_{int}|gs\rangle \end{pmatrix} = \\ &= -\frac{\hbar\Omega}{2} \begin{pmatrix} 0 & \cos(\omega t) - i \sin(\omega t) \\ \cos(\omega t) + i \sin(\omega t) & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{A.34}$$

Le hamiltoniane di interazione ottenute in questa appendice presentano un segno opposto rispetto a quelle utilizzate nel capitolo 2. Tale differenza può essere interpretata come un semplice sfasamento del campo elettrico di π .

Appendice B

Integrazione numerica di Runge-Kutta

Si consideri un problema ai valori iniziali della forma

$$\frac{d\mathbf{y}(t)}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \quad (\text{B.1})$$

dove $\mathbf{y} \in \mathbb{C}^2$ e $f : \mathbb{R} \times \mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2$ è almeno di classe C^4 .

Il metodo di Runge-Kutta del quarto ordine (RK4) fornisce un algoritmo per stimare la soluzione $\mathbf{y}(t)$ su un intervallo di tempo finito¹. In particolare, noto il valore della soluzione $\mathbf{y}_n = \mathbf{y}(t_n)$, il metodo permette di stimare $\mathbf{y}_{n+1}$ all'istante $t_{n+1} = t_n + h$, dove $h > 0$ è il passo di integrazione.

Il teorema del valore medio di Lagrange garantisce l'esistenza di un istante $t' \in [t_n, t_n + h]$ tale che la soluzione esatta sia

$$\mathbf{y}(t_n + h) = \mathbf{y}(t_n) + h\mathbf{f}(t', \mathbf{y}(t')). \quad (\text{B.2})$$

Si cerca dunque una buona stima della funzione $\mathbf{f}(t', \mathbf{y}(t'))$. A tale scopo, si definiscono i seguenti incrementi:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n), \\ \mathbf{k}_2 &= \mathbf{f}\left(t_n + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_n + \frac{h}{2}\mathbf{k}_1\right), \\ \mathbf{k}_3 &= \mathbf{f}\left(t_n + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_n + \frac{h}{2}\mathbf{k}_2\right), \\ \mathbf{k}_4 &= \mathbf{f}(t_n + h, \mathbf{y}_n + h\mathbf{k}_3) \end{aligned}$$

¹La derivazione del metodo Runge-Kutta del quarto ordine segue la trattazione presentata in Ref. [3].

e la formula di avanzamento generale

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h(a\mathbf{k}_1 + b\mathbf{k}_2 + c\mathbf{k}_3 + d\mathbf{k}_4). \quad (\text{B.3})$$

Si vogliono determinare i valori a , b , c e d che determinano il peso di ciascun incremento $\mathbf{k}_i$ nella formula finale.

A tal fine, si sviluppa in serie di Taylor la soluzione esatta $\mathbf{y}(t_{n+1}) = \mathbf{y}(t_n + h)$:

$$\mathbf{y}(t_n + h) = \mathbf{y}(t_n) + h\mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n) + \frac{h^2}{2} \frac{d\mathbf{f}}{dt} \Big|_{t_n, \mathbf{y}_n} + \frac{h^3}{6} \frac{d^2\mathbf{f}}{dt^2} \Big|_{t_n, \mathbf{y}_n} + \frac{h^4}{24} \frac{d^3\mathbf{f}}{dt^3} \Big|_{t_n, \mathbf{y}_n} + O(h^5). \quad (\text{B.4})$$

Dunque si espandono in serie di Taylor al terzo ordine gli incrementi $\mathbf{k}_i$ e si sostituiscono le espansioni nella formula generale di avanzamento, imponendo che il risultato coincida con lo sviluppo di Taylor della soluzione esatta fino al termine in h^4 . Si ottengono così i seguenti valori per i coefficienti a , b , c e d :

$$\begin{cases} a = d = \frac{1}{6} \\ b = c = \frac{1}{3}. \end{cases}$$

Con questi valori la formula di avanzamento diventa:

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{h}{6}(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4). \quad (\text{B.5})$$

Poiché l'uguaglianza tra le due serie di Taylor è stata imposta fino al termine di ordine h^4 , l'errore locale di troncamento del metodo è $O(h^5)$. Il metodo Runge-Kutta così ottenuto è quindi del quarto ordine.

Appendice C

Codice di implementazione in C++

Il codice in C++ riportato di seguito implementa i tre metodi discussi nel Capitolo 2 per il sistema a due livelli con polarizzazione lineare: l'integrazione numerica dell'equazione di Schrödinger con il metodo di Runge-Kutta di quarto ordine, l'approssimazione di onda rotante (RWA) e l'approccio di Shirley-Floquet con il troncamento alle componenti di Fourier $m = -1, 0, +1$. I calcoli sono stati eseguiti con le frequenze in unità di ω_0 e le energie in unità di $\hbar\omega_0$.

