



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA “LUIS RIVERA TERRAZAS”

“IRREVERSIBILIDAD DE MAXWELL EN FENÓMENOS ONDULATORIOS”

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS
(FÍSICA)

PRESENTA

JORGE ISRAEL CASTRO ALATORRE

DIRECTOR DE TESIS:

DR. EMERSON LEAO SADURNÍ HERNÁNDEZ

n.º de CVU: 784764

SEPTIEMBRE 2023

Jorge Israel Castro Alatorre
© 2023

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Instituto de Física
Doctorado en Ciencias: Física
Irreversibilidad de Maxwell en fenómenos ondulatorios
por Jorge Israel Castro Alatorre

Resumen

Se estudia un problema de dispersión causado por un obstáculo que rompe la reversibilidad espacial y temporal desde un punto de vista cuántico. De esta forma, se sigue la prescripción de Maxwell para lograr una violación de la segunda ley de la termodinámica impulsada por un término dependiente del momentum en el Hamiltoniano, dando lugar a lo que se conoce como demonio de Maxwell cuántico, mostrando nuevas perspectivas sobre cómo se plantea y se resuelve dinámicamente la aparente paradoja de Maxwell. Asimismo, se obtiene la solución analítica en términos de una función de Green dependiente de la energía así como su estructura meromórfica. Posteriormente, se estudia la evolución explícita de condiciones iniciales simétricas mostrando que la dinámica ondulatoria se comporta de forma diferente a la irreversibilidad clásica en cuanto a la aparición de colapsos y resurgimientos. Por otro lado, se diseña una cavidad electromagnética con dieléctricos incorporados (a modo de resonador dieléctrico) que cumplen la función del demonio, por lo que este sistema es capaz de enfriar y ordenar la radiación electromagnética incidente. Esta configuración puede generalizarse a varios tipos de ondas, sin depender del concepto de medición en mecánica cuántica. Finalmente, se estudia un problema de dispersión causado por una corriente neutra débil que puede ser interpretado como un demonio de Maxwell por romper paridad, estableciendo así una conexión con el mecanismo de Sakharov de materia y antimateria.

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Instituto de Física
PhD in Sciences: Physics
Maxwell's irreversibility in wave phenomena
by Jorge Israel Castro Alatorre

Abstract

We study a scattering problem caused by an obstacle that breaks spatial and temporal reversibility from a quantum point of view. Accordingly, we follow Maxwell prescription to achieve a violation of the second-law of thermodynamics driven by a momentum-dependent term in the Hamiltonian, resulting in what is known as Maxwell's daemon in the quantum domain. Thus showing new perspectives on how Maxwell's apparent paradox is posed and resolved dynamically. Additionally, we obtain an energy-dependent Green's function analytically, as well as its meromorphic structure. Subsequently, explicit evolution of symmetric initial conditions is studied, showing that wave dynamics behave differently from classical irreversibility in terms of the appearance of collapses and revivals. Apart from that, an electromagnetic cavity is designed, to which dielectrics are added (as a dielectric resonator), performing the function of a daemon, so this system is therefore able to cool and sort incident electromagnetic radiation. This setting can be generalized to many types of waves, without relying on the concept of measurement in quantum mechanics. Finally, a scattering problem caused by a weak-neutral current is discussed, which can be interpreted as a parity-breaking Maxwell daemon. Thereby establishing a connection with the Sakharov's mechanism of matter and anti-matter.

Actividades académicas

Participación en eventos

- J. I. Castro Alatorre (2021, Marzo 25). An electromagnetic Maxwell's daemon. In F. Leyvraz (chair), Classical and Quantum Dynamics of Complex Systems and Applications. [Scientific gathering]. Centro Internacional de Ciencias, UNAM; Cuernavaca, Morelos, México.
URL: cicc.unam.mx
- J. I. Castro Alatorre (2023, Enero 4). Weak-neutral currents, e-p scattering, and quantum demons. In R. Bijker (chair), 44th Symposium on Nuclear Physics. [Póster]. Hacienda Cocoyoc; Cocoyoc, Morelos, México.
URL: fisica.unam.mx/Cocoyoc2022

Publicaciones

- i) A. S. Rosado González, J. I. Castro Alatorre and E. Sadurní. Relativistic density operators: Dirac dynamics, open quantum systems and non-standard neutrino interactions. The European Physical Journal Plus, vol. 137, n.^o 8, 2022.
 - *El artículo expone la irreversibilidad à la Lindblad desde una perspectiva covariante de Lorentz, pudiendo así estudiar sistemas cuánticos abiertos relativistas, como es la oscilación de neutrinos y la asimetría entre materia y antimateria. En § 1.3 de la presente tesis se exponen las características y diferencias relevantes respecto a la irreversibilidad Maxwelliana.*
- ii) J. I. Castro Alatorre, D. Condado and E. Sadurní. Exact Green's functions for localized irreversible potentials. Revista Mexicana de Física. (Aceptado para publicación.)
 - *El artículo cubre los cap. 2 y 3 de esta tesis; expone el formalismo del demonio de Maxwell cuántico, incluyendo la solución analítica en forma de funciones de Green. Asimismo, muestra la evolución de paquetes de ondas tipo Boltzmann e isoespectral, mostrando además los cambios de energía lateral y entropía.*
- iii) J. I. Castro Alatorre and E. Sadurní. Weak-neutral currents, e-p scattering, and quantum demons. IOP Journal of Physics: Conference Series. (En revisión.)

- *El artículo cubre el cap. 5 de esta tesis; expone el formalismo de un potencial que depende del momentum cuya amplitud de dispersión es modificada según de la helicidad del electrón, y se incluye la solución analítica en forma de funciones de Green. Asimismo, se muestra el efecto de una barrera de potencial 1D que depende del momentum —y que surge naturalmente por corrientes neutras débiles— según la dirección de incidencia de una onda, en analogía con la helicidad del electrón del caso anterior.*
- iv) J. I. Castro Alatorre and E. Sadurní. Directional transport without ratchets. (Manuscrito en diseño y elaboración.)
- *El manuscrito cubre el cap. 4 de esta tesis; surge como necesidad de separar la simulación numérica (parte teórica) en el cap. 3 de la emulación del demonio de Maxwell en una cavidad electromagnética, la cual conlleva a realizaciones experimentales como trabajo a futuro.*

Asistencia a eventos

- J. I. Castro Alatorre (2021, Junio 21–23). Simposio estudiantil de posgrado en ciencia de materiales. Instituto de Física, BUAP; Puebla, Puebla, México. URL: ifuap.buap.mx
- J. I. Castro Alatorre (2023, Agosto 21–25). VI Coloquio de Simulaciones Computacionales en Ciencias. Laboratorio Virtual de Modelado de Materiales del Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM; Ensenada, B.C., México. URL: lvmm.mx



Índice general

1. Introducción	1
1.1. El demonio de Maxwell	2
1.2. Planteamiento del problema	3
1.3. Irreversibilidad <i>à la</i> Lindblad versus Maxwell	4
2. Irreversibilidad <i>à la</i> Maxwell con interacción localizada	9
2.1. Partícula con potencial de activación	10
2.1.1. Generalización cuántica	13
2.2. Función de Green	15
2.2.1. Un teorema sobre las funciones de Green no-simétricas	15
2.2.2. Función de Green para un potencial $\delta(x)$	17
2.2.3. Función de Green con potencial de activación	19
3. Aplicación a partículas en una caja	23
3.1. Función de Green en una caja	23
3.2. Descomposición espacial y espectral	28
3.2.1. Cálculo de las energías con el potencial de activación	29
3.3. Entropía de Shannon	32
3.4. Análisis dinámico de condiciones iniciales simétricas	33
4. Emulación de un demonio de Maxwell en un billar electromagnético	41
4.1. De las energías a las frecuencias	43
4.2. La función dieléctrica demoníaca como problema inverso	44
4.3. Realización de un demonio dinámico electromagnético con placas dieléctricas	48
4.3.1. Eigensistema del haz matricial	51
4.3.2. Función de onda en el tiempo	54
4.3.3. Resultados de la emulación	56
5. Corrientes neutras débiles, dispersión e^--nucleón y demonios cuánticos	65
5.1. Dispersión e^- -nucleón	66
5.2. Hamiltoniano con aproximación iconal	71
5.3. Función de Green 1D exacta	73

5.4. Potencial barrera 1D irreversible	75
Conclusiones	83
Referencias	85
A. Algunas identidades de sumas infinitas	95
B. Ejemplo de aplicación de un haz matricial a una ecuación diferencial parcial	97
C. Galería de gráficos de densidad en la cavidad EM	99
D. Galería de gráficos de reflexión y transmisión	107

Índice de figuras

2.1. Espacio fase de partícula libre en una caja	10
2.2. Potencial de activación	11
2.3. Evolución del espacio fase con potencial de activación	12
2.4. Flujo de Liouville	13
2.5. Contorno de Integración	18
3.1. Relación de dispersión del demonio	29
3.2. Evolución del demonio con $N = 124$, $\kappa_R = \pi/4$, $\Upsilon_0 = 1/10$ & $\beta = 1/100$	34
3.3. Evolución de un paquete de ondas tipo Boltzmann	36
3.4. Entropías dependientes de la temperatura	37
3.5. Evolución de un paquete de ondas isoespectral	38
3.6. Entropía de un paquete de ondas isoespectral	39
4.1. Cavity de microondas con resonador dieléctrico	41
4.2. Función dieléctrica demoníaca $\epsilon_r(x, \omega)$	45
4.3. Grosor efectivo de $\epsilon_r(x, \omega)$	46
4.4. Estabilidad de la ecuación diferencial del demoníaca	47
4.5. Cavity de microondas con resonador dieléctrico	49
4.6. Eigenvalores para una bicapa en una cavity de EM	58
4.7. Iteraciones para la convergencia asintótica de ω_n	58
4.8. Gráfico de densidad en cavity resonante a tiempos cortos	59
4.9. Función de onda en cavity resonante	60
4.10. Gráfico de densidad en cavity resonante en $0 < \tau < 150$	61
4.11. Gráfico de densidad en cavity resonante en $150 < \tau < 300$	62
4.12. Gráfico de densidad en cavity resonante en $0 < \tau < 450$	63
4.13. Gráficos de densidad en $0 < \tau < 450$ para el problema de eigenvalores (a) completo con cortina delgada ($b = 0.1$ mm) & (b) sin términos trascendentales con $b = 7.5$ mm	64
5.1. Dispersión e^- -nucleón	66
5.2. Sección eficaz diferencial $ f_{s's}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) ^2$	68
5.3. Potencial barrera 1D irreversible	77
5.4. Potencial barrera 1D irreversible (percepción)	82

C.1. Gráficos de densidad en $0 < \tau < 450$ variando b : (a) & (b)	100
C.1. Gráficos de densidad en $0 < \tau < 450$ variando b : (c) & (d)	101
C.1. Gráficos de densidad en $0 < \tau < 450$ variando b : (e) & (f)	102
C.2. Gráficos de densidad en $0 < \tau < 150$ variando $n.^o$ de modos y grosor: (a) – (d) . . .	103
C.2. Gráficos de densidad en $0 < \tau < 150$ variando $n.^o$ de modos y grosor: (e) – (h) . . .	104
C.2. Gráficos de densidad en $0 < \tau < 150$ variando $n.^o$ de modos y grosor: (i)	105
D.1. Potenciales reversibles, reflexión y transmisión: a) delta, b) escalón, c) barrera o pozo	109
D.2. Potencial irreversible, reflexión y transmisión en k_0/γ	110
D.3. Potencial irreversible, reflexión y transmisión en k_0/γ con $V_0/E = \pm 1/10$	111
D.4. Barrera y pozo de potencial reversibles con potencial irreversible $\gamma/\eta = 3/2$	112
D.4. Barrera y pozo de potencial reversibles con potencial irreversible $\gamma/\eta = 5/2$	113

Capítulo 1

Introducción

Desde el advenimiento de la mecánica cuántica, se han diseñado diversos experimentos con la intención de recrear las condiciones en las que los sistemas microscópicos evolucionan. Ejemplos prominentes son las redes ópticas [1, 2], sistemas ultra-fríos [3, 4], billares de microondas y cuánticos [5–8], emulaciones relativistas en sistemas análogos [9–15], circuitos plasmónicos [16] o superconductores en conexión con teoría de grafos [17], sólidos artificiales en general [18–22], teoría de bucles aplicados a cavidades electromagnéticas [23], grafos cuánticos en el diseño de metamateriales [24], y los haces nucleares, atómicos o moleculares para demostrar la difracción e interferencia cuántica [25, 26], incluidos los problemas irreversibles, por ejemplo, las resonancias y la desintegración nuclear [27]. Sin embargo, el preservar las características cuánticas de estas emulaciones puede ser técnicamente demandante y quizá costosa. En el terreno de las emulaciones estrictamente dinámicas se ha recurrido a diversos sistemas ondulatorios que exhiben propiedades detectadas en sistemas macroscópicos como lo son grafeno artificial en microondas [28, 29], oscilaciones de Bloch en barras elásticas [30, 31], y ondas de materia [32, 33] en condensados de Bose–Einstein [34–38].

En esta tesis se propone estudiar la irreversibilidad *à la* Maxwell desde un punto de vista dinámico involucrando un conjunto arbitrariamente grande de partículas independientes. Una realización dinámica con irreversibilidad abre la puerta a otros sistemas ondulatorios, ya sean de mecánica clásica o cuántica, ya que no implica el mecanismo de colapso de onda ante hipotéticas mediciones en el sistema. Por ello, debe ser posible implementar una interacción que dependa del momentum de la onda, es decir, de su componente de Fourier; y cabe mencionar que anteriormente se han utilizado potenciales dependientes del momentum para modelar dinámica nuclear molecular o incluso dinámica relativista [39–41]. Además, el demonio de Maxwell [42] entra en esta categoría de problemas, por lo que dicha irreversibilidad se denomina Maxwelliana. De esta forma se espera que un defecto puntual (e.g. barreras de potencial) que incorpore efectos no locales debería reproducir razonablemente la división clásica en dos compartimentos, además de los efectos de interferencia que se discutirán cuidadosamente. Es de esperar que este tratamiento pueda aplicarse a las cavidades electromagnéticas e incluso a las interacciones electrodébiles no-relativistas. Se dividirá en tres etapas:

- i) Caracterización de la dinámica ondulatoria de un demonio de Maxwell con entropía aparen-

temente decreciente a lo largo de la flecha del tiempo.

- ii) Construcción de un sistema de microondas que simule de manera idéntica la acción de un demonio de Maxwell sobre radiación clásica.
- iii) Análisis de un un potencial irreversible que simule un proceso de dispersión mediado por un corriente neutra débil que rompa paridad y reversión temporal.

Como resultado de este estudio será posible diseñar en términos muy generales un sistema físico capaz de refrigerar y ordenar radiación luminosa incidente;¹ y cabe mencionar que en el ámbito clásico termodinámico, un mecanismo típico de refrigeración es el tubo de Ranque-Hilsch (tubo vórtex) [45–47]. Además, se darán nuevas perspectivas sobre cómo se plantea y resuelve, dinámicamente, la aparente paradoja de Maxwell, de relevancia no sólo histórica, sino fundamental.

La organización de la tesis es la siguiente: En el capítulo 2 se introduce un potencial dependiente del momentum en un Hamiltoniano clásico que ejerce una irreversibilidad Maxwelliana sobre las partículas implicadas que luego se generaliza al ámbito de la mecánica cuántica. Posteriormente, se introduce el formalismo de las funciones de Green, obteniendo así una nueva expresión cerrada. En el capítulo 3 se presenta una emulación de un demonio de Maxwell en un billar electromagnético, utilizando condiciones iniciales simétricas para el análisis dinámico. Asimismo, en el capítulo 4 se estudia el diseño de un montaje experimental mediante cavidades; la cavidad conductora es un sistema físico que es capaz de enfriar y ordenar la radiación electromagnética incidente. Finalmente, en el capítulo 5 se estudia un proceso de dispersión e^- -nucleón mediado por Z^0 , el cual es interpretado como un demonio de Maxwell al crear una asimetría entre las probabilidades de dispersión frontal o retrodispersión dependiendo de signo del espín ($\mathfrak{su}(2)$ o $\mathfrak{su}(2)^*$) del electrón.

1.1. El demonio de Maxwell

En 1871 J.C. Maxwell envió una carta a P.G. Tait en donde mencionaba un experimento mental sobre una ente cuyas facultades harían que él pudiese seguir a cada molécula en su evolución, pero que podría violar la 2.^a ley de la termodinámica [42]. En 1874, W. Thomson, alias, Lord Kelvin, le dio la denominación de «demonio».² Posteriormente, L. Szilard propuso un modelo del demonio, que cualitativamente conectaba el trabajo termodinámico con la información, donde la esencia del papel de la medición y la retroalimentación es la misma [49]. Sin embargo, no quedó claro qué proceso compensaba realmente el exceso de trabajo, a lo que Brillouin en 1951 [50] respondió

¹ Si bien la realización experimental *per se* va más allá de los objetivos de la presente tesis, es bien conocido que los metamateriales pueden efectuar operaciones matemáticas, ver por ejemplo Silva et al. [43] o Zangeneh-Nejad and Fleury [44].

² Esta palabra, que originalmente en griego significaba un ser sobrenatural, nunca se ha usado correctamente para significar una personificación real o ideal de la malignidad. El «demonio» de C. Maxwell es una criatura de la imaginación con ciertos poderes de acción perfectamente definidos, de carácter puramente mecánico, inventado para asistir a la comprensión la «disipación de la energía» en la naturaleza [48].

considerando que el coste energético del proceso de medición compensa el exceso de trabajo,³ por lo que no se puede extraer trabajo del modelo de Szilard. Desde entonces, se ha discutido la validez de la 2.^a ley de la termodinámica en términos del demonio de Maxwell [51–62].

En la versión original del demonio, se tiene un gas ideal en una caja que es separado, adiabáticamente, de su entorno. En el estado inicial, el gas está en equilibrio térmico a una temperatura T . Ahora se inserta una barrera en el centro de la caja, en donde existe una pequeña puerta que tiene la capacidad de medir la velocidad de cada molécula en el gas, y se abre o cierra dependiendo de la medición que obtiene. Por ejemplo, si una molécula, cuya velocidad es mayor a la de referencia, viene de izquierda a derecha, se abre la puerta; asimismo, si una molécula, cuya velocidad es menor a la de referencia, viene de derecha a izquierda, también se abre la puerta; mientras que en cualquier otro caso, la puerta se cierra. Repitiendo este proceso una y otra vez, el gas en la parte izquierda gradualmente se enfría (respecto a la condición inicial), mientras que el gas en la parte derecha se calienta. Después de todo, el demonio es capaz de crear la diferencia de temperatura (adiabáticamente) empezando desde una temperatura inicial uniforme. En otras palabras, la entropía del gas va disminuyendo conforme el demonio actúa a pesar de que la caja está adiabáticamente separada del exterior. Esta aparente contradicción a la 2.^a ley de la termodinámica es conocida como la paradoja del demonio de Maxwell. El punto importante del experimento mental, es que el demonio puede realizar mediciones al nivel molécula por molécula, y puede controlar la puerta según la medición obtenida (i.e. la velocidad de la molécula es mayor o menor que una de referencia), lo cual implica que el demonio puede realizar un trazado de las fluctuaciones térmicas.

1.2. Planteamiento del problema

El demonio de Maxwell es una construcción teórica que ha desempeñado un papel importante en la historia de la física, especialmente en termodinámica y la teoría de la información. Esta entidad ha sido testigo de los esfuerzos de los científicos con su comportamiento paradójico desde su aparición en 1867 como parte de un *Gedankenexperiment* que discutía las limitaciones de la segunda ley de la termodinámica. El demonio de Maxwell no ha sido emulado dinámicamente hasta ahora en el ámbito cuántico; en cambio, se han visto tratamientos informativos que —en general— se basan en mediciones y retroalimentación [63–67] en varios tipos de arreglos, tales como arreglos fotónicos [68, 69], átomos ultrafríos [70], circuitos cuánticos superconductores [71], cavidades QED [72], puntos cuánticos [73] y circuitos electrónicos [74, 75]. Los puntos técnicos a tratar en la solución a este problema consisten en la formulación del demonio de Maxwell en un contexto Hamiltoniano. Para ello se empieza suponiendo una partícula que se encuentra en una caja, la cual se divide por el medio con un potencial altamente localizado que puede o no —dependiendo del signo y magnitud del momentum— dejar pasar la partícula hacia el otro lado de la caja. Posteriormente, al introducir el demonio al dominio cuántico, es necesario asegurarse de que el potencial demoníaco

³ Esto es, para distinguir el fotón de prueba de los fotones de fondo, la energía del fotón de prueba debe ser mucho mayor que la de los fotones de fondo, lo que significa que el coste energético requerido para la medición debe ser mayor que el exceso de trabajo.

sea hermitiano. Cabe resaltar que a pesar de ser un sistema que evoluciona en el tiempo, no se introducirán mediciones intrusivas.

Se resolverá el sistema dinámico planteado usando diversas técnicas analíticas y numéricas. Para el caso analítico se obtendrá en forma cerrada una función de Green dependiente de la energía, proporcionando así una solución analítica a la dispersión y a la evolución dependiente del tiempo. Hay que tener en cuenta que dicha función tendrá la simetría de intercambio rota (i.e. $G(x, x') \neq G(x', x)$), como es de esperar para un sistema con irreversibilidad Maxwelliana, o dicho de otro modo, la ruptura de la invariancia de inversión temporal. Cabe destacar que tales funciones son escasas en la literatura [76, 77], por lo que este tipo de sistemas dan lugar a nuevas funciones de Green. Para el caso numérico se necesita una base discreta para emular el demonio de Maxwell, esto da lugar a un uso sistemático de la discretización de la ecuación diferencial correspondiente. Nótese que dicho tratamiento es equivalente a un modelo de amarre fuerte en un cristal, lo que sugiere utilizar la primera zona de Brillouin, especialmente para valores donde la energía tiene un comportamiento parabólico. Además se revisarán los conceptos de entropía de von-Neumann, entropía de Shannon y la formulación clásica de Boltzmann. El problema de este proyecto conduce a la emulación de la ecuación de Schrödinger en cavidades electromagnéticas en el espíritu de Stöckmann [78] y otros trabajos como Bittner et al. [79], Dietz et al. [80], Dietz and Richter [81]; esto es, mediante una cavidad de microondas con el fin de separar radiación en dos regiones a diferentes temperaturas a través de un proceso de ordenamiento. Por otro lado, los experimentos en colisionadores en búsqueda de corrientes neutrales débiles son bien conocidos (ver por ejemplo [82–86]), sin embargo éstos se basan en la estadística sobre las secciones eficaces asimétricas —esto es, sólo se puede afirmar que hay un demonio de Maxwell operando en una caja negra— por lo que plantear un experimento que pueda mapear funciones de onda en el tiempo requeriría ambientes criogénicos muy bien controlados, como trampas de iones o cavidades QED.

1.3. Irreversibilidad à la Lindblad versus Maxwell

La evolución de sistemas abiertos no es unitaria en general, salvo que se suponga un «sistema global cerrado» compuesto de un subsistema S que interactúa con un subentorno E, donde las interacciones $S \leftrightarrow E$ correlacionan los estados, generando interferencias en el sistema (decoherencia) y destruyendo así los estados entrelazados. En particular, para dicho *sistema global* se tiene el Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_T = \mathcal{H}_S \otimes \mathbb{I}_E + \mathbb{I}_S \otimes \mathcal{H}_E + \mathcal{H}_I, \quad (1.1)$$

donde \mathcal{H}_S & \mathcal{H}_E son los Hamiltonianos locales de cada parte del sistema, \mathcal{H}_I es la interacción que opera sobre el espacio de Hilbert total $\mathcal{H}_T = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$, e \mathbb{I} es la matriz identidad en su respectivo espacio de Hilbert. Dicho *sistema global* está completamente descrito por su matriz de densidad

$$\hat{\rho} \equiv \sum_n w_n \rho^{(n)}, \quad \text{donde cada estado } \rho^{(n)} = |\alpha^{(n)}\rangle \langle \alpha^{(n)}| \quad (1.2)$$

tiene una probabilidad w_n asociada, y descartando los grados de libertad del entorno, la dinámica reducida del sistema es

$$\hat{\rho}_S(t) = \text{tr}_E[\hat{U}(t)\hat{\rho}_{SE}(t_0)\hat{U}(t)^\dagger], \quad \text{con} \quad \hat{U}(t) = \exp[-it(\mathcal{H}_S + \mathcal{H}_E + \mathcal{H}_I)] \quad (1.3)$$

y la matriz de densidad $\hat{\rho}_{SE}(t_0) = \hat{\rho}_S(t_0) \otimes \hat{\rho}_E(t_0)$ hace referencia a que S & E están inicialmente sin correlación.⁴ De esta forma, la ec. de von–Neumann [87, 88] para el subsistema S es

$$i\partial_t \hat{\rho}_S(t) = \text{tr}_E[\mathcal{H}_S + \mathcal{H}_E + \mathcal{H}_I, \hat{\rho}_{SE}], \quad (1.4)$$

la cual suele ser intratable en la mayoría de los casos, salvo que se empleen las siguientes suposiciones [89, 90]:

- Aproximación de Born, supone un acoplamiento débil entre S y E, por lo que E no cambia significativamente en la evolución.
- Aproximación de Markov, el tiempo de decoherencia en E es mucho menor que la escala de tiempo de S, por lo que las excitaciones de E causadas por S decaen rápidamente, o dicho de otro modo, el entorno pierde las excitaciones y no puede regresarlas al sistema (no tiene memoria).
- La interacción debe ser escrita como una suma de productos de operadores, a saber, $\mathcal{H}_I = \sum_k A_k^{(S)} \otimes A_k^{(E)}$, donde A_k son un conjunto de operadores de S ó E, según corresponda.
- Aproximación de fase estacionaria u onda rotante, la escala de tiempo en la evolución de S es pequeña en comparación con el tiempo de relajación del sistema global, sin embargo esta suposición es puesta en jaque al ser dependiente del observador (relatividad especial).

En consecuencia, se obtiene una ecuación maestra Markoviana en forma de Lindblad [91], donde un Hamiltoniano \mathcal{H} genera la parte unitaria de la evolución, mientras el Lindbladiano $\mathcal{L}^{(\text{lind.})}[\hat{\rho}]$ representa una fuente o un sumidero de energía, a saber

$$i\partial_t \hat{\rho} = [\mathcal{H}, \hat{\rho}] + \mathcal{L}^{(\text{lind.})}[\hat{\rho}], \quad \text{con} \quad \mathcal{L}^{(\text{lind.})}[\hat{\rho}] = i \sum_k c_k \left(A_k \hat{\rho} A_k^\dagger - \frac{1}{2} \{A_k^\dagger A_k, \hat{\rho}\} \right), \quad (1.5)$$

donde c_k son las constantes de acoplamiento y los operadores «de salto» A_k llevan la información sobre qué procesos induce E sobre S. Así mismo, de las características más relevantes de $\mathcal{L}^{(\text{lind.})}$ resalta que: a) el principio de superposición se resguarda al ser lineal, b) el operador de densidad es autoadjunto en la evolución, c) la matriz de densidad se mantiene semipositiva definida y su traza es invariante, d) si los operadores de salto conmutan con el Hamiltoniano del sistema la energía se conserva, mientras que son Hermitianos, la entropía de von–Neumann no disminuye [92].

⁴ Un sistema bipartito se puede clasificar en «Simplemente Separable» si $\hat{\rho}_{SE} = \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_E$, «Separable» si $\hat{\rho}_{SE} = \sum_k w_k \hat{\rho}_k^{(S)} \otimes \hat{\rho}_k^{(E)}$, donde $\hat{\rho}_k^{(S)}$ es un conjunto completo de proyectores ortogonales en S, y «Entrelazado» si $\hat{\rho}_{SE}$ es no-separable. Mientras que los sistemas clásicamente correlacionados evolucionan como mapas completamente positivos, los sistemas cuánticamente correlacionados no cumplen esta propiedad.

Nótese que los sistemas cuánticos abiertos al estilo Lindblad son una forma de irreversibilidad, donde la entropía de von–Neumann es la importante. Anteriormente se estudiaron tales sistemas introduciendo relatividad especial [93]. Para empezar, nótese que el Hamiltoniano de Dirac *per se* —escrito en términos de productos directos— muestra que tiene subespacios interactuantes, por lo que el espín rota (precesión de Thomas) [94], a saber⁵

$$\mathcal{H}_D \doteq \sum_{k=1}^3 p_k \sigma_1 \otimes \sigma_k + m \sigma_3 \otimes \mathbb{I}_2, \quad (1.6)$$

donde p_k & σ_k son el momento y la matriz de Pauli en la dirección k , respectivamente, y m la masa. Con esto en mente, se puede plantear la ec. de Dirac —incluyendo un cuadripotencial $A^\mu = (\phi/c, \mathbf{A}) = (A^\mu)^\dagger$ — para el operador de densidad covariante⁶ $\bar{\rho} = \rho \gamma^0$ y su hermitiano conjugado como

$$\left(\gamma^\mu p_\mu - q \gamma^\mu A_\mu - mc \right) \bar{\rho} = 0, \quad \& \quad \bar{\rho}^\dagger \left(-p^\mu \gamma_\mu - q A_\mu^\dagger (\gamma^\mu)^\dagger - mc \right) = 0, \quad (1.7a)$$

donde

$$\gamma^\mu = (\gamma^0, \boldsymbol{\gamma}) \quad \text{que cumple} \quad \{ \gamma^\mu, \gamma^\nu \} = 2g^{\mu\nu} \mathbb{I}. \quad (1.7b)$$

Además, si el tensor métrico $g^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$, entonces

$$\gamma_\mu = (\gamma^0, -\boldsymbol{\gamma}) = (\gamma^\mu)^\dagger, \quad (\gamma^0)^2 = \mathbb{I}, \quad (\gamma^k)^2 = -\mathbb{I}, \quad (1.7c)$$

y el producto escalar $\gamma_\mu p^\mu = g_{\mu\nu} \gamma^\mu p^\nu = \gamma^0 p^0 - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p}$. Asimismo, el cuadrimento es

$$p^\mu = (p_0, \mathbf{p}) = -p_\mu^\dagger \quad \text{que en términos de la derivada} \quad i\hbar \partial^\mu = i\hbar (\partial_{ct}, -\nabla), \quad (1.7d)$$

donde la convención del operador antihermitiano p_0 sobre un ket–bra es que sólo actúa en el objeto inmediato posterior, i.e. $p_0 |\Psi\rangle \langle \Psi| \equiv \left(i \partial_{ct} |\Psi\rangle \right) \langle \Psi|$.

Al restar las ecuaciones en (1.7a) y multiplicar por ambos lados por γ^0 se obtiene la ec. de von–Neumann, por lo que se procede a agregar un disipador covariante en analogía con (1.5), surgiendo dos posibles tipos de ensambles:

- a)** Universales: El Lindbladiano covariante debe ser de la forma $\mathcal{L}^{(\text{univ.})}[\bar{\rho}] = \mathcal{F} \bar{\rho} - \bar{\rho}^\dagger \mathcal{F}^\dagger$, por lo que (1.7a) se transforma en

$$\mathcal{D} \bar{\rho} = \mathcal{F} \bar{\rho} \quad \& \quad \bar{\rho}^\dagger \mathcal{D}^\dagger = \bar{\rho}^\dagger \mathcal{F}^\dagger, \quad \text{con} \quad \mathcal{D} = \gamma^\mu p_\mu - q \gamma^\mu A_\mu - mc. \quad (1.8)$$

La eliminación de los términos del tipo $\bar{A}_k \bar{\rho} \bar{B}_k$ asegura la covarianza de Lorentz, sin embargo, la matriz de densidad ya no será necesariamente semi-positiva definida, lo cual es de esperar al tratarse de un sistema cuánticamente correlacionado.

⁵ Esta representación en particular es para el espinor de Dirac, para el espinor de Majorana ver por ejemplo [95].

⁶ La notación del tipo $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ se denomina «adjunta de Dirac» y es requerida para respetar la simetría de Lorentz.

- b)** Restringidos: Se descompone el operador de densidad covariante en un conjunto de vectores $\{v_n\}$ no necesariamente ortogonal, e.g. $\bar{\rho}(t) = \sum_n w_n v_n(t) v_n^\dagger(t) \gamma^0$, y se propone un disipador general de la forma

$$\mathcal{L}^{(\text{res.})}[\bar{\rho}] = i \sum_k \left(\bar{A}_k \bar{\rho} + \bar{\rho} \bar{B}_k + \bar{C}_k \bar{\rho} \bar{D}_k \right), \quad (1.9)$$

(la barra sobre los operadores denota la *adjunta de Dirac*) por lo que se obtiene una ec. cuadrática para v_n , a saber

$$\sum_n w_n \left\{ \left[\mathcal{D}v_n(t) \right] v_n^\dagger(t) \gamma^0 - i \sum_k \left(\left[\bar{A}_k v_n(t) \right] v_n^\dagger(t) \gamma^0 + v_n(t) \left[v_n^\dagger(t) \gamma^0 \bar{B}_k \right] + \left[\bar{C}_k v_n(t) \right] \left[v_n^\dagger(t) \gamma^0 \bar{D}_k \right] \right) \right\} = 0. \quad (1.10)$$

Entonces, si los $\{v_n\}$ resuelven (1.10), se tiene un ensamble restringido de Dirac.

Dichos ensambles universales permiten proponer disipadores anti-hermíticos como

$$\mathcal{L}^{(\text{I})}[\hat{\rho}] = \frac{1}{2} \{ \sigma_3 \mathcal{A}, \hat{\rho} \} - \text{h.c.}, \quad \text{o bien} \quad \mathcal{L}^{(\text{II})}[\hat{\rho}] = \sigma_3 \left(a_0 + \vec{a} \cdot \vec{\tau} \right) \hat{\rho} - \text{h.c.}, \quad (1.11)$$

donde σ_k & τ_k describen el espín y el isoespín, respectivamente, \vec{a} es un vector de constantes de acoplamiento, y $\mathcal{A} = a_3 \sigma_3 - a_+ \sigma_+ - a_- \sigma_-$ representa al cuadripotencial. De esta forma se pueden estudiar —por ejemplo— las asimetrías en las poblaciones de materia-antimateria ($\mathcal{L}^{(\text{I})}$) o las oscilaciones de neutrinos ($\mathcal{L}^{(\text{II})}$).

En resumen, la irreversibilidad Lindbladiana tiene algunas diferencias importantes respecto a la construcción de Maxwell:

- i)** No genera una transformación unitaria —mientras que en la construcción de Maxwell, no hay pérdidas—.
- ii)** No rompe de forma explícita la paridad o alguna otra simetría a nivel Hamiltoniano.
- iii)** En general no se dan las condiciones para el teorema de Noether, al ser un sistema abierto —no hay generadores de simetría de Lorentz que se conserven a menos que se trate con un sistema global interactuante que incluya al entorno—.
- iv)** Los sistemas abiertos tipo Kosakowski-Sudarshan, utilizados ampliamente en modelos de irreversibilidad —y la decoherencia asociada a ésta—, quedan en vilo para describir cómo se viola la segunda ley de la termodinámica microscópicamente; ya que al final, dicha ley es de naturaleza estadística y en condiciones alrededor del equilibrio —hipótesis que no se da en los sistemas de interés—.
- v)** El uso de una entropía independiente de base (von-Neumann) en la irreversibilidad *à la* Lindblad permite medir el desorden —entendido como qué tanto se dispersa un ensamble en el espacio de Hilbert— a partir de trazas de la matriz de densidad, asimismo se pueden definir cantidades como la pureza ($\Gamma = \text{tr}[\hat{\rho}^2]$) que es una medida de cuánto se ha mezclado

un estado cuántico. No obstante, la irreversibilidad y la aparición de orden en sistemas tipo Maxwell **no** se pueden medir con dicha entropía en forma de traza, ya que siempre preservan pureza o entropía von-Neumann.

Capítulo 2

Irreversibilidad *à la* Maxwell con interacción localizada

El contexto clásico de la construcción de Maxwell, se emplea el cambio del signo del tiempo a partir de la inversión en la dirección de las velocidades de las partículas que conforman el sistema físico. Dicha inversión de signos se efectúa selectivamente dependiendo de una energía de referencia que es proporcional al cuadrado del momentum de referencia ($E_R \propto P_R^2$) de las partículas, las cuales son de la misma especie. Esto implica el uso de un potencial que dependa de la velocidad, pero el efecto logrado es el mismo a sabiendas que el momentum de una partícula es impar bajo reversión temporal. Además, el momentum es proporcional a la velocidad de éstas ($p \propto v$) en el régimen en el que las partículas se desplazan libremente en una caja —sin colisiones entre ellas—, justificando que la interacción con un demonio hipotético sea dependiente del momentum. Finalmente, el agente externo llamado demonio de Maxwell, se localiza en algún lugar del espacio, e.g. $x = 0$, con lo que la interacción externa depende también de la posición.

Como hipótesis adicional —y en completo acuerdo con la formulación de Maxwell— las partículas se consideran independientes, por lo que la acción del demonio es separable por partícula hasta dar una formulación Hamiltoniana de partícula individual. En el contexto clásico, el comportamiento total se logra a través de un ensamble de sistemas idénticos, mientras que en el contexto cuántico basta analizar el comportamiento de la función de onda en el tiempo para una sola partícula con los mismos efectos.

El Hamiltoniano de una partícula dentro de una caja de ancho $2x_L$ es simplemente

$$H = \frac{p^2}{2m}, \quad (2.1)$$

y dada una condición inicial (x_0, p_0) ó (x_1, p_1) se tiene el espacio fase en la fig. 2.1. Nótese que al evolucionar el sistema se tiene el mapeo lineal [96]

$$\begin{pmatrix} x' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

No obstante, el demonio de Maxwell introduce un mapeo no-lineal a través del signo del momentum

p , i.e.

$$\begin{pmatrix} x' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \text{sgn}(p) t \\ 0 & \text{sgn}(p) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

produciendo un ordenamiento de la evolución en los dos compartimentos. Cabe señalar que al doblar el espacio fase por el eje x , se puede conectar los puntos de retorno (ξ, η) , quedando una topología de la forma

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b|p|} = 1, \quad a, b > 0. \quad (2.4)$$

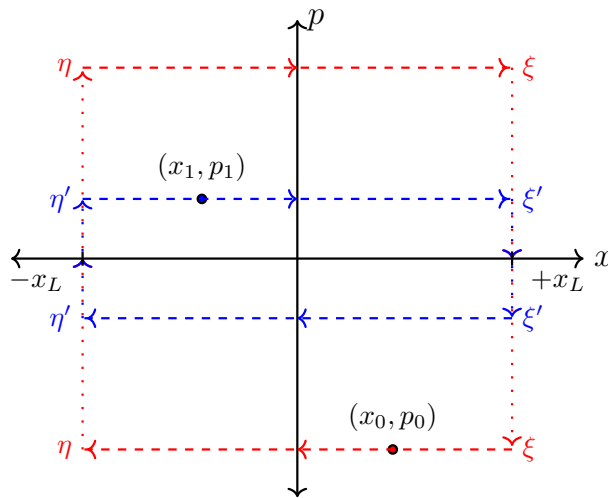


Figura 2.1: Evolución de la partícula libre en una caja de ancho $2x_L$. Los puntos ξ, η son puntos de retorno donde la partícula rebota contra la pared y cambia el signo de su momentum.