Per le operazioni su vettori e matrici si è utilizzata la libreria Eigen. I dati di input sono impostati di default per simulare il primo regime della Tabella 2.1 ($\Delta = 0.00$, $\Omega = 0.02$). Questi parametri possono essere modificati al momento dell'esecuzione direttamente dalla riga di comando, specificando nell'ordine i valori desiderati per Δ , Ω e il passo di integrazione h . Il programma calcola le probabilità di transizione $P_{g \rightarrow e}(t)$ con tutti e tre i metodi e le salva nel file `probabilities.csv`, successivamente utilizzato per generare i grafici del Capitolo 2. Vengono inoltre stampati sullo standard output l'operatore di Floquet, i moltiplicatori di Floquet e le quasienergie, queste ultime ottenute sia con il metodo di Shirley-Floquet sia con l'integrazione RK4.

Il codice può essere compilato con il comando

```
g++ -O2 -o main main.cpp -lm -std=c++11 -I/usr/include/eigen3
```

Listing C.1: main.cpp

```
#include <Eigen/Dense>
#include <algorithm>
#include <cmath>
#include <complex>
#include <fstream>
```

```

#include <iomanip>
#include <iostream>
#include <string>

using namespace Eigen;

using cdouble = std::complex<double>;
using Matrix6d = Eigen::Matrix<double, 6, 6>;
using Vector6d = Eigen::Matrix<double, 6, 1>;

// --- Class: Sistema ---
class System {
    double Delta_, Omega_, Omega_e_;
    Vector6d eval_shirley_;
    Matrix6d evec_shirley_;

    void diagonalize_shirleyMatrix();

public:
    System(double Delta, double Omega) : Delta_(Delta),
        Omega_(Omega), Omega_e_(std::sqrt(Delta * Delta +
        Omega * Omega)) { diagonalize_shirleyMatrix(); }

    double Delta() const { return Delta_; }
    double omega_rad() const { return 1 + Delta_; }
    double Omega() const { return Omega_; }
    double Omega_e() const { return Omega_e_; }
    const Vector6d& eval_shirley() const { return
        eval_shirley_; }

    Vector2cd psi_dot(double t, const Vector2cd& psi)
        const;
    double prob_rwa(double t) const;
    double prob_shirley(double t) const;
};

// --- Class: Integrazione numerica ---
class Integrator {
private:
    static void rk4_step(const System& syst, double t,
        double h, Vector2cd& psi);

public:
    // evoluzione; save=true scrive probabilities.csv
    static Vector2cd evolve(const System& syst, double
        t_final, double h, Vector2cd psi, bool save =
        false);
};

```

```

// ===== System::methods =====

// --- Autovalori e autovettori di Shirley-Floquet ---
void System::diagonalize_shirleyMatrix() {
    Matrix6d M = Matrix6d::Zero();
    M(0, 0) = 0.5 + omega_rad();
    M(1, 1) = -0.5 + omega_rad();
    M(2, 2) = 0.5;
    M(3, 3) = -0.5;
    M(4, 4) = 0.5 - omega_rad();
    M(5, 5) = -0.5 - omega_rad();
    M(2, 1) = M(1, 2) = M(3, 0) = M(0, 3) = Omega_ / 2.0;
    M(4, 3) = M(3, 4) = M(5, 2) = M(2, 5) = Omega_ / 2.0;
    SelfAdjointEigenSolver<Matrix6d> solver(M);
    eval_shirley_ = solver.eigenvalues();
    evec_shirley_ = solver.eigenvectors();
}

// --- Equazione di Schrodinger ---
Vector2cd System::psi_dot(double t, const Vector2cd& psi)
const {
    //      d/dt psi = -i M(t) psi
    const cdouble I(0.0, 1.0);
    const double c = Omega_ * std::cos(omega_rad() * t);
    Matrix2cd H;
    H << 1 / 2.0, c, c, -1 / 2.0;
    return -I * (H * psi);
}

// --- Probabilita' RWA ---
double System::prob_rwa(double t) const {
    if (Omega_e_ < 1e-14) return 0.0;
    return (Omega_ * Omega_ / (Omega_e_ * Omega_e_)) *
        std::pow(std::sin(Omega_e_ * t / 2.0), 2);
}

// --- Probabilita' Shirley-Floquet ---
double System::prob_shirley(double t) const {
    cdouble amp_e = 0.0;
    for (int i = 0; i < 6; ++i) {
        cdouble phase = exp(cdouble(0, -eval_shirley_(i)
            * t));
        cdouble u_mode = evec_shirley_(0, i) *
            exp(cdouble(0, +omega_rad() * t)) +
            evec_shirley_(2, i) + evec_shirley_(4, i) *
            exp(cdouble(0, -omega_rad() * t)); //
        // m=-1,0,+1, componente es
        amp_e += evec_shirley_(3, i) * phase * u_mode;
    }
}