2.1. Partícula con potencial de activación

Como se mencionó anteriormente, el potencial de interacción demoníaco V_{int} debe depender del momentum y estar altamente localizado en $x = 0$ con intensidad V_0 , de esta forma se tiene ahora el Hamiltoniano

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_{\text{int}}(x, p), \quad \text{donde} \quad V_{\text{int}}(x, p) = V_0 \delta(x) V_{\text{act}}(p). \quad (2.5a)$$

Mientras que $\delta(x)$ detecta la posición de las partículas, la función de activación $V_{\text{act}}(p)$ determina si las partículas permanecen en un lado del contenedor o pasan al otro lado según un momentum

de referencia¹ P_R

$$V_{\text{act}}(p) = f_-(|p|) \text{sgn}(p) + f_+(|p|) = \begin{cases} 0 & \text{si } -\infty < p \leq -P_{\text{UV}} \\ 1 & \text{si } -P_{\text{UV}} < p \leq -P_R \\ 0 & \text{si } -P_R < p \leq 0 \\ 1 & \text{si } 0 < p \leq P_R \\ 0 & \text{si } P_R < p < \infty \end{cases} \quad (2.5b)$$

donde

$$2f_{\pm}(|p|) = \Theta(P_R - |p|) \pm \Theta(-P_R + |p|) \mp \Theta(-P_{\text{UV}} + |p|), \quad (2.5c)$$

y P_{UV} es un corte ultravioleta en vista de que los materiales (dieléctricos) operan en rangos de frecuencias específicos. La gráfica de este potencial se encuentra en la fig. 2.2. La acción de este

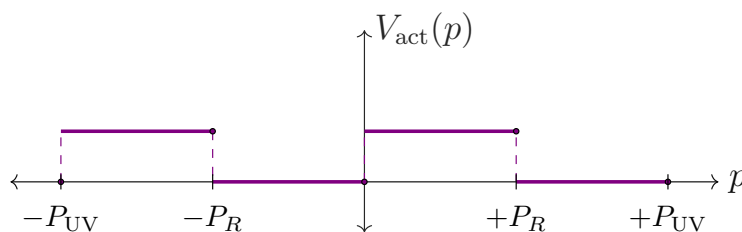


Figura 2.2: Potencial de activación definido en (2.5b).

potencial de interacción se aprecia en la evolución en el espacio fase en la fig. 2.3a donde se muestran dos partículas, ρ_1 empieza en el primer cuadrante con momentum positivo menor a P_R y sigue la trayectoria azul, mientras que ρ_2 empieza en el tercer cuadrante con momentum negativo mayor a P_R y sigue la trayectoria roja. Generalizando a un ensamble en la fig. 2.3b, ρ_1 representa una colección de partículas independientes en el primer cuadrante con momentum positivo menor a P_R , por lo que al evolucionar el sistema se llenará el espacio fase correspondiente al intervalo $-x_L < x < 0$ y $|p| < |P_R|$, mientras que ρ_2 representa una colección de partículas independientes en el tercer cuadrante con momentum negativo mayor a P_R , por lo que al evolucionar el sistema se llenará el espacio fase correspondiente al intervalo $0 < x < x_L$ y $|p| > |P_R|$. Cabe mencionar que tras el proceso de selección el sistema alcanza un equilibrio en el que cada compartimento posee temperaturas T tales que

$$T_2(|p| > |P_R|) > T_1(|p| < |P_R|),$$

por lo que $V_{\text{act}}(p)$ separa efectivamente las partículas en dos zonas bien diferenciadas según su momentum.² Este tipo de movimiento da lugar al flujo tipo uróboros en la fig. 2.4. Si bien el punto de intersección no es diferenciable, la dinámica respeta la 2.^a ley de Newton. Para visualizarlo

¹ Según esta definición, para el caso $p = P_R$, las partículas quedan atrapadas del lado de la caja donde inició su movimiento, evitando así que las partículas con ese momentum en particular queden rebotando indefinidamente entre ambos lados.

² Este formalismo no debe confundirse con los trinquetes cuánticos (ver por ejemplo [97, 98]), ya que carece de términos ajustables dependientes del tiempo.

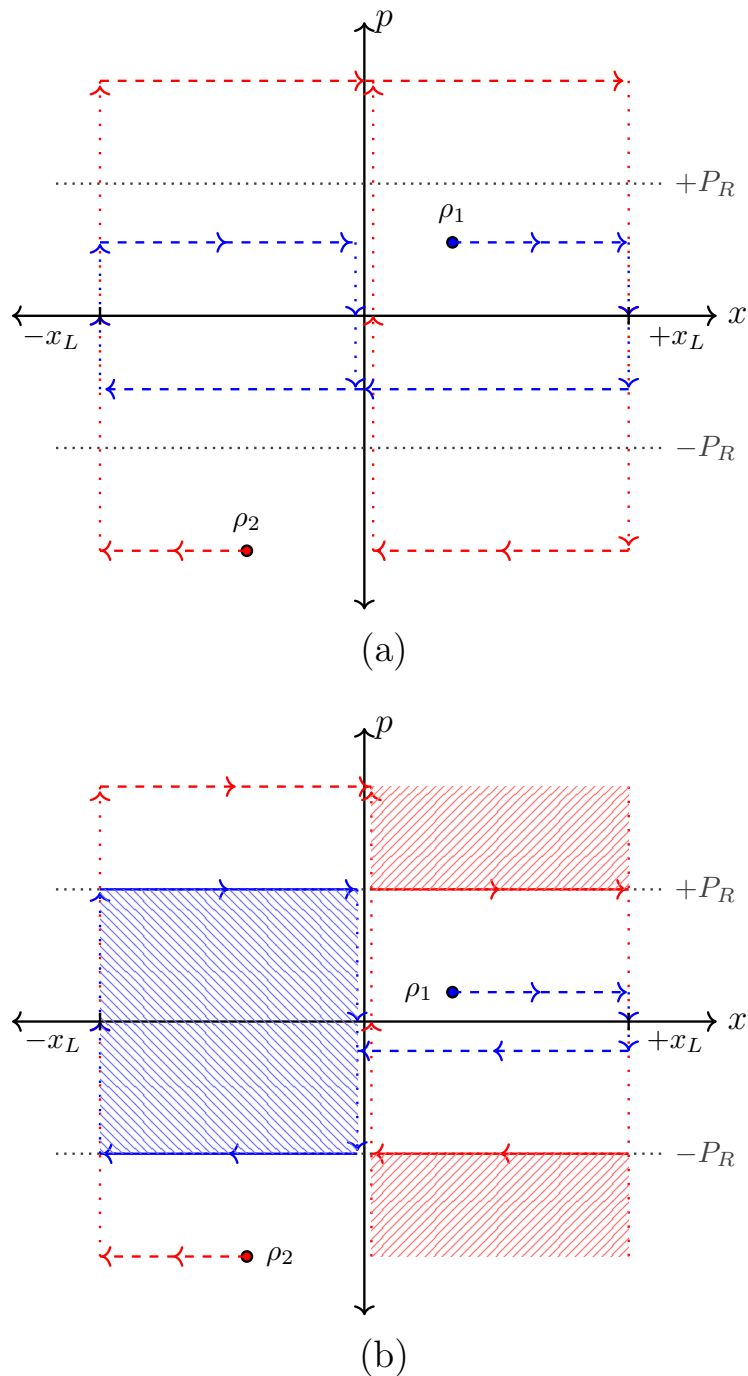


Figura 2.3: Evolución del espacio fase de a) dos partículas y b) dos ensambles de partículas, con la condición de que la(s) partícula(s) ρ_1 satisfaga(n) $|p| < |P_R|$, y la(s) partícula(s) ρ_2 satisfaga(n) $|p| > |P_R|$. El potencial de activación separa las partículas según el momentum de referencia, quedando dos zonas muy bien diferenciadas. Dado el comportamiento del sistema, las temperaturas finales serán tales que $T_1 < T_2$.

supóngase una manguera intersecándose a sí misma, cuidando que la unión del segmento recto sea tangente al círculo; posteriormente mándese una canica hacia el interior por medio del segmento recto hasta que ingrese al circuito cerrado. Nótese que en la bifurcación sólo hay una opción de movimiento siempre que se siga la línea tangente y el sentido del movimiento. Ahora al revertir el movimiento, siguiendo estrictamente la ley de velocidades tangentes al círculo —y en total acuerdo con un flujo Hamiltoniano o Liouvilliano— surgen las siguientes interrogantes: ¿Puede volver a salir la canica del circuito? De ser así ¿en cuántas vueltas en reversa lo logra? ¿Olvidó el sistema cuántas vueltas dió en su interior? Y si se borró la memoria ¿es reversible este proceso?

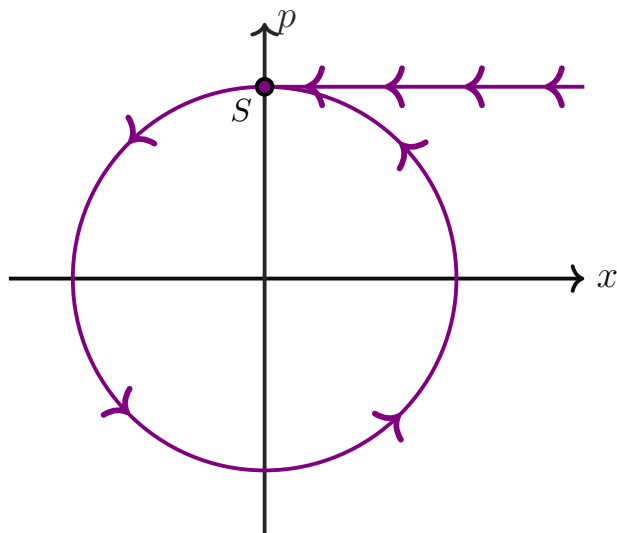


Figura 2.4: Dinámica en el espacio fase en donde existe un punto singular S en la trayectoria sobre el cual no se puede establecer una condición inicial, sin embargo, el flujo de Liouville es válido.

2.1.1. Generalización cuántica

Al introducir un potencial en el Hamiltoniano que dependa del momentum en mecánica cuántica es necesario preservar la hermiticidad de la ecuación de Schrödinger. Para ello, primero se promueve $V_{\text{int}}(x, p)$ en (2.5a) a un operador, i.e.

$$V_{\text{int}}(x, p) \mapsto \hat{V}_{\text{int}}(\hat{x}, \hat{p}) \equiv V_0 \delta(\hat{x}) V_{\text{act}}(\hat{p}), \quad (2.6)$$

que debe simetrizarse como

$$\hat{V}_{\text{int}} \mapsto \frac{1}{2}(\hat{V}_{\text{int}} + \hat{V}_{\text{int}}^\dagger) \quad (2.7)$$

para obtener un operador Hermitiano.³

³ Nótese que la acción de $\hat{V}_{\text{act}}(\hat{p})$ sobre una base completa de ondas planas es $\hat{V}_{\text{act}}(\hat{p}) \exp(ikx) = V_{\text{act}}(\hbar k) \exp(ikx)$, donde $V_{\text{act}}(\hbar k)$ es sólo un número especificado por (2.5b).

Proposición (Ec. de Schrödinger con \hat{V}_{int}). *La simetrización promueve la ecuación de Schrödinger a*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x,t) + \frac{V_{\text{int}}(x, -i\hbar\nabla) + V_{\text{int}}^\dagger(x, -i\hbar\nabla)}{2}\Psi(x,t) = i\hbar\partial_t\Psi(x,t), \quad (2.8a)$$

donde el producto interno de $|x\rangle$ con $\hat{V}|\Psi\rangle$ es

$$\langle x|V_{\text{act}}(\hat{p})\delta(\hat{x})|\Psi\rangle = \frac{V_0}{2i\pi x} \left(2\cos(P_R x/\hbar) - 1 - e^{-iP_{UV}x/\hbar} \right) \Psi(0) \quad (2.8b)$$

y

$$\langle x|\delta(\hat{x})V_{\text{act}}(\hat{p})|\Psi\rangle = \frac{V_0\delta(x)}{2i\pi} \int dx' \frac{1}{x'} \left(1 + e^{iP_{UV}x'/\hbar} - 2\cos(P_R x'/\hbar) \right) \Psi(x'). \quad (2.8c)$$

Demostración (Ec. de Schrödinger con \hat{V}_{int}). *Insertando conjuntos completos en x y p , y utilizando las ondas planas*

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right),$$

se tiene que

$$\begin{aligned} \langle x|V_{\text{act}}(\hat{p})\delta(\hat{x})|\Psi\rangle &= \int dx' \int dp \langle x|V_{\text{act}}(\hat{p})|p\rangle \langle p|x'\rangle \langle x'|\delta(\hat{x})|\Psi\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx' \int dp V_{\text{act}}(p) e^{ip(x-x')/\hbar} \delta(x') \Psi(x') \\ &\stackrel{(2.5b)}{=} \frac{V_0}{2\pi\hbar} \left(\int_{-P_{UV}}^{-P_R} + \int_0^{P_R} \right) dp e^{ipx/\hbar} \Psi(0) \end{aligned}$$

y al realizar la integral sobrante se llega al resultado. Procediendo similarmente con el otro término,

$$\begin{aligned} \langle x|\delta(\hat{x})V_{\text{act}}(\hat{p})|\Psi\rangle &= \int dx' \int dp \langle x|\delta(\hat{x})|p\rangle \langle p|V_{\text{act}}(\hat{p})|x'\rangle \langle x'|\Psi\rangle \\ &= \frac{\delta(x)}{2\pi\hbar} \int dx' \int dp V_{\text{act}}(p) e^{-ip(x'-x)/\hbar} \Psi(x') \\ &\stackrel{(2.5b)}{=} \frac{V_0\delta(x)}{2\pi\hbar} \int dx' \left(\int_{-P_{UV}}^{-P_R} + \int_0^{P_R} \right) dp e^{-ipx'/\hbar} \Psi(x') \end{aligned}$$

donde a diferencia del caso anterior, la integral en x no se podrá evaluar. Nota: Para realizar las integrales con $P_{UV} \rightarrow \infty$, se regulariza la integral de la forma $V(p) \mapsto V(p) \exp(-i\epsilon px)$ en el límite cuando $\epsilon \rightarrow 0$. ■

El objetivo es resolver (2.8) utilizando funciones de Green dependientes de la energía. Asimismo, la última expresión de (2.8) reduce la no-localidad del demonio, lo cual es de esperar al tratarse de un potencial que depende del momentum. Cabe mencionar que las eigenfunciones no son necesarias para obtener la descomposición espectral en forma cerrada. Las técnicas de solución para esta función de Green consisten en

- Método Analítico. Evaluación analítica de la serie Born–Oppenheimer en todos sus términos. Donde se arrojan coeficientes dependientes de la energía a todos los posibles órdenes.

- Métodos Numéricos. Se emplean métodos de diagonalización de matrices de gran tamaño para la obtención de la descomposición espectral a través de eigenvectores y eigenvalores del sistema de interés.
- Simulación Numérica de la Dinámica. Dada la función de Green dependiente de la energía basta analizar la estructura de polos de dicha expresión para recuperar la dependencia armónica en el tiempo a través de la semi-transformada de Fourier de una función meromorfa conocida. (A este método también se le puede asociar una transformada de Mellin.)

Siguiendo la esencia de Grosche and Steiner [76] y Moshinsky et al. [99] sería posible encontrar la función de Green para el problema en cuestión de forma analítica exacta. Y de esta forma relucir los nuevos polos creados en la función de Green.

2.2. Función de Green

El análisis que se llevará a cabo en este trabajo descansa en la utilización de una función G_{Demonio} que resuelva el siguiente problema

$$(H + V(x, p) - E)G_{\text{Demonio}} = \delta(x - x'), \quad (2.9)$$

donde $V(x, p)$ está dado por la interacción demoníaca en (2.8). Cabe recordar que una partícula con un potencial $\delta(x)$ da lugar a una ecuación con una fuente similar a la ecuación de Lippmann–Schwinger. Esto permite una solución exacta para la función de Green dependiente de la energía evaluando las integrales correspondientes en el primer término de la serie de Born. Nótese, sin embargo, que cuando el potencial se ve afectado por una función de activación dependiente del momentum —por tanto, irreversible— la integral es similar pero autocontenida en las expresiones, por lo que se debe resolver de forma autoconsistente los valores de la función.

2.2.1. Un teorema sobre las funciones de Green no-simétricas

Se sabe que las funciones de Green no son siempre simétricas, los casos en los que se recupera la simetría espacial corresponden a hamiltonianos reales y a la reversibilidad temporal. Para ver esto, se tiene el siguiente teorema elemental:

Teorema. Sea $\hat{G}^{(\pm)}$ una solución de $(\hat{H} - E)\hat{G}^{(\pm)} = \mathbb{I}$ y $\hat{G}^{(\pm)}(\hat{H} - E) = \mathbb{I}$, donde \hat{H} es hermitiano y $\hat{G}^{(\pm)}$ en la base de posición es $\langle x|\hat{G}^{(\pm)}|x'\rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \langle x|\frac{1}{\hat{H} - E \mp i\varepsilon}|x'\rangle = G^{(\pm)}(x, x'; E)$. Entonces $(G^{(\pm)}(x, x'; E))^* = G^{(\mp)}(x', x; E)$.

Demostración. En la base de posición, $\hat{G}^{(\pm)}$ debe cumplir

$$(H(x, -i\partial_x) - E)G^{(\pm)}(x, x'; E) = \delta(x - x') \quad (2.10a)$$

y

$$(H^*(x', -i\partial_{x'}) - E)G^{(\pm)}(x, x'; E) = \delta(x - x'). \quad (2.10b)$$

Tomando un hamiltoniano tal que $H = H^\dagger$, se sigue que

$$\hat{G}^{(\pm)\dagger} = \hat{G}^{(\mp)}, \quad (2.10c)$$

o, expresado en la base de la posición

$$\langle x | \hat{G}^{(\pm)\dagger} | x' \rangle = \langle x | \hat{G}^{(\mp)} | x' \rangle. \quad (2.10d)$$

Obsérvese que el lado izquierdo se convierte en

$$\langle x | \hat{G}^{(\pm)\dagger} | x' \rangle = (\langle x' | \hat{G}^{(\pm)} | x \rangle)^* \quad (2.10e)$$

después de tomar la transpuesta conjugada. En consecuencia,

$$\left(G^{(\pm)}(x', x; E) \right)^* = G^{(\mp)}(x, x'; E). \quad (2.10f)$$

Por lo que la función de Green avanzada y retardada —para este caso— están relacionadas con un intercambio de índices y una conjugación compleja. ■

Corolario. $G^{(\pm)}(x, x'; E)$ es simétrica si y sólo si el hamiltoniano es real.

Demostración. \Rightarrow) Tomando un Hamiltoniano tal que $H = H^*$, se sigue que

$$\hat{G}^{(\pm)*} = \hat{G}^{(\mp)} \quad (2.11a)$$

o, expresado en la base de la posición

$$\langle x | \hat{G}^{(\pm)*} | x' \rangle = \langle x | \hat{G}^{(\mp)} | x' \rangle. \quad (2.11b)$$

Obsérvese que el lado izquierdo puede transformarse en

$$\langle x | ((\hat{G}^{(\pm)*})^T)^T | x' \rangle = \langle x | (\hat{G}^{(\pm)\dagger})^T | x' \rangle = \langle x | (\hat{G}^{(\mp)})^T | x' \rangle, \quad (2.11c)$$

donde (2.10c) fue usado en el último paso. Por consiguiente,

$$\langle x' | (\hat{G}^{(\mp)}) | x \rangle = \langle x | \hat{G}^{(\mp)} | x' \rangle. \quad (2.11d)$$

Entonces, $G^{(\pm)}(x, x'; E)$ es simétrica.

(\Leftarrow) Supóngase que

$$G^{(\pm)}(x, x'; E) = G^{(\pm)}(x', x; E), \quad (2.11e)$$

o, expresado en notación de Dirac

$$\langle x | \hat{G}^{(\pm)} | x' \rangle = \langle x' | \hat{G}^{(\pm)} | x \rangle. \quad (2.11f)$$

Obsérvese que el lado derecho puede transformarse en

$$\langle x' | (\hat{G}^{(\pm)\dagger})^\dagger | x \rangle = \langle x' | \hat{G}^{(\mp)\dagger} | x \rangle = \langle x | \hat{G}^{(\mp)*} | x' \rangle$$

donde (2.10c) fue usado en el paso intermedio. Por consiguiente,

$$\langle x | \hat{G}^{(\pm)} | x' \rangle = \langle x | \hat{G}^{(\mp)*} | x' \rangle. \quad (2.11g)$$

Entonces, $\hat{G}^{(\pm)*} = \hat{G}^{(\mp)}$, y el hamiltoniano es real. ■

2.2.2. Función de Green para un potencial $\delta(x)$

Para mayor claridad y exhaustividad del problema en cuestión (2.9), se incluye el procedimiento para obtener la función de Green para el caso de un potencial tipo $\delta(x)$, que no depende de la energía sino sólo de la posición; este resultado también puede encontrarse en Blinder [100], Grosche and Steiner [76] y Moshinsky et al. [99] donde la función de Green se calcula únicamente utilizando el formalismo de los operadores de transición para la ecuación Lippmann–Schwinger mismos que dan lugar a la serie de Born–Oppenheimer.

Proposición (Función de Green G_δ). *La ecuación de Schrödinger para un potencial $\delta(x)$ es*

$$\left(H - E + V_0\delta(\hat{x})\right)\hat{G}_\delta = \mathbb{I}, \quad (2.12a)$$

con solución

$$G_\delta(x, x', E) = G_0(x, x', E) - \frac{V_0 G_0(x, 0, E) G_0(0, x', E)}{1 + V_0 G_0(0, 0, E)}. \quad (2.12b)$$

Demostración (Función de Green G_δ). *Multiplicando desde la izquierda con la función de Green 1D en el vacío (\hat{G}_0) a (2.12a), y calculando en la base coordenada $|x\rangle$*

$$G_\delta(x, x', E) + V_0 \langle x | \hat{G}_0 \delta(\hat{x}) \hat{G}_\delta | x' \rangle = G_0(x, x', E), \quad (2.13a)$$

donde se ha utilizado que

$$\left(H - E\right)\hat{G}_0 = \mathbb{I}, \quad \& \quad \langle x | \hat{G}_0 | x' \rangle = G_0(x, x', E). \quad (2.13b)$$

Insertando un conjunto completo continuo, se obtiene

$$G_\delta(x, x', E) + V_0 \int dx'' G_0(x, x'', E) \delta(x'') G_\delta(x'', x', E) = G_0(x, x', E), \quad (2.13c)$$

o bien $G_\delta(x, x', E) + V_0 G_0(x, 0, E) G_\delta(0, x', E) = G_0(x, x', E)$

La expresión (2.13c) se evalúa en $x = 0$, dando lugar a una ecuación funcional cuya solución es

$$G_\delta(0, x', E) = \frac{G_0(0, x', E)}{1 + V_0 G_0(0, 0, E)}. \quad (2.13d)$$

Al introducir esta expresión en (2.13c), produce el resultado deseado. ■

Proposición (Función de Green 1D). *La función de Green 1D en el vacío $G_0(x, x', E)$ es simplemente*

$$G_0^{ret}(x, x', E) = \frac{i\hbar}{2\sqrt{2mE}} e^{i|x-x'|\sqrt{2mE/\hbar^2}}, \quad (2.14)$$

y depende del valor absoluto de la diferencia de posiciones, que a comparación de la función de Green 3D, esta es finita en el origen.

Demostración (Función de Green 1D). *De la definición de la función de Green*

$$\begin{aligned}
G_0(x, x', E) &\equiv \frac{\hbar^2}{2m} \langle x | \frac{1}{H - E - i\epsilon} | x' \rangle \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} \int dk' \int dk'' \langle x | k' \rangle \langle k' | \frac{1}{H - E - i\epsilon} | k'' \rangle \langle k'' | x' \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk' \frac{e^{ik'(x-x')}}{k'^2 - 2mE/\hbar^2 - i\epsilon} \\
&= \frac{1}{2\pi} \oint dk' \frac{e^{ik'(x-x')}}{(k' - \sqrt{2mE}/\hbar - i\epsilon)(k' + \sqrt{2mE}/\hbar + i\epsilon)}
\end{aligned} \tag{2.15a}$$

donde se redefinió ϵ las veces que fue necesario, mientras que la integral de línea se puede realizar según los dos contornos mostrados en la fig. 2.5. El argumento de la exponencial se separa en dos

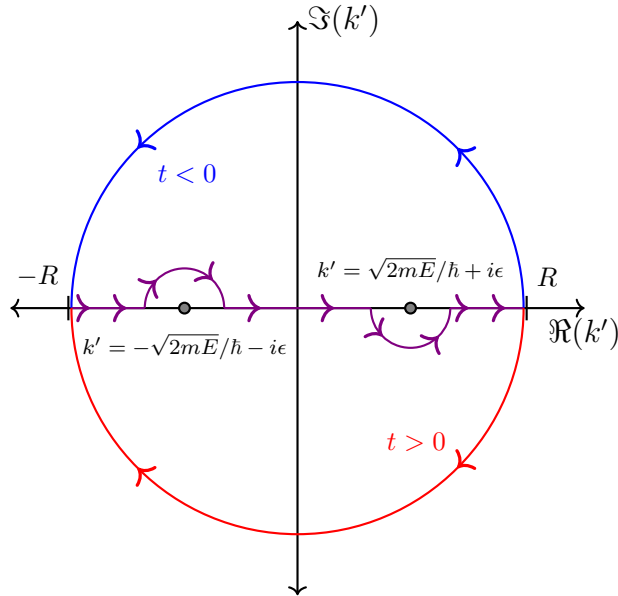


Figura 2.5: Contornos de integración para la función de Green en el vacío; $G_0^{\text{ret}}(x, x', E)$ y $G_0^{\text{av}}(x, x', E)$ utilizan los contornos inferior y superior, respectivamente.

contribuciones

$$ik(x - x') = \begin{cases} +ik|x - x'| & \text{si } x - x' > 0 \\ -ik|x - x'| & \text{si } x - x' < 0 \end{cases}, \tag{2.15b}$$

donde se observa que

$$\lim_{\Im[k] \rightarrow \pm\infty} e^{\pm ik|x-x'|} = \lim_{\Im[k] \rightarrow \pm\infty} e^{(\pm i\Re[k] \mp \Im[k])|x-x'|} = 0. \tag{2.15c}$$

Por otro lado, del argumento de la parte temporal de la función de onda

$$-iEt = -i(\Re[E] + i\Im[E])t = (\mp i\Re[E] \pm \Im[E])|t| \quad \text{si } \pm t > 0 \therefore \mp \Im[E] > 0. \tag{2.15d}$$

Regresando al cálculo de $G_0(x, x', E)$

$$\begin{aligned}
 G_0(x, x', E) &= \frac{\theta(x - x')}{2\pi} \oint dk' \frac{e^{+ik'|x-x'|}}{(k' - \sqrt{2mE}/\hbar - i\epsilon)(k' + \sqrt{2mE}/\hbar + i\epsilon)} \\
 &+ \frac{\theta(x' - x)}{2\pi} \oint dk' \frac{e^{-ik'|x-x'|}}{(k' - \sqrt{2mE}/\hbar - i\epsilon)(k' + \sqrt{2mE}/\hbar + i\epsilon)} \\
 &\stackrel{\epsilon \rightarrow 0}{=} \frac{i\hbar}{2\sqrt{2mE}} \left(\underbrace{\theta(x - x')e^{i|x-x'|\sqrt{2mE}/\hbar^2}}_{t < 0} + \underbrace{\theta(x' - x)e^{i|x-x'|\sqrt{2mE}/\hbar^2}}_{t > 0} \right),
 \end{aligned} \tag{2.15e}$$

donde el caso $t > 0$ y $t < 0$ corresponde a $G_0^{\text{retardada}}(x, x', E)$ y $G_0^{\text{avanzada}}(x, x', E)$, respectivamente.

■

De esta forma, destacan las siguiente propiedades de la función de Green para el potencial $\delta(x)$:

- Se ha roto la dependencia con $|x - x'|$.
- Conserva la simetría de intercambio $x \leftrightarrow x'$.
- Tiene un nuevo polo en $V_0 = -\frac{2\sqrt{2mE}}{i\hbar}$.
- Para $V_0 < 0$ se tienen estados decrecientes y para $V_0 > 0$ estados prohibidos (anti-ligados).

2.2.3. Función de Green con potencial de activación

Bajo la inspiración de la metodología para resolver la partícula en una caja con un potencial $\delta(x)$, se procede a introducir la dependencia con el momentum.

Proposición (Función de Green G_p). *La ecuación en forma de operador para \hat{V}_{int} es*

$$\left(\hat{H} - E + V(\hat{p})\delta(\hat{x}) + \delta(\hat{x})V(\hat{p}) \right) \hat{G}_p = \mathbb{I}, \tag{2.16a}$$

con solución

$$\begin{aligned}
 G_p(x, x', E) &= G_0(x, x', E) + \frac{G_0(x, 0, E)G_0(0, x', E)Q_3(E)}{1 + P_2(0, E) - G_0(0, 0, E)Q_3(E)} \\
 &- \frac{G_0(x, 0, E)R_1(x', E)\left(1 + P_2(0, E)\right)}{1 + P_2(0, E) - G_0(0, 0, E)Q_3(E)} \\
 &- \frac{P_2(x, E)\left(G_0(0, x', E) - G_0(0, 0, E)R_1(x', E)\right)}{1 + P_2(0, E) - G_0(0, 0, E)Q_3(E)},
 \end{aligned} \tag{2.16b}$$

en donde

$$P_1(x', E) = \int dx \tilde{V}(x)G_0(x, x', E), \quad P_2(x, E) = \int dy G_0(x, y, E)\tilde{V}(-y), \tag{2.16c}$$

$$Q_1(E) = \int dx \int dy \tilde{V}(x)G_0(x, y, E)\tilde{V}(-y), \quad Q_2(E) = \int dx \tilde{V}(x)G_0(x, 0, E), \tag{2.16d}$$

$$R_1(x', E) = \frac{P_1(x', E)}{1 + Q_2(E)}, \quad \& \quad Q_3(E) = \frac{Q_1(E)}{1 + Q_2(E)}. \tag{2.16e}$$

Demostración (Función de Green G_p). *Procediendo de forma similar al caso con un potencial $\delta(x)$, al integrar (2.16a) se obtiene la ecuación integral*

$$\begin{aligned} G_p(x, x', E) &= G_0(x, x', E) - \int dy G_0(x, y, E) \delta(y) V(\hat{p}) G_p(y, x', E) \\ &\quad - \int dy G_0(x, y, E) V(\hat{p}) \delta(y) G_p(y, x', E), \end{aligned} \quad (2.17a)$$

donde el operador \hat{p} indica la dependencia del momentum y se entiende como $-i\hbar\partial_y$. Antes de la evaluación de la expresión anterior, se inserta otro conjunto completo en cada integral de la forma

$$\begin{aligned} \langle y | \delta(\hat{x}) V(\hat{p}) \hat{G}_p | x' \rangle &= \int dy' \langle y | \delta(\hat{x}) V(\hat{p}) | y' \rangle \langle y' | \hat{G}_p | x' \rangle \\ &= \int dy' \frac{\delta(y)}{2\pi} \int dp e^{ip(y-y')} V(p) G_p(y', x', E) \\ &= \delta(y) \int dy' \tilde{V}(y') G_p(y', x', E), \end{aligned} \quad (2.17b)$$

donde se introdujo un conjunto completo de ondas planas en la segunda línea, y

$$\tilde{V}(y') = \frac{1}{2\pi} \int dp e^{-ipy'} V(p) \quad (2.17c)$$

es la transformada de Fourier del potencial; mientras que para la segunda integral

$$\begin{aligned} \langle y | V(\hat{p}) \delta(\hat{x}) \hat{G}_p | x' \rangle &= \int dy' \langle y | V(\hat{p}) \delta(\hat{x}) | y' \rangle \langle y' | \hat{G}_p | x' \rangle \\ &= \int dy' \frac{\delta(y')}{2\pi} \int dp e^{ip(y-y')} V(p) G_p(y', x', E) \\ &= \tilde{V}(-y) \int dy' \delta(y') G_p(y', x', E) \\ &= \tilde{V}(-y) G_p(0, x', E). \end{aligned} \quad (2.17d)$$

La sustitución de (2.17b) y (2.17d) en (2.17a), conduce a

$$\begin{aligned} G_p(x, x', E) &= G_0(x, x', E) - G_0(x, 0, E) \int dy' \tilde{V}(y') G_p(y', x', E) \\ &\quad - \int dy G_0(x, y, E) \tilde{V}(-y) G_p(0, x', E). \end{aligned} \quad (2.17e)$$

Para obtener $G_p(x, x', E)$, primero se multiplica la última expresión por $\tilde{V}(x)$ y se integra sobre x ,

$$\begin{aligned} \int dx \tilde{V}(x) G_p(x, x', E) &= \int dx \tilde{V}(x) G_0(x, x', E) \\ &\quad - \int dx \tilde{V}(x) G_0(x, 0, E) \int dy' \tilde{V}(y') G_p(y', x', E) \\ &\quad - \int dx \tilde{V}(x) \int dy G_0(x, y, E) \tilde{V}(-y) G_p(0, x', E), \end{aligned} \quad (2.17f)$$

y reconociendo que la integral del lado izquierdo es la misma que la del 2º término del lado derecho —con otra variable de integración— se obtiene la relación

$$\int dy' \tilde{V}(y') G_p(y', x', E) = \frac{P_1(x', E) - Q_1(E) G_p(0, x', E)}{1 + Q_2(E)}, \quad (2.17g)$$

donde $P_1(x', E)$, $P_2(x, E)$, $Q_1(E)$ y $Q_2(E)$ son las integrales en (2.16c) y (2.16d). Sustituyendo de nuevo la ecuación anterior en $G_p(x, x', E)$ dada por (2.17a), se obtiene la siguiente ecuación funcional

$$G_p(x, x', E) = G_0(x, x', E) - P_2(x, E)G_p(0, x', E) - G_0(x, 0, E) \frac{P_1(x', E) - Q_1(E)G_p(0, x', E)}{1 + Q_2(E)}. \quad (2.17h)$$

Esta última ecuación no es todavía una fórmula cerrada pues depende de nuevo de G_p . Evaluando en $x = 0$ se obtiene la ecuación funcional reducida

$$G_p(0, x', E) = G_0(0, x', E) - P_2(0, E)G_p(0, x', E) - G_0(0, 0, E) \frac{P_1(x', E) - Q_1(E)G_p(0, x', E)}{1 + Q_2(E)}, \quad (2.17i)$$

que se puede resolver para $G_p(0, x', E)$, obteniéndose

$$G_p(0, x', E) = \frac{G_0(0, x', E) - G_0(0, 0, E)R_1(x', E)}{1 + P_2(0, E) - G_0(0, 0, E)Q_3(E)}, \quad (2.17j)$$

donde $R_1(x', E)$ y $Q_3(E)$ son las integrales en (2.16e). La última ecuación se sustituye finalmente en $G_p(x, x', E)$, para obtener su expresión final en términos de $G_0(x, x', E)$. ■

Nótese que (2.16b) puede dividirse en contribuciones simétricas y antisimétricas, donde estas últimas están asociadas a la irreversibilidad, como se vio en el teorema de la sección 2.2.1. Asimismo, las integrales en (2.16b) se pueden hacer en términos de funciones seno-integrales (ver por ejemplo § 8.23 de Gradshteyn and Ryzhik [101] o § II.5 de Prudnikov et al. [102]), utilizando además la transformada de Fourier del potencial descrito en la fig. 2.2, como se verá próximamente.

Capítulo 3

Aplicación a partículas en una caja

Ahora se presenta la especialización del problema en el caso de que las partículas estén en una caja, empleando condiciones de frontera de Dirichlet en los bordes; además, las energías son bien conocidas para el problema no perturbado. Primero se aplica la nueva función de Green al caso perturbado dentro de una caja, dando la forma explícita de su descomposición espectral, y luego se analiza su estructura meromórfica para encontrar sus polos. Posteriormente, se tiene el problema de la evolución donde se necesita una definición adecuada de entropía que dé cuenta de la aparición del desorden en el espacio energético, por lo que se sugiere una entropía dependiente de la base, e.g. entropía de Shannon. Después, se aborda el problema explícito de la evolución numérica mediante la descomposición espectral en un espacio discretizado. Las evaluaciones numéricas eficientes se consiguen mejor si dicha discretización se restringe a una región en la que la relación de dispersión está bien aproximada por una parábola. Por lo tanto, se incluye un análisis de la relación de dispersión en la versión espacialmente discretizada del problema. Por último, se construyen condiciones iniciales específicas que son completamente simétricas y se analiza cómo el paquete de ondas se propaga dentro de la caja de forma asimétrica. La razón es obviamente la simetría espacial rota inherente al problema, es decir, $x \rightarrow -x$, $p \rightarrow -p$ cambia la forma del Hamiltoniano, ya que tanto la simetría bajo inversión espacial como temporal están ausentes. Luego se añade una definición especial de temperatura (o parámetro β efectivo). Con ello se pueden analizar otros tipos de distribuciones que evolucionan en el tiempo. En esta parte, es importante mostrar cómo la entropía puede efectivamente disminuir en función del tiempo, resultando en un tipo especial de orden producido por el potencial Maxwelliano irreversible.