```

```

    }
    return std::norm(amp_e);
}

// ===== Integrator::methods =====

// --- Singolo passo RK4 ---
void Integrator::rk4_step(const System& syst, double t,
    double h, Vector2cd& psi) {
    Vector2cd k1 = syst.psi_dot(t, psi);
    Vector2cd k2 = syst.psi_dot(t + h / 2.0, psi + (h /
        2.0) * k1);
    Vector2cd k3 = syst.psi_dot(t + h / 2.0, psi + (h /
        2.0) * k2);
    Vector2cd k4 = syst.psi_dot(t + h, psi + h * k3);
    psi += (h / 6.0) * (k1 + 2.0 * k2 + 2.0 * k3 + k4);
}

// --- Evoluzione temporale da 0 a t_final (salva su file
// solo se save=true, ritorna psi finale) ---
Vector2cd Integrator::evolve(const System& syst, double
    t_final, double h, Vector2cd psi, bool save) {
    int N = static_cast<int>(std::round(t_final / h));
    double t = 0, dt = t_final / N, T = 2.0 * M_PI /
        syst.omega_rad();
    std::ofstream f;
    if (save) {
        f.open("probabilities.csv");
        f << "#
            t/T,P_RK4,P_RWA,P_Shirley,|P_Shirley-P_RK4|\n"
            << std::fixed << std::setprecision(12);
    }
    for (int i = 0; i <= N; ++i) {
        if (save) {
            double t_norm = t / T;
            double p_rk4 = std::norm(psi(0));
            double p_rwa = syst.prob_rwa(t);
            double p_shi = syst.prob_shirley(t);
            double diff = std::abs(p_shi - p_rk4);

            f << t_norm << "," << p_rk4 << "," << p_rwa
                << "," << p_shi << "," << diff << "\n";
        }
        if (i < N) {
            rk4_step(syst, t, dt, psi);
            t += dt;
        }
    }
    if (save) f.close(), std::cout << "Dati salvati:

```

```

        probabilities.csv\n";
    return psi;
}

// --- Main ---
int main(int argc, char* argv[]) {
    // --- Valori di default ---
    double Delta = 0.00;
    double Omega = 0.02;
    double h = 0.001;

    // --- Override da linea di comando ---
    if (argc > 1) Delta = std::stod(argv[1]);
    if (argc > 2) Omega = std::stod(argv[2]);
    if (argc > 3) h = std::stod(argv[3]); // Passo
        d'integrazione

    // --- Controllo Parametri ---
    if (Omega <= 0.0) {
        std::cerr << "Errore: Omega deve essere
            positivo.\n";
        return 1;
    }
    if (h <= 0.0) {
        std::cerr << "Errore: h deve essere positivo.\n";
        return 1;
    }

    // --- Set parametri ---
    System syst(Delta, Omega);
    const double T = 2.0 * M_PI / syst.omega_rad(); //
        Periodo hamiltoniana
    const double T_rabi = 2 * M_PI / syst.Omega_e(); //
        Periodo oscillazioni di Rabi

    // --- Stampa Parametri ---
    std::cout << "Parametri utilizzati:\n";
    std::cout << "Delta = " << syst.Delta() << "\n";
    std::cout << "Omega_rabi = " << syst.Omega() << "\n";
    std::cout << "Periodo hamiltoniana T = " << T << "\n";
    std::cout << "Periodo oscillazioni di Rabi T' = " <<
        T_rabi << "\n";
    std::cout << "Passo di integrazione h = " << h <<
        "\n\n";

    // --- Calcolo operatore di Floquet ---
    Vector2cd col1 = Integrator::evolve(syst, T, h,
        Vector2cd(0.0, 1.0)); // lgs>
    Vector2cd col0 = Integrator::evolve(syst, T, h,

```

```

        Vector2cd(1.0, 0.0)); // |es>

Matrix2cd U;
U.col(0) = col0;
U.col(1) = col1;

std::cout << std::fixed << std::setprecision(12);
std::cout << "\n== Operatore di evoluzione U(T)
==\n";
std::cout << "[ " << col0(0) << " " << col1(0) << "
]\n";
std::cout << "[ " << col0(1) << " " << col1(1) << "
]\n";

// --- Calcolo quasienergie (mod hbar*omega) con RK4
---
Eigen::ComplexEigenSolver<Matrix2cd> eigenSolver(U);
auto ev = eigenSolver.eigenvalues();
cdouble mu1 = ev(0);
cdouble mu2 = ev(1);

auto reduce = [&](double eps) {
    eps = std::fmod(eps, syst.omega_rad());
    return (eps < 0.0) ? eps + syst.omega_rad() : eps;
};

const double eps1 = reduce(-std::arg(mu1) / T);
const double eps2 = reduce(-std::arg(mu2) / T);

std::cout << "\n== Quasienergie con Runge-Kutta 4
(mod omega) ==\n";
std::cout << "epsilon_1 = " << eps1 << "\n";
std::cout << "epsilon_2 = " << eps2 << "\n\n";
std::cout << "Quasienergie con Shirley-Floquet:\n" <<
    syst.eval_shirley().transpose() << "\n\n";

// --- Evoluzione di |gs> fino a T_rabi e salvataggio
in .csv ---
bool save = true;
Integrator::evolve(syst, T_rabi, h, Vector2cd(0.0,
    1.0), save);
return 0;
}

```