3.1. Función de Green en una caja

La función de Green expresada en términos de su eigensistema es simplemente

$$G(x, x', E) = \sum_n \frac{\phi(x)\phi^*(x')}{E_n - E}, \quad (3.1a)$$

donde en este caso se usan las eigenfunciones

$$\phi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \kappa_n x, \quad \text{con} \quad \kappa_n = \frac{n\pi}{L}, \quad \text{y eigenenergías} \quad E_n = \frac{1}{2} \hbar^2 \kappa_n^2. \quad (3.1b)$$

Desplazando la caja al intervalo $[-L/2, L/2]$, la función de Green en una caja¹ es

$$G_0^C(x, x', E) = \frac{2}{L} \sum_{m=1} \frac{\sin(\kappa_{2m}x) \sin(\kappa_{2m}x')}{E_{2m} - E} + \frac{2}{L} \sum_{m=1} \frac{\cos(\kappa_{2m-1}x) \cos(\kappa_{2m-1}x')}{E_{2m-1} - E}. \quad (3.2)$$

Esta última expresión está lista para usarse en el cálculo explícito de la función de Green. En el caso del potencial tipo delta en la ec.(2.12b), se tiene que

$$G_\delta^C(x, x', E) = \frac{2}{L} \sum_{n=1} \left(\frac{\sin(\kappa_{2n}x) \sin(\kappa_{2n}x')}{E_{2n} - E} + \frac{\cos(\kappa_{2n-1}x) \cos(\kappa_{2n-1}x')}{E_{2n-1} - E} \right) - \frac{\frac{4V_0}{L^2} \sum_{n=1} \frac{\cos(\kappa_{2n-1}x)}{E_{2n-1} - E} \sum_{m=1} \frac{\cos(\kappa_{2m-1}x')}{E_{2m-1} - E}}{1 + \frac{2V_0}{L} \sum_{n=1} \frac{1}{E_{2n-1} - E}}. \quad (3.3)$$

Proposición (G_p en una caja). *El caso del potencial demoníaco en (2.16b) admite la siguiente simplificación para el caso de una caja*

$$G_p^C(x, x', E) = G_0^C(x, x', E) + \frac{P_1^C(x, E)G_0^C(0, x', E) - G_0^C(x, 0, E)P_1^C(x', E)}{1 - G_0^C(0, 0, E)Q_1^C(E)} + \frac{G_0^C(x, 0, E)G_0^C(0, x', E)Q_1^C(E) - P_1^C(x, E)G_0^C(0, 0, E)P_1^C(x', E)}{1 - G_0^C(0, 0, E)Q_1^C(E)}, \quad (3.4a)$$

con

$$P_1^C(x', E) = -\frac{2}{i\pi L} \sum_{n=1} \frac{\text{Si}(\xi_+) - \text{Si}(\xi_-) - \text{Si}(n\pi)}{E_{2n} - E} \sin(\kappa_{2n}x') \quad (3.4b)$$

$$\simeq -\frac{2}{iL} \left(\sum_{n=1}^{[a/\pi]-1} \frac{\sin(\kappa_{2n}x)}{E_{2n} - E} - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(\kappa_{2n}x)}{E_{2n} - E} + \frac{1}{2} \frac{(1 + 2\epsilon)}{E_{2[a/\pi]} - E} \sin(\kappa_{2[a/\pi]}x) \right), \quad (3.4c)$$

$$Q_1^C(E) = \frac{2}{\pi^2 L} \sum_{n=1} \frac{(\text{Si}(\xi_+) - \text{Si}(\xi_-) - \text{Si}(n\pi))^2}{E_{2n} - E} \quad (3.4d)$$

$$\simeq \frac{1}{2L} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{E_{2n} - E} - \frac{1}{E_{2[a/\pi]} - E} \right), \quad (3.4e)$$

donde $\text{Si}(x)$ es la función Seno-Integral y

$$\xi_{\pm} = (P_R \pm \kappa_{2n}) \frac{L}{2}. \quad (3.4f)$$

¹ Esta función se puede poner en términos de la función *theta* de Jacobi, como se indica en Grosche and Steiner [76].

Demostración (G_p en una caja). Usando (2.16b), con la función de Green libre en una caja $G_0^C(x, x', E)$

$$G_p^C(x, x', E) = G_0^C(x, x', E) - \frac{G_0^C(x, 0, E)P_1^C(x', E)}{1 + Q_2^C(E)} + \left(\frac{G_0^C(x, 0, E)Q_1^C(E)}{1 + Q_2^C(E)} - P_2^C(x, E) \right) \frac{G_0^C(0, x', E) - \frac{G_0^C(0, 0, E)P_1^C(x', E)}{1 + Q_2^C(E)}}{1 + P_2^C(0, E) - \frac{G_0^C(0, 0, E)Q_1^C(E)}{1 + Q_2^C(E)}}. \quad (3.5a)$$

Los términos a obtener son:

a) La transformada de Fourier $\tilde{V}(y)$

$$\tilde{V}(y) = \frac{1}{2\pi} \int dp e^{-ip(y+i\epsilon)} V(p) = \frac{1}{2\pi} \left(\int_{-\infty}^{-P_R} + \int_0^{P_R} \right) dp e^{-ip(y+i\epsilon)} \stackrel{\epsilon \rightarrow 0}{=} \frac{1}{2i\pi y} (1 - 2 \cos P_R y). \quad (3.5b)$$

b) Integral $P_1^C(x', E)$

$$P_1^C(x', E) = \int_{-L/2}^{L/2} dx \tilde{V}(x) G_0^C(x, x', E) = \frac{2}{L} \sum_{n=1} \int_{-L/2}^{L/2} dx \frac{(1 - 2 \cos P_R x)}{2i\pi x} \times \left(\frac{\sin(\kappa_{2n} x) \sin(\kappa_{2n} x')}{E_{2n} - E} + \frac{\cos(\kappa_{2n-1} x) \cos(\kappa_{2n-1} x')}{E_{2n-1} - E} \right) \quad (3.5c)$$

Para realizar la integral anterior, nótese que

$$\int_{-L/2}^{L/2} dx \frac{\sin(\kappa_{2n} x)}{x} + \frac{i \cos(\kappa_{2n-1} x)}{x} = 2 \text{Si}(n\pi) + i0, \quad (3.5d)$$

$$2 \int_{-L/2}^{L/2} dx \frac{\cos(P_R x) \cos(\kappa_{2n-1} x)}{x} = \int_{-L/2}^{L/2} dx \frac{\cos(P_R + \kappa_{2n-1})x}{x} + \frac{\cos(P_R - \kappa_{2n-1})x}{x} = 0, \quad (3.5e)$$

$$2 \int_{-L/2}^{L/2} dx \frac{1}{x} \cos(P_R x) \sin(\kappa_{2n} x) = \int_{-L/2}^{L/2} dx \frac{\sin(P_R + \kappa_{2n})x}{x} - \frac{\sin(P_R - \kappa_{2n})x}{x} = 2 \text{Si}(\xi_+) - 2 \text{Si}(\xi_-). \quad (3.5f)$$

c) Integral $Q_1^C(E)$

$$Q_1^C(E) = \int_{-L/2}^{L/2} dx \tilde{V}(x) \int_{-L/2}^{L/2} dy G_0^C(x, y, E) \tilde{V}(-y) = \int_{-L/2}^{L/2} dy \tilde{V}(-y) P_1^C(y, E) = -\frac{1}{2i\pi} \frac{2}{i\pi L} \sum_{n=1} \int_{-L/2}^{L/2} dy \frac{(2 \cos P_R y - 1)}{y} \left(\frac{\text{Si}(\xi_+) - \text{Si}(\xi_-) - \text{Si}(n\pi)}{E_{2n} - E} \sin(\kappa_{2n} y) \right) = \frac{2}{\pi^2 L} \sum_{n=1} \frac{(\text{Si}(\xi_+) - \text{Si}(\xi_-) - \text{Si}(n\pi))^2}{E_{2n} - E} \quad (3.5g)$$

d) Integral $P_2^C(x, E)$

$$P_2^C(x, E) = \int dy G_0^C(x, y, E) \tilde{V}(-y) = \frac{1}{i\pi L} \sum_{n=1} \int dy \frac{(2 \cos P_R y - 1)}{y} \times \left(\frac{\sin(\kappa_{2n} x) \sin(\kappa_{2n} y)}{E_{2n} - E} + \frac{\cos(\kappa_{2n-1} x) \cos(\kappa_{2n-1} y)}{E_{2n-1} - E} \right). \quad (3.5h)$$

Entonces

$$P_2^C(x, E) = \frac{2}{i\pi L} \sum_{n=1} \frac{\text{Si}(\xi_+) - \text{Si}(\xi_-) - \text{Si}(n\pi)}{E_{2n} - E} \sin(\kappa_{2n} x) = -P_1^C(x, E). \quad (3.5i)$$

e) Integral $Q_2^C(E)$

$$Q_2^C(E) = P_1^C(0, E) = P_2^C(0, E) = 0. \quad (3.5j)$$

f) Green libre evaluada

$$G_0^C(x, 0, E) = \frac{2}{L} \sum_{n=1} \frac{\cos(\kappa_{2n-1} x)}{E_{2n-1} - E}, \quad \& \quad G_0^C(0, x', E) = \frac{2}{L} \sum_{n=1} \frac{\cos(\kappa_{2n-1} x')}{E_{2n-1} - E}. \quad (3.5k)$$

Asimismo, dado el comportamiento de la función Si, se puede hacer la siguiente aproximación. Se escribe el argumento de la forma

$$\text{Si}(n\pi + a) - \text{Si}(n\pi - a) = \text{Si}(\pi(n + \llbracket a/\pi \rrbracket) + \pi\epsilon) - \text{Si}(\pi(n - \llbracket a/\pi \rrbracket) - \pi\epsilon) \quad (3.5l)$$

en donde $\llbracket a/\pi \rrbracket$ representa la parte entera y ϵ la parte fraccionaria de a/π . Expandiendo alrededor de $\epsilon = 0$,

$$\begin{aligned} \text{Si}(n\pi + a) - \text{Si}(n\pi - a) &\simeq \text{Si}(\pi(n + \llbracket a/\pi \rrbracket)) - \text{Si}(\pi(n - \llbracket a/\pi \rrbracket)) \\ &\quad + \epsilon \left(\frac{\sin(\pi(n + \llbracket a/\pi \rrbracket))}{(n + \llbracket a/\pi \rrbracket)} + \frac{\sin(\pi(n - \llbracket a/\pi \rrbracket))}{(n - \llbracket a/\pi \rrbracket)} \right) \\ &\simeq \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2} \Theta(n - \llbracket a/\pi \rrbracket) + \frac{\pi}{2} \Theta(\llbracket a/\pi \rrbracket - n) + \pi\epsilon \delta_{n, \llbracket a/\pi \rrbracket}. \end{aligned} \quad (3.5m)$$

(Nota: Dada la función original, la función escalón es cero para el caso $n = \llbracket a/\pi \rrbracket$.) De esta forma, se tiene que

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Si}(\xi_+) - \text{Si}(\xi_-)}{E_{2n} - E} &\simeq \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2} \Theta(n - \llbracket a/\pi \rrbracket) + \frac{\pi}{2} \Theta(\llbracket a/\pi \rrbracket - n) + \pi\epsilon \delta_{n, \llbracket a/\pi \rrbracket}}{E_{2n} - E} \\ &\simeq \sum_{n=1}^{\llbracket a/\pi \rrbracket - 1} \frac{\pi}{E_{2n} - E} + \frac{\pi}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 + 2\epsilon) \delta_{n, \llbracket a/\pi \rrbracket}}{E_{2n} - E} \\ &\simeq \sum_{n=1}^{\llbracket a/\pi \rrbracket - 1} \frac{\pi}{E_{2n} - E} + \frac{\pi}{2} \frac{(1 + 2\epsilon)}{E_{2\llbracket a/\pi \rrbracket} - E}, \end{aligned} \quad (3.5n)$$

y

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Si}(n\pi)}{E_{2n} - E} \simeq \frac{\pi}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{E_{2n} - E}. \quad (3.5\tilde{n})$$

Mientras que

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\text{Si}(\xi_+) - \text{Si}(\xi_-) - \text{Si}(n\pi))^2}{E_{2n} - E} &\simeq \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\frac{\pi^2}{4} \Theta(n - \llbracket a/\pi \rrbracket) + \frac{\pi^2}{4} \Theta(\llbracket a/\pi \rrbracket - n) + \pi^2 \epsilon^2 \delta_{n, \llbracket a/\pi \rrbracket}}{E_{2n} - E} \\ &\simeq \frac{\pi^2}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{E_{2n} - E} - \frac{\pi^2}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 - 4\epsilon^2) \delta_{n, \llbracket a/\pi \rrbracket}}{E_{2n} - E} \\ &\simeq \frac{\pi^2}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{E_{2n} - E} - \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{E_{2\llbracket a/\pi \rrbracket} - E}, \end{aligned} \quad (3.5o)$$

en donde se quitó ϵ^2 de la última expresión. ■

En (3.4a) la identificación de la parte simétrica y antisimétrica de la función de Green es directa. Nótese que los términos que contribuyen a la parte antisimétrica provienen de la perturbación Maxwelliana, ya que el primer y tercer término son manifiestamente simétricos. Por otro lado, el objetivo de la aproximación en $P_1^C(x', E)$ y $Q_1^C(E)$ es destacar los términos que dependen fuertemente de la energía de referencia. La estructura de polos del término antisimétrico completo puede ser muy intrincada, según la ecuación trascendental

$$1 - G_0^C(0, 0, E)Q_1^C(E) = 0, \quad (3.6a)$$

donde (ver apéndice A)

$$G_0^C(0, 0, E) = \frac{\tan(L\sqrt{2E}/2\hbar)}{\hbar\sqrt{2E}}, \quad \& \quad Q_1^C(E) = \frac{1}{2L} \left(\frac{1}{2E} - \frac{L \cot(L\sqrt{2E}/2\hbar)}{2\hbar\sqrt{2E}} - \frac{1}{E_{2\llbracket a/\pi \rrbracket} - E} \right), \quad (3.6b)$$

y claramente $E_{2\llbracket a/\pi \rrbracket}$ no es un cero de (3.6a), ya que el producto $G_0^C(0, 0, E)Q_1^C(E)$ tendería a infinito si $E \rightarrow E_{2\llbracket a/\pi \rrbracket}$. Sin embargo, se observa que el numerador

$$P_1^C(x, E)G_0^C(0, x', E) - G_0^C(x, 0, E)P_1^C(x', E) \quad (3.7)$$

todavía contiene los polos de G_0^C ; mientras que el nuevo término $P_1^C(x, E)$, proporcional a

$$\sin(\kappa_{2\llbracket a/\pi \rrbracket} x) / (E_{2\llbracket a/\pi \rrbracket} - E), \quad (3.8)$$

que en general (si $x \neq x'$) no desaparece, contribuye a un nuevo polo situado en $E_{2\llbracket a/\pi \rrbracket}$. En resumen, la antisimetría bajo el intercambio $x \leftrightarrow x'$ tanto en soluciones estacionarias como en las soluciones estacionarias y dependientes del tiempo proviene principalmente de la inversión armónica de (3.7) bajo la aproximación

$$\propto \frac{\sin(\kappa_{2\llbracket a/\pi \rrbracket} x)G_0^C(x', 0, E) - G_0^C(0, x, E)\sin(\kappa_{2\llbracket a/\pi \rrbracket} x')}{E_{2\llbracket a/\pi \rrbracket} - E}$$

cuyo polo produce $\exp(-iE_{2\llbracket a/\pi \rrbracket}t/\hbar)$ en la descomposición espectral de la función de onda.

3.2. Descomposición espacial y espectral

Para realizar la emulación se procede a discretizar el espacio para resolver la ecuación de eigenvalores para el Hamiltoniano en una red. Esto permite tratar el problema como una representación matricial sobre una base de funciones puntuales. Antes de resolver el caso con el potencial demoníaco, la metodología con el caso libre cuya ec. de Schrödinger 1D es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (3.9)$$

Al discretizar el sistema, la segunda derivada se puede expresar como una matriz tridiagonal infinita, por lo que el término $\partial_x^2\Psi(x)$ queda como²

$$\langle x|\partial_x^2|\Psi\rangle \doteq \frac{1}{a^2} \begin{pmatrix} \vdots \\ x_{i-1} \\ x_i \\ x_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{i-1} \\ \Psi_i \\ \Psi_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix} \doteq \langle x|\frac{T^\dagger + T - 2\mathbb{I}}{a^2}|\Psi\rangle, \quad (3.10a)$$

donde a es el parámetro de escala y los operadores de traslación T & T^\dagger son tales que

$$TT^\dagger = 1 \quad \& \quad \langle x|T|\Psi\rangle = \langle x-a|\Psi\rangle. \quad (3.10b)$$

De esta forma, la ec. de Schrödinger se reescribe como

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2}(T + T^\dagger - 2\mathbb{I})|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \quad (3.11)$$

Tomando el producto interno con $|x\rangle$, se llega a una ecuación en diferencias finitas

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\langle x|(T + T^\dagger - 2\mathbb{I})|\Psi\rangle = \langle x|E|\Psi\rangle \\ \Rightarrow & -\frac{\hbar^2}{2ma^2}(\Psi(x-a) + \Psi(x+a) - 2\Psi(x)) = E\Psi(x), \end{aligned} \quad (3.12a)$$

con solución general

$$\Psi(x) = e^{ikx}u(x), \quad \text{y energías} \quad E_k = \frac{\hbar^2}{ma^2}(1 - \cos ka). \quad (3.12b)$$

En el caso de estar en una caja, con soluciones del tipo $\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$ con condiciones de frontera $\Psi(0) = 0 = \Psi(L)$, se tienen las energías de caja

$$E_k^C = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(1 - \cos \frac{n\pi a}{L}\right). \quad (3.13)$$

² Esta relación es análoga a tomar la diferencia finita de la derivada de una función, i.e.

$$\partial_x f(x) \doteq \frac{f(x+a) - f(x)}{a} \quad \& \quad \partial_x^2 f(x) \doteq \frac{f(x+a) - 2f(x) + f(x-a)}{a^2}.$$

3.2.1. Cálculo de las energías con el potencial de activación

Dado que el tratamiento es equivalente a un modelo de amarre fuerte en un cristal es aconsejable utilizar la primera zona de Brillouin para calcular las energías. De este modo, el potencial de activación en (2.5b) será distinto de cero en los intervalos $[-\kappa_D, -\kappa_R]$ y $[0, \kappa_R]$, resultando las zonas de acción del potencial Maxwelliano según el momento de referencia $P_R \leftrightarrow \kappa_R$. Esto se puede ver en el gráfico de la fig. 3.1. Sin embargo, es necesario trabajar en el régimen energético cuasi-parabólico que está por debajo del *punto de Dirac* (ϖ_D , ver por ejemplo Hernández et al. [103]), obteniendo la gráfica superior, una parábola con regiones donde actúa el potencial Maxwelliano. Cabe destacar que la región del potencial para $p < -P_R$ no está acotada por arriba como en la gráfica inferior. Por conveniencia se trabajará con una base de vectores cuyo índice n indique la posición en la red,

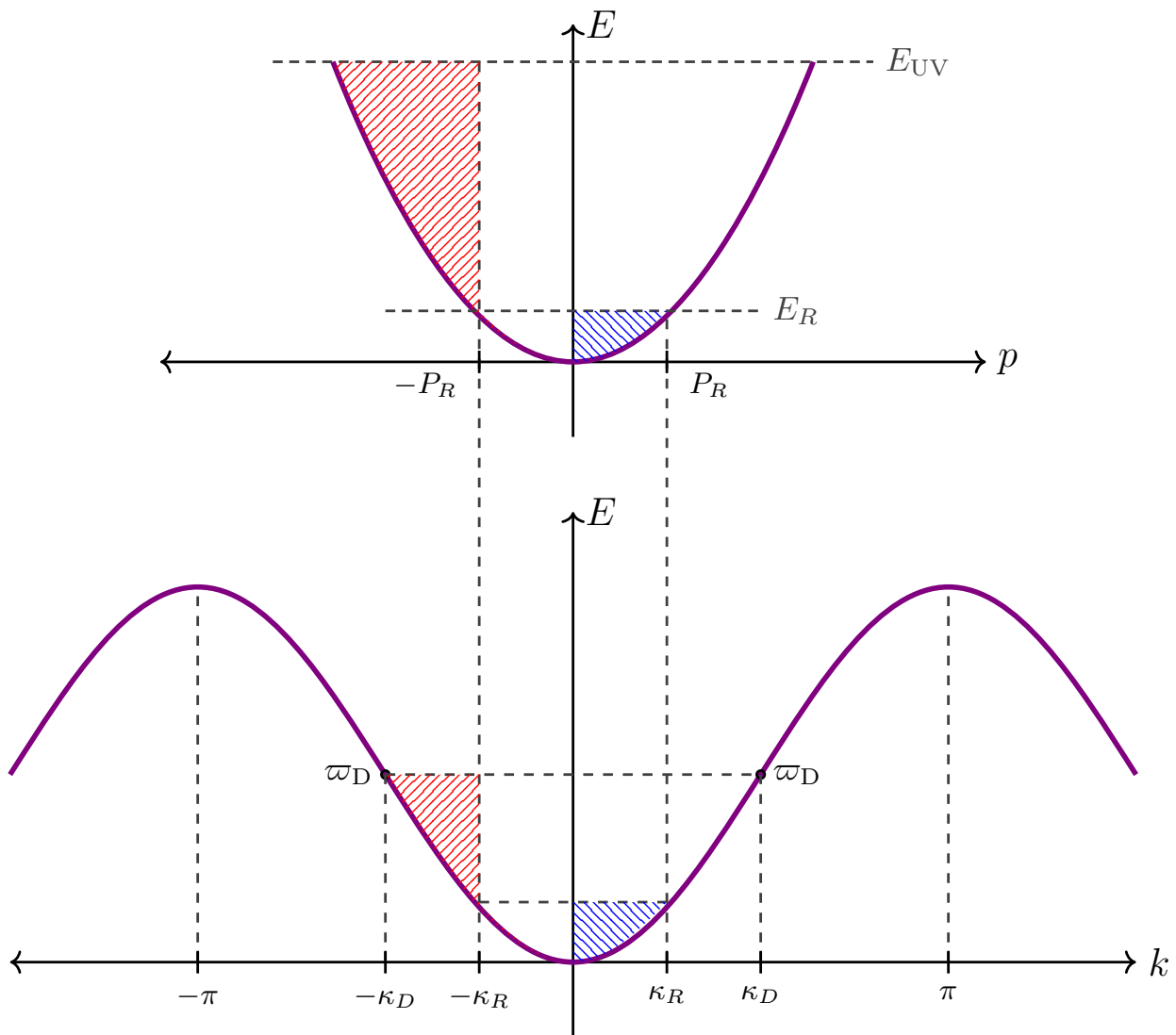


Figura 3.1: Energías en un modelo de amarre fuerte en un cristal, las zonas coloreadas representan el potencial de activación en (2.5b) con el momento de referencia $P_R \leftrightarrow \kappa_R$. Además, utilizando el régimen energético cuasi-parabólico por debajo del *punto de Dirac* (ϖ_D), se obtiene el gráfico superior.

de modo que

$$T|n\rangle = |n+1\rangle, \quad \text{donde} \quad |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa |\kappa\rangle e^{-i\kappa n}. \quad (3.14a)$$

y $|\kappa\rangle$ que representa el cuasi-momento en la red

$$|\kappa\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_n e^{i\kappa n} |n\rangle, \quad (3.14b)$$

y se cumplen las siguientes relaciones

$$\langle \kappa' | \kappa \rangle = \delta(\kappa - \kappa'), \quad \langle n' | n \rangle = \delta_{n,n'}, \quad \mathbb{I} = \sum_n |n\rangle \langle n| = \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa |\kappa\rangle \langle \kappa|. \quad (3.14c)$$

Por lo tanto, la acción del Hamiltoniano sobre una onda plana

$$\langle n | \kappa \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\kappa n}, \quad (3.15)$$

ya no se limita a la parte no perturbada más el defecto en el origen, en su lugar se tiene un efecto no-local que se puede obtener directamente calculando los elementos de la matriz en el sitio n . El Hamiltoniano con potencial de activación discretizado es

$$H = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} (T + T^\dagger - 2\mathbb{I}) + V_{\text{int}}(\hat{p}_B, \hat{n}), \quad (3.16a)$$

donde V_{int} el potencial de interacción dependiente del cuasi-momento de Bloch (p_B)

$$2V_{\text{int}}(\hat{p}_B, \hat{n}) = V_{\text{act}}(\hat{p}_B)V_B(\hat{n}) + \text{h.c.}, \quad (3.16b)$$

y a su vez, $V_B(\hat{n})$ es el potencial de barrera

$$V_B(\hat{n}) = V_0 \delta_{\hat{n},0}, \quad (3.16c)$$

que cumplen

$$V_{\text{act}}(\hat{p}_B)|\kappa\rangle = V_{\text{act}}(\kappa)|\kappa\rangle, \quad \& \quad \hat{n}|n\rangle = n|n\rangle. \quad (3.17)$$

Cabe resaltar que en el caso continuo, las unidades de V_0 son de energía por longitud por la presencia de la delta de Dirac; mientras que en el caso discreto, la delta de Kronecker no tiene unidades.

Proposición (Ec. de Schrödinger en amarre fuerte). *La ec. de Schrödinger en una red de cuasi-momento $|\kappa\rangle$ y base de posición $|n\rangle$ es*

$$\langle n | H | \kappa \rangle = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \langle n | (T + T^\dagger - 2\mathbb{I}) | \kappa \rangle + \frac{V_0}{2} \langle n | (V_{\text{act}}(\hat{p}_B)\delta_{\hat{n},0} + \delta_{\hat{n},0}V_{\text{act}}(\hat{p}_B)) | \kappa \rangle, \quad (3.18a)$$

donde

$$\langle n | (T + T^\dagger - 2\mathbb{I}) | \kappa \rangle = -2(1 - \cos \kappa) \frac{e^{i\kappa n}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (3.18b)$$

$$\langle n | V_{\text{act}}(\hat{p}_B)\delta_{\hat{n},0} | \kappa \rangle = \frac{1}{2i\pi n\sqrt{2\pi}} (2\cos(\kappa_R n) - 1 - e^{-i\kappa_D n}), \quad (3.18c)$$

$$\langle n | \delta_{\hat{n},0} V_{\text{act}}(\hat{p}_B) | \kappa \rangle = -\sum_{n'} \frac{\delta_{n,0}}{2i\pi n'} \cdot \frac{e^{i\kappa n'}}{\sqrt{2\pi}} (2\cos(\kappa_R n') - 1 - e^{i\kappa_D n'}). \quad (3.18d)$$

Demstración (Ec. de Schrödinger en amarre fuerte). *Utilizando las ondas planas (3.15), para el primer término se tiene*

$$\langle n | (T + T^\dagger - 2\mathbb{I}) | \kappa \rangle = \langle n-1 | \kappa \rangle + \langle n+1 | \kappa \rangle - 2\langle n | \kappa \rangle = \frac{e^{i\kappa(n-1)} + e^{i\kappa(n+1)} - 2e^{i\kappa n}}{\sqrt{2\pi}}.$$

Para el segundo término se insertan conjuntos completos n' y κ

$$\begin{aligned} \langle n | V_{act}(\hat{p}_B) \delta_{\hat{n},0} | \kappa \rangle &= \sum_{n'} \int d\kappa' \langle n | V_{act}(\hat{p}_B) | \kappa' \rangle \langle \kappa' | n' \rangle \langle n' | \delta_{\hat{n},0} | \kappa \rangle \\ &= \sum_{n'} \frac{\delta_{n',0}}{2\pi} \cdot \frac{e^{i\kappa n'}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa' V_{act}(\kappa') e^{i\kappa'(n-n')} = \sum_{n'} \frac{\delta_{n',0}}{2\pi} \cdot \frac{e^{i\kappa n'}}{\sqrt{2\pi}} \left(\int_{-\kappa_D}^{-\kappa_R} + \int_0^{\kappa_R} \right) d\kappa' e^{i\kappa' n}, \end{aligned}$$

y se procede similarmente con el tercer término

$$\begin{aligned} \langle n | \delta_{\hat{n},0} V_{act}(\hat{p}_B) | \kappa \rangle &= \sum_{n'} \int d\kappa' \langle n | \delta_{\hat{n},0} | \kappa' \rangle \langle \kappa' | n' \rangle \langle n' | V_{act}(\hat{p}_B) | \kappa \rangle \\ &= \sum_{n'} \frac{\delta_{n,0}}{2\pi} \cdot \frac{e^{i\kappa n'}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa' V_{act}(\kappa') e^{-i\kappa'(n'-n)} = \sum_{n'} \frac{\delta_{n,0}}{2\pi} \cdot \frac{e^{i\kappa n'}}{\sqrt{2\pi}} \left(\int_{-\kappa_D}^{-\kappa_R} + \int_0^{\kappa_R} \right) d\kappa' e^{-i\kappa' n'}. \end{aligned}$$

Finalmente al resolver las integrales se llega al resultado. Nótese que en el segundo término sólo un sumando es diferente de cero, mientras que en el tercer término la suma sobre n' persiste. ■

Corolario (Diagonalización numérica). *La diagonalización numérica del Hamiltoniano se logra utilizando la base discreta $|n\rangle$, de tanto sitios como frecuencias de oscilación sean necesarios, a saber*

$$\begin{aligned} \langle n | H | n' \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2ma^2} (\delta_{n-1,n'} - 2\delta_{n,n'} + \delta_{n+1,n'}) + \frac{V_0}{2} \cdot \frac{\delta_{n',0}}{2i\pi n} \left(2\cos(\kappa_R n) - 1 - e^{-i\kappa_D n} \right) \\ &\quad - \frac{V_0}{2} \cdot \frac{\delta_{n,0}}{2i\pi n'} \left(2\cos(\kappa_R n') - 1 - e^{i\kappa_D n'} \right). \end{aligned} \quad (3.19a)$$

Asimismo, la evaluación de las integrales correspondientes a $n=0=n'$ (el elemento central donde reside el demonio) muestra que el potencial es finito en un entorno discretizado y su intensidad V_0 puede ajustarse a voluntad, i.e.

$$\langle 0 | H | 0 \rangle = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \cdot 2 + \frac{V_0}{2} \cdot \frac{\kappa_D}{\pi}. \quad (3.19b)$$

Finalmente, la función de onda $\Psi(t)$ en el sitio n es

$$\langle n | \Psi, t \rangle = \sum_m \exp(-itE_m/\hbar) \langle n | m, E_m \rangle \langle m, E_m | \Psi_0 \rangle \quad (3.20a)$$

donde E_m son los eigenvalores del problema, $\langle n | m, E_m \rangle$ son las funciones estacionarias, i.e. los eigenvectores, mientras que $\langle m, E_m | \Psi_0 \rangle$ es la superposición (integral) de la condición inicial con la base, e.g.

$$\langle m, E_m | \Psi_0 \rangle = \sum_{n'} \langle m, E_m | n' \rangle \langle n' | \Psi_0 \rangle, \quad \text{con condición inicial } \langle n' | \Psi_0 \rangle. \quad (3.20b)$$

3.3. Entropía de Shannon

La entropía es fundamental en la resolución de la aparente paradoja, ya que permite el análisis de la evolución asimétrica en la medida en que se busca un efecto dinámico de ordenación aparente, en lugar de un efecto de medición y colapso cuántico (que de hecho contendría una irreversibilidad espuria). La entropía de von–Neumann σ_{vN} está asociada a distribuciones de probabilidad sobre estados cuánticos en el espacio de Hilbert (ver por ejemplo Wehrl [104]), asimismo, el ensamble en cuestión se entiende como un sistema cerrado de partículas independientes, por lo que se puede tratar como sistemas de partícula individual donde la matriz de densidad sería el producto de estados puros, i.e.

$$\sigma_{\text{vN}} = -\text{tr}[\hat{\rho} \log \hat{\rho}] = 0 \quad \text{si} \quad \hat{\rho} \doteq \text{diag}(0, \dots, 1, \dots, 0), \quad (3.21)$$

implicando que la ec. de von–Neumann sin fuente no captura el fenómeno de irreversibilidad. Dicho esto, se requiere una noción de entropía que describa el desorden con respecto a la base de una observable donde el demonio opera —momentum o energía, por ejemplo—. Por lo que para este caso se utiliza la base de energía y la función entrópica de Shannon

$$\sigma_{\text{sh}} = - \sum_m \varrho_m \log \varrho_m, \quad (3.22a)$$

donde las probabilidades ϱ_m vendrán dadas por la superposición (integral) de la función de onda con la base del problema libre $\langle m, E_m^{(0)} | n' \rangle$ (eigenvectores conjugados), i.e.

$$\varrho_m = |\langle m, E_m^{(0)} | \Psi, t \rangle|^2 = \left| \sum_{n'} \langle m, E_m^{(0)} | n' \rangle \langle n' | \Psi, t \rangle \right|^2. \quad (3.22b)$$

Asimismo, la entropía total del sistema debe estimarse por separado, ya que la entropía de Shannon se aplica sólo a las partículas del interior del contenedor, pero no contempla la reacción del potencial $V(x, p)$, cuyos grados internos de libertad no están dinámicamente involucrados.³ Para ello, se estima el trabajo realizado por el potencial sobre la onda atrapada y viceversa. Además, utilizando el principio de extensividad se puede encontrar una cota inferior para la entropía total del sistema S_t como la combinación lineal de la entropía de la partícula S_p más la entropía del potencial Maxwelliano S_d , i.e. $\Delta S_t = \Delta S_p + \Delta S_d \stackrel{?}{\geq} 0$ con $\Delta S_p \leq 0$ ya que la entropía de las partículas debe disminuir. Además, se puede encontrar un límite inferior para el cambio de entropía del potencial Maxwelliano en términos del trabajo realizado por el potencial como

$$\Delta S_d = \int \frac{\delta' Q}{T} \sim \frac{\Delta Q}{\langle T \rangle} \geq \frac{1}{\langle T \rangle} \Delta V = (\text{const.}) \Delta V, \quad (3.23)$$

$$\therefore \Delta S_t \geq \Delta S_p + (\text{const.}) \Delta V, \quad (3.24)$$

entonces, al tener en cuenta el trabajo realizado por el potencial Maxwelliano su contribución debe compensar la reducción parcial de entropía.

³ Cabe mencionar que es posible definir una entropía promedio para un sistema que no está en equilibrio [105].

Proposición. Sea un contenedor de volumen v con n moles de un gas monoatómico a temperatura T . Después de un proceso de ordenamiento (demonio de Maxwell), el contenedor queda dividido por mitad en compartimento derecho (R) e izquierdo (L), por lo que el cambio de entropía

$$\Delta S_p \propto -\beta (U_R + U_L) \log 2 \quad (3.25)$$

donde β es la inversa de la temperatura y $U_{R,L}$ la energía interna lateral correspondiente.

Demostración. Típicamente, el cambio de entropía para un proceso $A \rightarrow B$ con gases ideales se plantea como (ver por ejemplo [106])

$$\Delta S = nC_v \log \left(\frac{T_B}{T_A} \right) + n\mathcal{R} \log \left(\frac{v_B}{v_A} \right). \quad (3.26a)$$

Sin embargo, como este proceso es a temperatura constante, la ecuación así planteada concluye que el proceso es reversible. Empero en las capacidades del demonio está el diferenciar al gas ideal según un momento de referencia, por lo que éste será capaz de ver dos especies de gas en distinta proporción (llámense $n_{R,L}$) además de la consabida distribución de Maxwell–Boltzmann, quedando la entropía inicial s_i como

$$s_i = n_R s_{0,R} + n_L s_{0,L} + n_R \mathcal{R} \log \left(\frac{v}{n_R} \right) + n_L \mathcal{R} \log \left(\frac{v}{n_L} \right) \quad (3.26b)$$

donde se usó la ec. de estado del gas ideal $Pv = n\mathcal{R}T$, y las constantes sobrantes se absorbieron en s_0 . Mientras que al término del proceso de ordenamiento la entropía en cada compartimento es

$$s_R = n_R s_{0,R} + n_R \mathcal{R} \log \left(\frac{v/2}{n_R} \right), \quad \& \quad s_L = n_L s_{0,L} + n_L \mathcal{R} \log \left(\frac{v/2}{n_L} \right). \quad (3.26c)$$

Por lo que el cambio de entropía

$$\Delta S_p = s_R + s_L - s_i = -(n_R + n_L) \mathcal{R} \log 2. \quad (3.26d)$$

Finalmente, al usar que la energía interna $U \propto Pv = n\mathcal{R}T$, se llega al resultado en término de las energías laterales $U_{R,L}$. ■

3.4. Análisis dinámico de condiciones iniciales simétricas

El análogo de Shannon de una distribución térmica de Boltzmann (entendida como la superposición del número de partículas en los estados fotónicos, ver por ejemplo Schleich [107]) puede utilizarse como una condición inicial adecuada para los estados de caja. La idea es controlar la evolución de dicho estado y su posterior ordenación. Entonces se tiene

$$\psi_0^B(\beta, n) = \sum_{q=1}^{N_{\max}} \exp\left(-\beta(q^2 - 1)\right) \sin \frac{q(n + N)\pi}{2N}, \quad (3.27a)$$

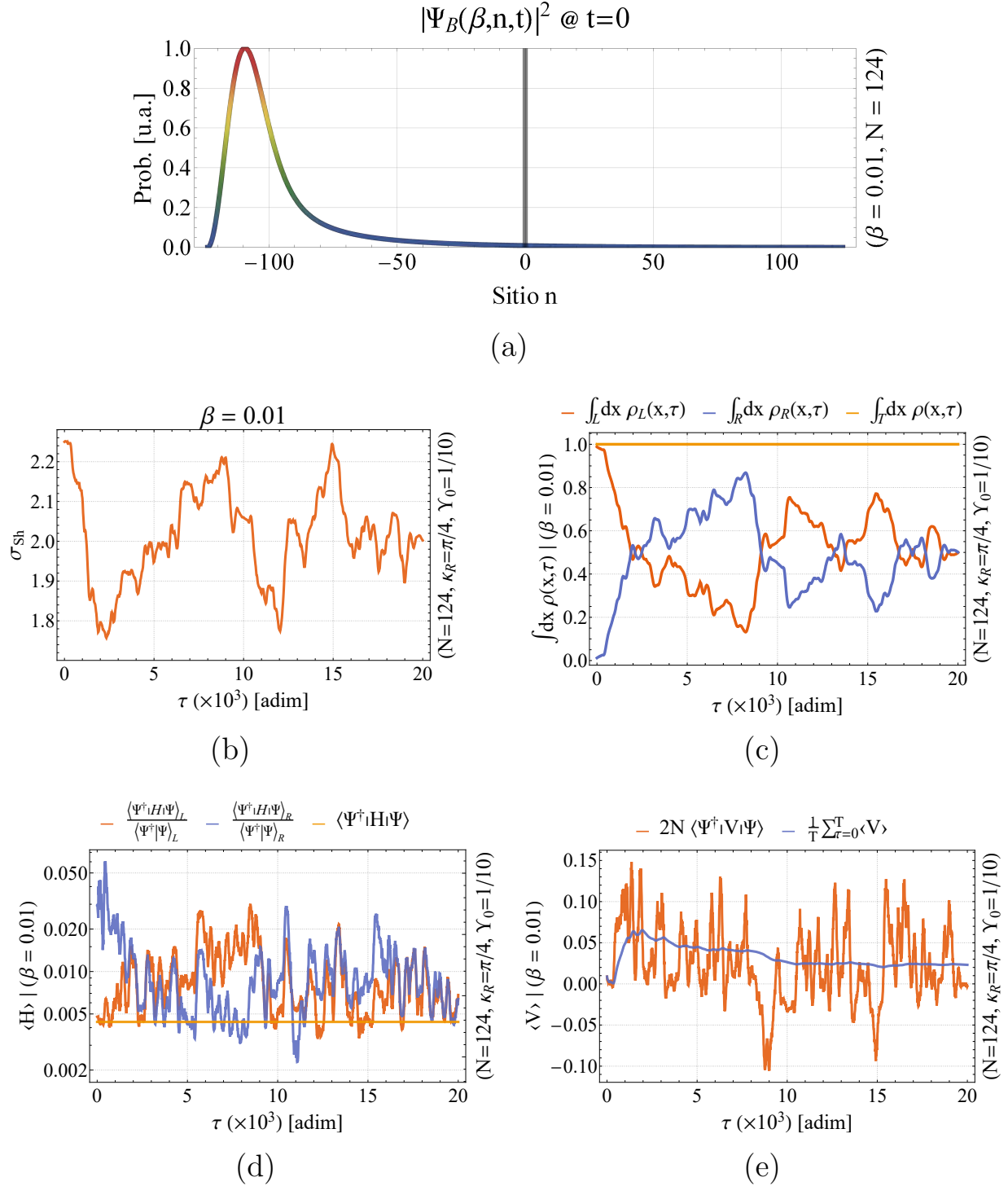


Figura 3.2: Evolución del demonio con $2N + 1 = 249$ sitios, momento de referencia $\kappa_R = \pi/4$, temperatura $\beta = 1/100$, e intensidad $\Upsilon_0 = 1/10$. a) Perfil de la función de onda inicial ($t = 0$), b) entropía donde se observa una disminución de ésta en $\tau (\times 10^{-3}) \sim 2$ o 12 , c) probabilidades laterales y d) energía interna media, para la parte izquierda (L, línea roja) o derecha (R, línea azul) del contenedor, e) energía potencial media que contribuye significativamente al balance energético, los valores negativos implican trabajo realizado por la onda sobre el potencial Maxwelliano, además, la línea azul indica la media temporal en el tiempo τ .

donde n es el lugar tal que $-N \leq n \leq N$ (el potencial Maxwelliano está en $n = 0$), $N_{\max} = 2N + 1$ es el número máximo de estados de caja q que tienen sentido en un sistema discretizado, y β es un parámetro de orden que correspondería a

$$\beta = \frac{E_0}{k_B T}, \quad \text{con} \quad E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (3.27b)$$

en termodinámica. Esta probabilidad se traslapa (integral) con las componentes de los vectores propios (conjugados) $\nu_m^{(n)*}$ de (3.19a)

$$\Psi_0^B(\beta, m) = \sum_{n=1}^{2N+1} \psi_0^B(\beta, n) \nu_m^{(n)*} \quad (3.27c)$$

obteniendo la función de onda en el tiempo reescalado $\tau (= \hbar t / 2ma^2$ [adim])

$$\Psi_B(\beta, n, \tau) = \sum_{m=1}^{2N+1} \exp(-i\tau \Xi_m) \Psi_0^B(\beta, m) \nu_m^{(n)}, \quad (3.27d)$$

donde $\Xi (= 2ma^2 E / \hbar^2$ [adim]) son las eigenenergías reescaladas de (3.19a).

En este caso, el tamaño del sistema es $2N + 1 = 249$ sitios, con el parámetro de escala $a = L / 2N$, la intensidad del potencial reescalado es $\Upsilon_0 = \frac{1}{10}$ ($= ma^2 V_0 / \hbar^2$ [adim]), el momento de referencia es $\kappa_R = \pi / 4$ & $\beta = 1 / 100$. Dada la función de onda inicial en la fig. 3.2a, la evolución de la entropía se muestra en la fig. 3.2b. Para tiempos relativamente cortos $\tau (\times 10^{-3}) \simeq 2$, se aprecia una disminución de la entropía de Shannon (3.22a). Luego, entre $\tau (\times 10^{-3}) \simeq 3$ y 9 la entropía aumenta, lo que se explica por la expansión natural de la onda en cada compartimento, para volver a disminuir en $\tau (\times 10^{-3}) \simeq 12$.

En la fig. 3.2c se observan asimetrías inducidas a medida que transcurre el tiempo, con efectos más drásticos que ocurren alrededor de $\tau (\times 10^{-3}) \simeq 8.5$ donde la diferencia entre las probabilidades (ocupación) izquierda y derecha es grande, además nótese que el efecto es recurrente para tiempos mayores. Asimismo, la entropía tiene un mínimo cuando la probabilidad tiene una tasa de cambio máxima con respecto al tiempo, lo que implica que el potencial Maxwelliano opera alcanzando un régimen cuasi estacionario, en el que no hay intercambio de densidades pero sí aumento entrópico.

En la fig. 3.2d se muestran los promedios laterales de la energía total en función del tiempo, donde se hallan asimetrías en ambos compartimentos. Inicialmente, la onda térmica está sesgada hacia la derecha, luego entre $\tau (\times 10^{-3}) = 0$ y 5 hay un régimen de expansión donde hay termalización. Para $\tau (\times 10^{-3}) > 5$ entra en juego la acción del potencial Maxwelliano y las ondas se segregan de nuevo. Estas curvas se comparan con las de la fig. 3.2e, donde efectivamente la energía potencial media se vuelve negativa para $\tau (\times 10^{-3}) > 5$, indicando que las partículas ejercen trabajo sobre el potencial Maxwelliano (véase un mínimo global de $\langle V \rangle$ en $\tau (\times 10^{-3}) \simeq 9$. De esta forma se concluye que el dispositivo funciona correctamente hasta que la expansión de onda permite una interacción importante con V en $\tau (\times 10^{-3}) = 5$ y después. Para tiempos muy grandes, se observa un régimen con un comportamiento de colapso y resurgimiento ruidoso.

En la fig. 3.3 se muestra un gráfico de densidad para (3.27d). El efecto Talbot induce un tiempo de recurrencia en la coordenada cuasi-temporal que obligará al sistema a repetir su comportamiento. En este caso, $\tau_{\text{Talbot}} \simeq 10 (\times 10^3)$, y para $\tau < \tau_{\text{Talbot}}$ hay una asimetría que muestra el

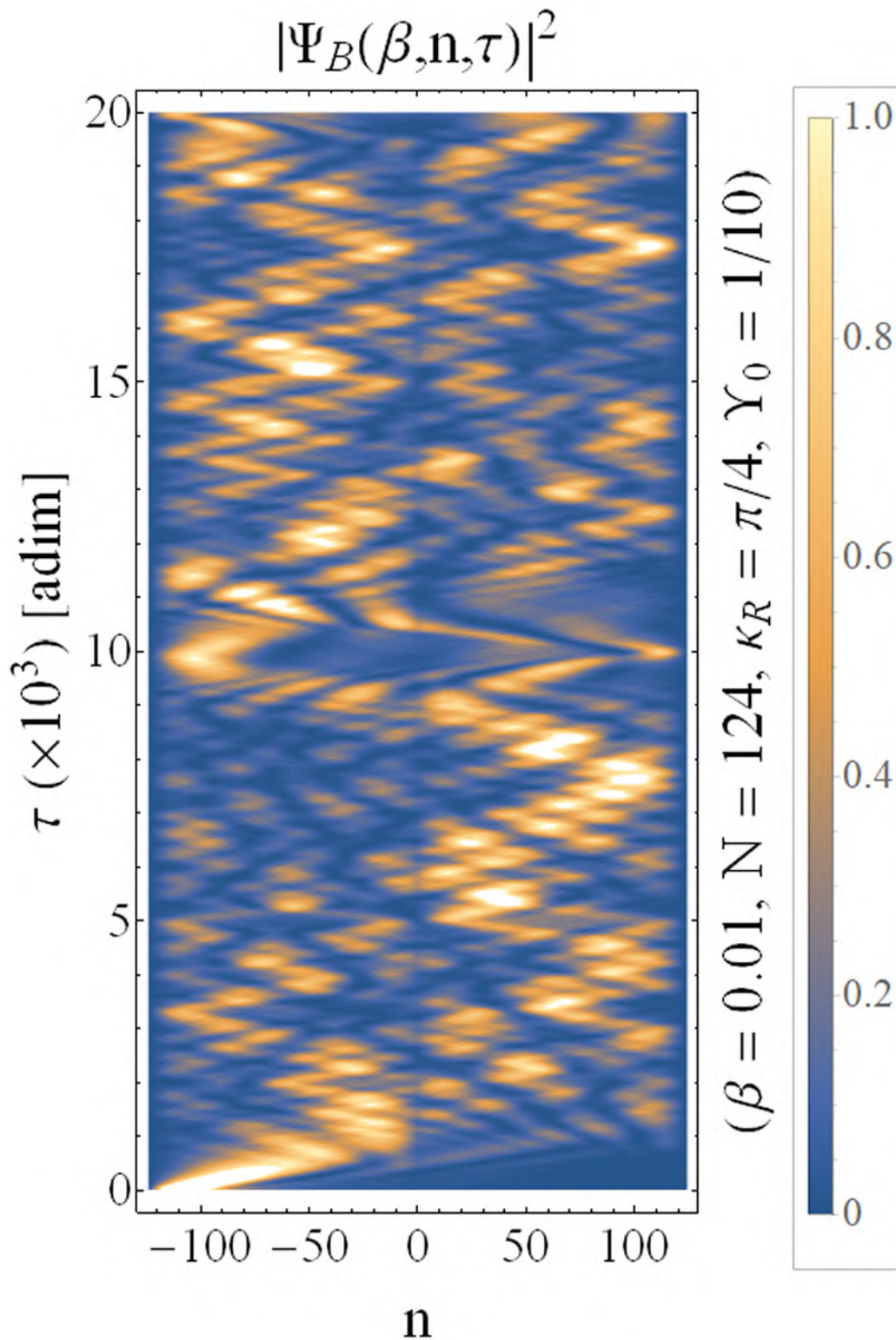


Figura 3.3: Evolución de un paquete de ondas tipo Boltzmann en el intervalo $-124 \leq n \leq 124$ (eje horizontal) en $\tau = 0$ (eje vertical), interactuando con un potencial Maxwelliano situado en $n = 0$. La coloración muestra la densidad de probabilidad, mostrando que para $5 < \tau(\times 10^{-3}) < 10$ el paquete de ondas está predominantemente en el lado derecho.

trabajo eficiente del potencial Maxwelliano, y posteriormente el comportamiento se invierte entre los compartimentos de la caja.

Por otro lado, la fig. 3.4 muestra un gráfico comparativo de entropías variando el valor de la temperatura. Se encuentra que los valores $1/2 > \beta > 1/200$ producen fluctuaciones significativas para una intensidad potencial $\Upsilon_0 = \frac{1}{10}$. Cabe destacar que para valores más altos de Υ_0 , el comportamiento general se desplaza hacia valores más grandes de beta. Para temperaturas muy altas, un sistema altamente desordenado en la base energética tiene tendencia a fluctuar alrededor de su valor entrópico original (comportamientos cuasi-estacionarios), esto implica que el efecto no es fuerte en estos casos. Se ha encontrado, a través de estos resultados numéricos, que el papel desempeñado por κ_R es parcialmente decisivo en la creación de asimetrías de caja en la evolución ya que la intensidad Υ_0 también es importante para valores pequeños de beta. Sin embargo, se debe subrayar que Υ_0 no puede tomarse como infinito, ya que todas las ondas quedan atrapadas en tal caso.

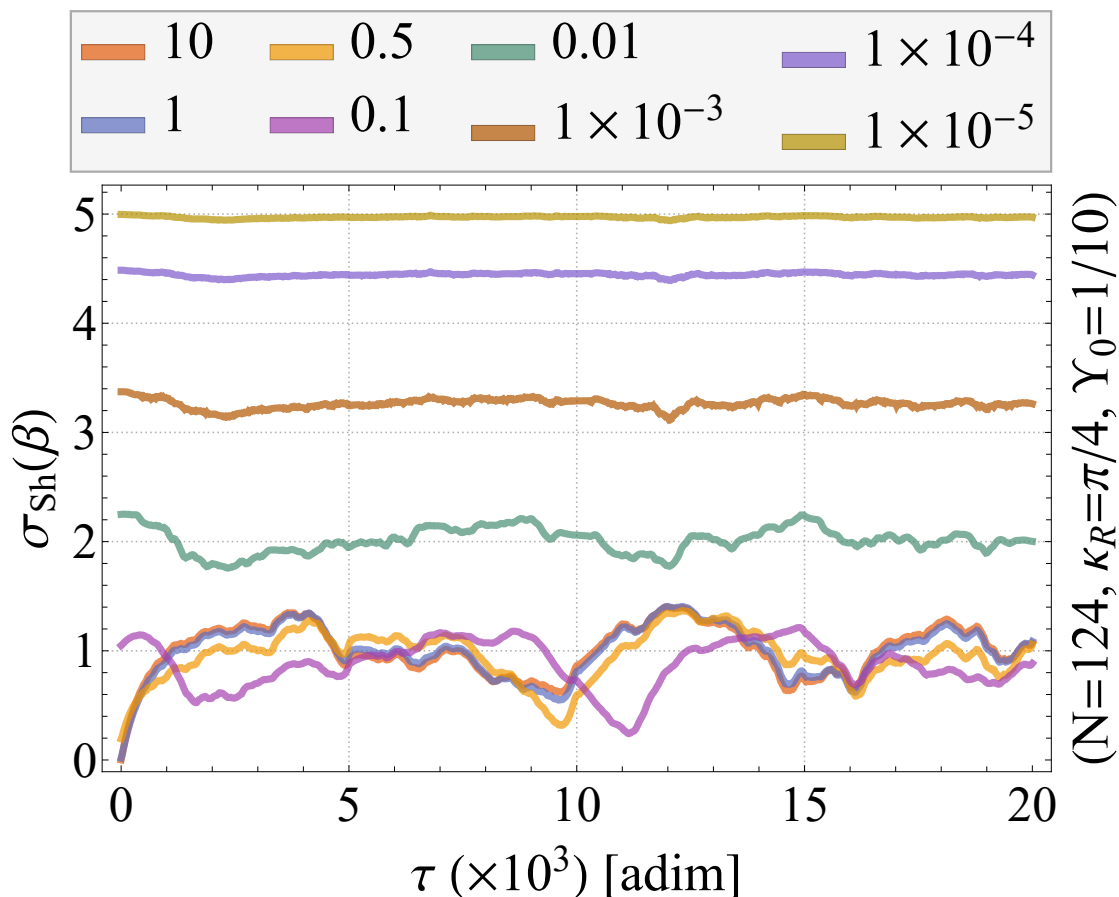


Figura 3.4: Gráfico comparativo de entropías al variar el valor de la temperatura β .

Otro sistema de interés es el que es uniforme, es decir, $\Psi_0^I = 1$, por lo que la probabilidad de que la partícula esté en cualquier estado de posición es igualmente probable (esto se denota

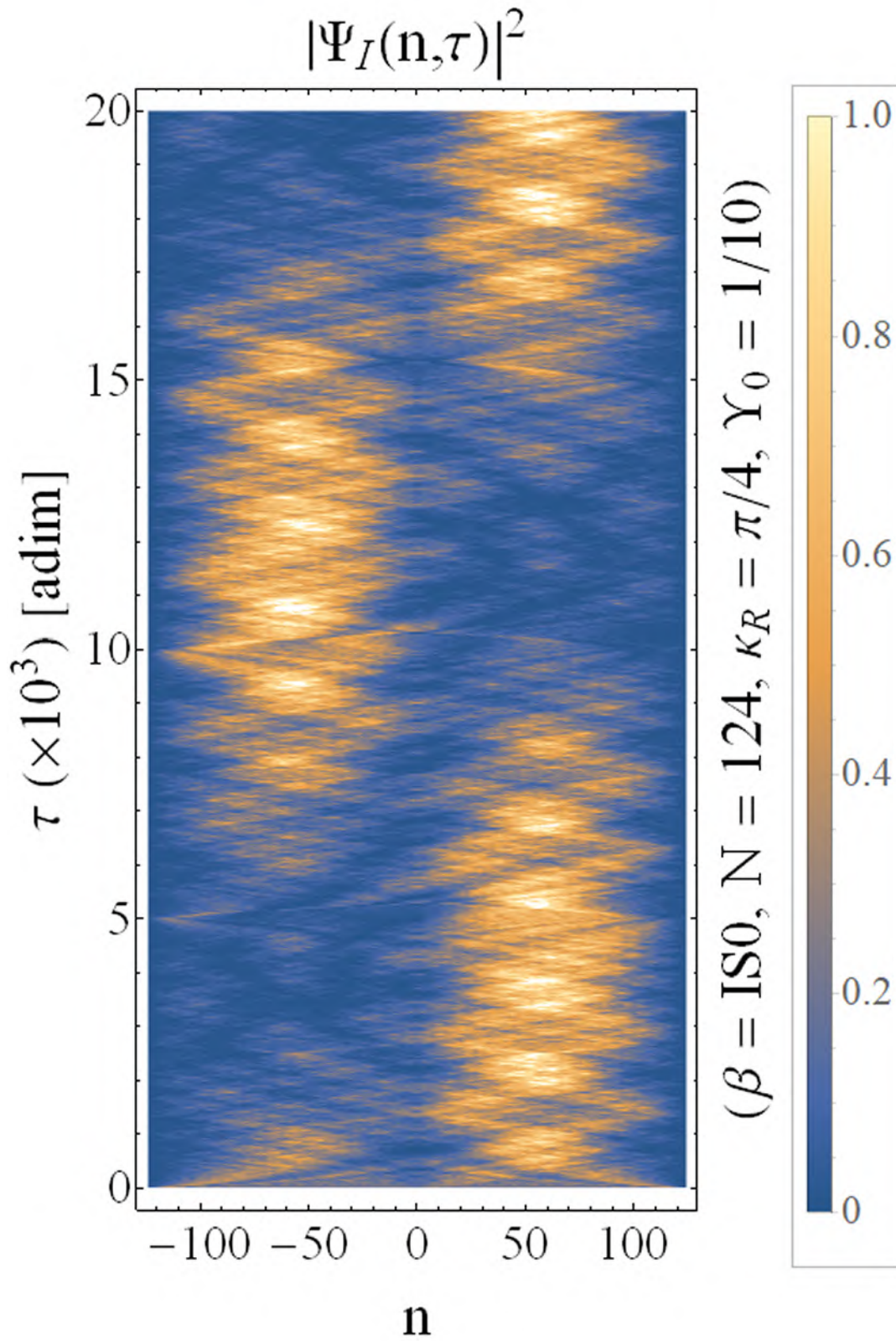


Figura 3.5: Evolución de un paquete de ondas isoespectral en el intervalo $-124 \leq n \leq 124$ (eje horizontal) en $\tau = 0$ (eje vertical), interactuando con un potencial Maxwelliano situado en $n = 0$.

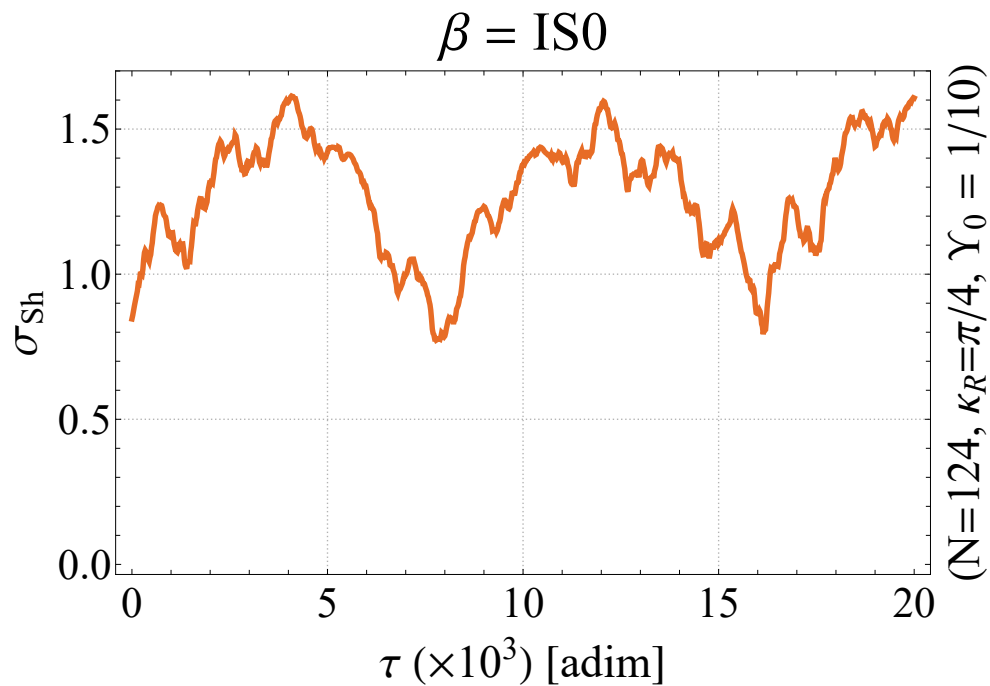


Figura 3.6: Entropía de un paquete de ondas isoespectral. Se observa una disminución de la entropía en $\tau(\times 10^{-3}) \sim 8$ y 16 .

por $\beta = \text{ISO}$). El gráfico de densidad de la función de onda $\Psi_I(x, \tau)$ que se muestra en la fig. 3.5 revela que la onda se distribuye asimétricamente debido a los términos que rompen la paridad explícitamente, como se esperaba. Asimismo, para este caso la evolución de la entropía se muestra en la fig. 3.6, donde se aprecia que el valor de la entropía oscila, alcanzando de nuevo un mínimo a medida que el sistema evoluciona.

Capítulo 4

Emulación de un demonio de Maxwell en un billar electromagnético

El demonio cuántico descrito en el capítulo anterior puede ser emulado en una cavidad electromagnética como en la fig. 4.1. Dicho demonio se modela como un dieléctrico $\epsilon(\mathbf{x}, \omega)$ de espesor b al medio de una cavidad conductora, y refleja la radiación en todo el plano yz . Por lo tanto, la función dieléctrica que simula la interacción debe tener una dependencia sólo en x —además de la dependencia en la frecuencia ω —. ¹

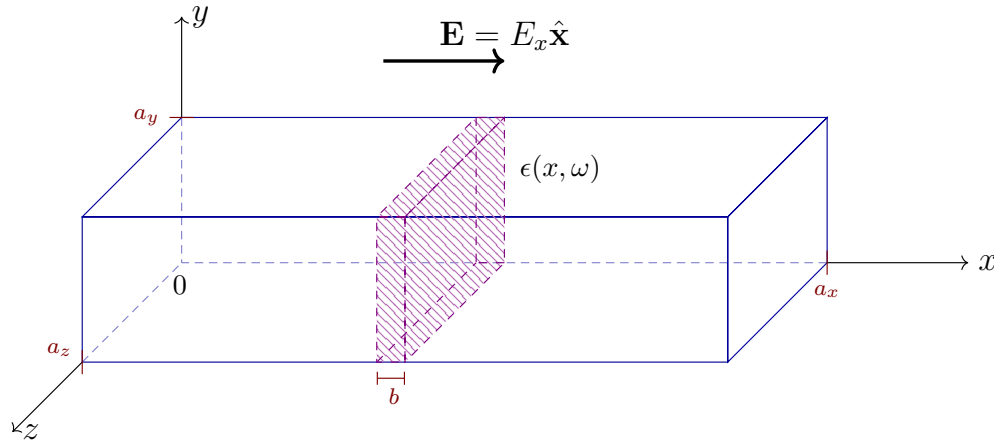


Figura 4.1: Cavidad rectangular con lados (a_x, a_y, a_z) donde se ha colocado al centro un dieléctrico con permitividad $\epsilon(x, \omega)$ y espesor b . El campo eléctrico va en la dirección \hat{x} y las líneas azules denotan placas de un buen conductor.

Proposición (Campo \mathbf{E} en guía de onda). *La descripción del campo eléctrico \mathbf{E} dentro de una guía de onda es*

$$\nabla^2 \mathbf{E} + \mu \epsilon(\mathbf{x}, \omega) \omega^2 \mathbf{E} + \nabla \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{x}, \omega)} \mathbf{E} \cdot \nabla \epsilon(\mathbf{x}, \omega) \right) = 0. \quad (4.1)$$

¹ Usando eV, las unidades son tales que $[\omega] = eV/\hbar$, $[\mathbf{E}] = eV^2/e\hbar c = c[\mathbf{B}]$, y $[\epsilon_0] = \hbar/e^2 c = 1/c^2 [\mu_0]$.

Demostración (Campo \mathbf{E} en guía de onda). De la ley de Gauß en un medio dieléctrico y suponiendo campos armónicos, e.g. $\tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{F} \exp(-i\omega t)$, se tiene

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \nabla \epsilon(\mathbf{x}, \omega) \cdot \mathbf{E} + \epsilon(\mathbf{x}, \omega) \nabla \cdot \mathbf{E} = 0,$$

mientras que de la ley de Faraday-Lenz y la de Ampère-Maxwell resulta

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu\mathbf{H} \quad \& \quad \nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\mathbf{D}, \quad (4.2)$$

respectivamente. Tomando el rotacional de la ley de Faraday-Lenz y sustituyendo las otras dos ecuaciones

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= i\omega\nabla\mu \times \mathbf{H} + i\mu\omega\nabla \times \mathbf{H} \\ \Rightarrow -\nabla \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{x}, \omega)} \mathbf{E} \cdot \nabla \epsilon(\mathbf{x}, \omega) \right) - \nabla^2 \mathbf{E} &= \frac{1}{\mu} \nabla\mu \times (\nabla \times \mathbf{E}) + \mu\epsilon(\mathbf{x}, \omega)\omega^2 \mathbf{E}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Finalmente, tomando una permeabilidad magnética (μ) constante se obtiene la ec.(4.1). Asimismo, multiplicando por $i\omega$ la ley de Ampère-Maxwell y usando la de Faraday-Lenz se obtiene la ecuación

$$\nabla \times (\mu^{-1} \nabla \times \mathbf{E}) = \epsilon(\mathbf{x}, \omega)\omega^2 \mathbf{E}, \quad (4.4)$$

que es la expresión típica utilizada en programas de simulación numérica.

Como el campo eléctrico sólo va en la dirección x , y utilizando la dependencia reducida de la función dieléctrica (i.e. es un problema 1D), se obtiene la siguiente simplificación de (4.1)

$$\partial_x^2 E_x + \mu_r \epsilon_r(x, \omega) \frac{\omega^2}{c^2} E_x + \partial_x (E_x \partial_x \log \epsilon_r(x, \omega)) = 0, \quad (4.5)$$

donde $\epsilon_r(x, \omega) = \epsilon(x, \omega)/\epsilon_0$ es la permitividad relativa y $\mu_r = \mu/\mu_0$ es la permeabilidad magnética relativa la cual será una constante a lo largo del procedimiento. La ecuación anterior permite soluciones separables $E_x(x, y, z) = \phi(y, z)\Psi(x)$, para la cual la parte perpendicular $\phi(y, z)$ satisface la ecuación de Helmholtz con dos condiciones de contorno diferentes en la superficie —Dirichlet para el campo paralelo, Neumann para el campo perpendicular en $x = 0, a_x$ —

$$\begin{aligned} \nabla_{\perp}^2 \phi(x, y) &= -\xi^2 \phi(x, y) \\ \text{o bien } \phi(x, y) &\propto \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a_y}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{a_z}\right) \quad | \quad n_y, n_z \in \mathbb{Z}^*. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Mientras que la parte longitudinal $\Psi(x)$ satisface

$$-\Psi''(x) + \xi^2 \Psi(x) - \mu_r \epsilon_r(x, \omega) \frac{\omega^2}{c^2} \Psi(x) - \partial_x (\Psi(x) \partial_x \log \epsilon_r(x, \omega)) = 0. \quad (4.7)$$

Esta última ecuación puede verse de dos formas: Dada la función $\epsilon_r(x, \omega)$, se puede determinar $\Psi(x)$ empleando las condiciones de contorno mencionadas, por lo que se determina el campo \mathbf{E}_x . Por otra parte, esta ecuación puede compararse con la teoría de Schrödinger para un demonio situado en la parte central de la caja, que obliga a considerar ciertas relaciones especiales para $\epsilon_r(x, \omega)$ en forma de una nueva ecuación diferencial.

4.1. De las energías a las frecuencias

Como se ha visto, la ruptura de la simetría izquierda-derecha producida por el demonio de Maxwell en la mecánica cuántica puede ser imitada por términos lineales en la derivada del campo incluidos en el operador de onda de Helmholtz (incidencia normal del campo en el dieléctrico). Sin embargo, la configuración mecánica original requería conocer el número de onda k , mientras que las funciones dieléctricas no-locales dependen de la frecuencia ω del campo generado (e.g. por una antena dentro de la cavidad). Es posible realizar una formulación demoníaca similar en entornos electromagnéticos pero esta vez con un selector de frecuencia incorporado en la función dieléctrica, y siempre que la asimetría esté determinada por el comportamiento de $\epsilon_r(x, \omega)$ bajo intercambio de paridad $x \rightarrow -x$. En particular, del potencial Maxwelliano (2.6) con (2.5b)

$$V(x, p) \mapsto V(x, \text{sgn}(p), E), \quad (4.8)$$

y como $\omega = E/\hbar$, $k = p/\hbar$, se tiene una función $V(x, \text{sgn}(k), \omega)$. El objetivo aquí es obtener una forma explícita de una función dieléctrica $\epsilon_r(x, \omega)$ de tal manera que la forma de la ecuación de Helmholtz coincida con la de la ecuación de Schrödinger con términos irreversibles (interacciones que rompan la simetría P y T).

Proposición (Ecuación diferencial demoníaca). *La ecuación diferencial no-lineal que describe al demonio de Maxwell (§ 2.1) como un dieléctrico $\epsilon_r(x, \omega)$ en una cavidad electromagnética (fig. 4.1) es*

$$\mu_r \left(\epsilon_r(x, \omega) - 1 \right) \frac{\omega^2}{c^2} + \frac{1}{2} \partial_x^2 \left(\log \epsilon_r(x, \omega) \right) = \frac{i\omega}{c} \cdot \frac{f_+(\omega)}{f_-(\omega)} \cdot \partial_x \left(\log \epsilon_r(x, \omega) \right), \quad (4.9)$$

donde $f_{\pm}(\omega)$

$$2f_{\pm}(\omega) = \Theta(\omega_R - \omega) \pm \Theta(\omega - \omega_R) \mp \Theta(\omega - \omega_{UV}). \quad (2.5c)$$

Demostración (Ecuación diferencial demoníaca). *Sustituyendo la versión hermitiana del potencial Maxwelliano (2.6) con (2.5b) en (2.8) se tiene*

$$\begin{aligned} \frac{2m}{\hbar^2} \left(\hat{V}(\hat{x}, \hat{p}) - E \right) &\mapsto \frac{1}{2} V_{act}(\hat{p}) V_B(\hat{x}) + \frac{1}{2} V_B(\hat{x}) V_{act}(\hat{p}) - \frac{2m}{\hbar^2} E \\ &= \frac{1}{2} \partial_x \frac{c f_-(\omega)}{i\omega} V_B(x) + \frac{1}{2} V_B(x) \frac{c f_-(\omega)}{i\omega} \partial_x + \frac{1}{2} \{ f_+(\omega), V_B(x) \} - \frac{2m}{\hbar^2} E, \end{aligned} \quad (4.10a)$$

donde $V_B(x)$ representa la parte espacial del potencial y además se utilizó la relación

$$|p| \text{sgn}(\hat{p}) = \hat{p} \mapsto -i\hbar \partial_x \quad (4.10b)$$

en acuerdo con el principio de correspondencia. Por otro lado, (4.7) se transforma en

$$\begin{aligned} -\Psi''(x) + \xi^2 \Psi(x) - \mu_r \epsilon_r(x, \omega) \frac{\omega^2}{c^2} \Psi(x) - \frac{1}{2} \left(\partial_x^2 \log \epsilon_r(x, \omega) \right) \Psi(x) \\ - \frac{1}{2} \left(\partial_x \left(\partial_x \log \epsilon_r(x, \omega) \right) + \left(\partial_x \log \epsilon_r(x, \omega) \right) \partial_x \right) \Psi(x) = 0, \end{aligned} \quad (4.10c)$$

al utilizar una relación del tipo $AB\Psi = \frac{1}{2}([A, B] + \{A, B\})\Psi$. Entonces, al comparar (4.10c) con la ec. de Schrödinger usando (4.10a) se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\{f_+(\omega), V_B(x)\} - \frac{2m}{\hbar^2}E &= \xi^2 - \mu_r \epsilon_r(x, \omega) \frac{\omega^2}{c^2} - \frac{1}{2}\partial_x^2(\log \epsilon_r(x, \omega)), \\ \mathcal{E} \quad V_B(\hat{x}) &= -\frac{i\omega}{cf_-(\omega)}\partial_x \log \epsilon_r(x, \omega). \end{aligned} \quad (4.10d)$$

Finalmente, separando la contribución del vacío y del medio (e.g. $\epsilon_r(x, \omega) = 1 + \varepsilon(x, \omega)$), se deduce (4.9), además

$$-\frac{2m}{\hbar^2}E = \xi^2 - \mu_r \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (4.10e)$$

y naturalmente, $\epsilon_r(x, \omega) \rightarrow \text{const.}$ cuando $\omega \geq \omega_{UV}$. ■

Las soluciones aceptables de la ecuación diferencial (4.9) para diversas condiciones iniciales conducen a diferentes tipos de encarnación que respetan las condiciones de causalidad de Kramers–Kronig (ver por ejemplo § 7.10 de Jackson [108]). Parte de la metodología consiste en resolver (4.7) utilizando mapeos vectoriales alrededor de puntos fijos, asimismo hay dos regímenes para la solución de la ecuación diferencial para la permitividad eléctrica, en un caso hay frecuencias por debajo del corte ultravioleta —donde el demonio opera— por lo que se debe comparar (4.7) con la ec. de Schrödinger con el potencial, mientras que para el segundo caso hay frecuencias por encima del corte ultravioleta —donde el demonio deja de funcionar— por lo que el potencial será cero en comparación.

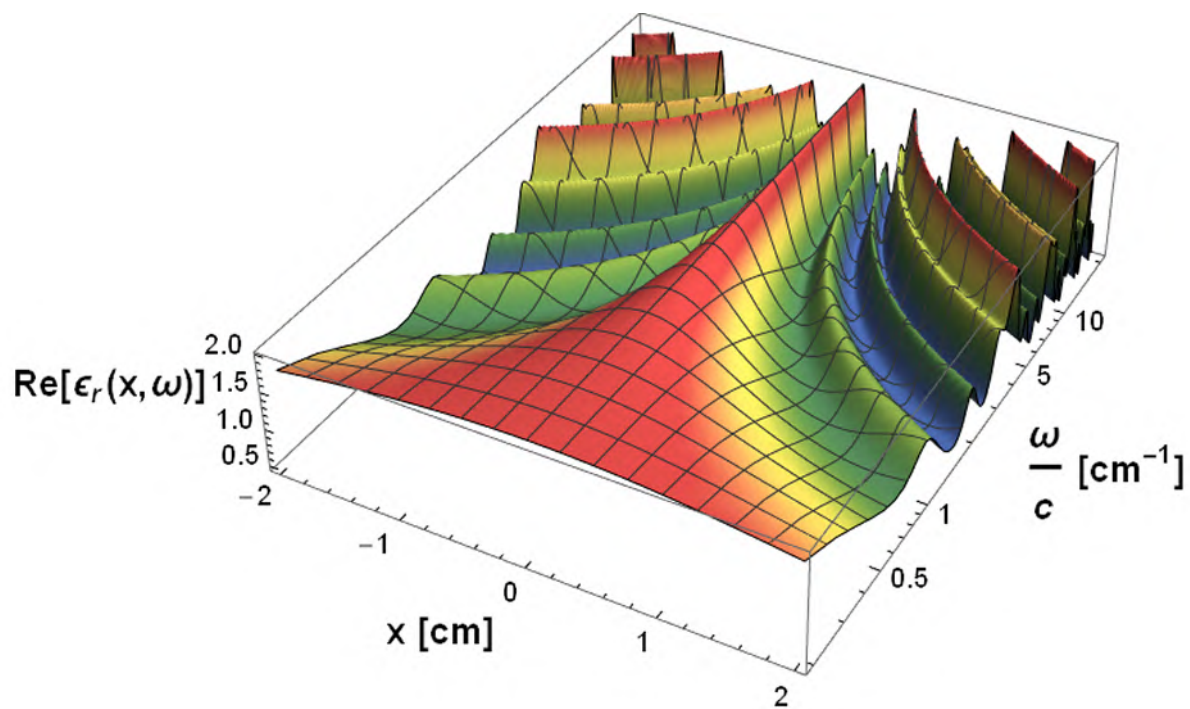
4.2. La función dieléctrica demoníaca como problema inverso

La ecuación diferencial (4.9) puede resolverse numéricamente con condiciones iniciales adecuadas (o valores de contorno). Asimismo, se restringe el intervalo de frecuencias a $\pi/50 < \omega/c < 20\pi$ dado en cm^{-1} ya que se plantean microondas. En particular, sea

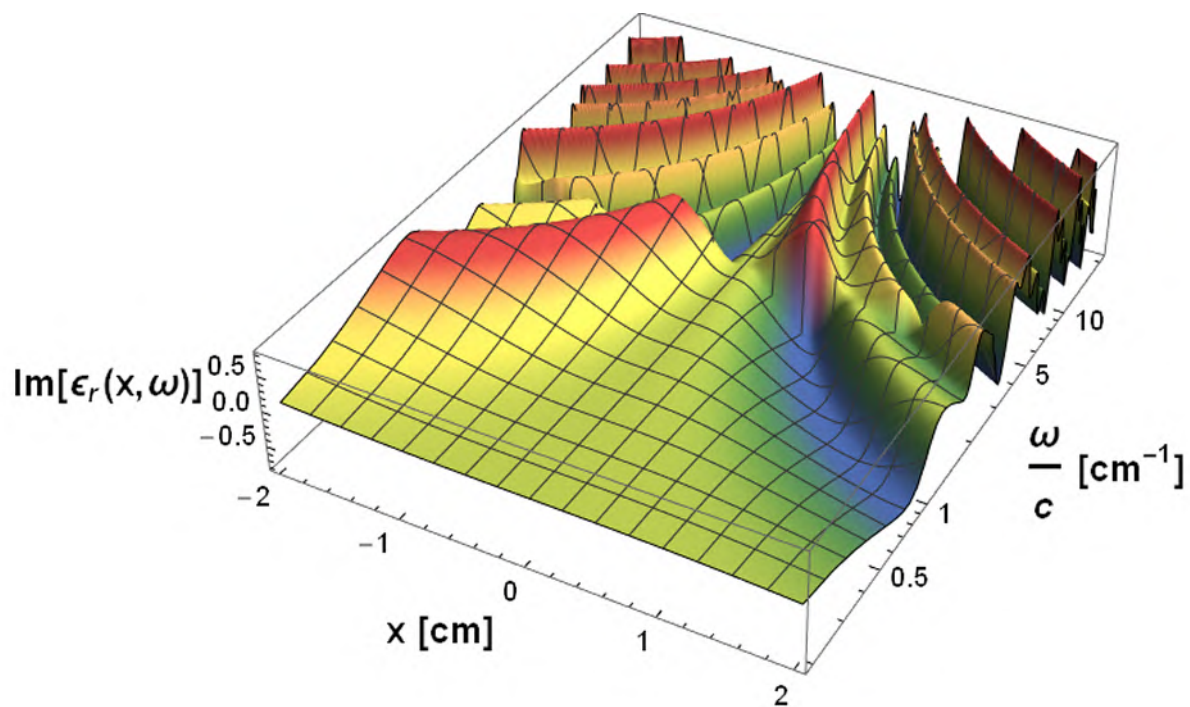
$$\epsilon_r(0, \omega) = 2, \quad \partial_x \epsilon_r(x, \omega)|_{x \rightarrow 0} = 0, \quad \text{y frecuencia de referencia } \omega_R = \pi. \quad (4.11)$$

En la fig. 4.2 se muestra la función dieléctrica $\epsilon_r(x, \omega)$ del demonio de Maxwell con las condiciones (4.11) y las siguientes propiedades (que serán útiles en el diseño del dieléctrico efectivo para la emulación del demonio de Maxwell en una cavidad electromagnética presentado en § 4.3):

- $\epsilon_r(x, \omega)$ es par en su parte real e impar en su parte imaginaria,
- ω_R provoca una reflexión en x de $\Im[\epsilon_r(x, \omega)]$,
- La función es autosimilar al aumentar la frecuencia y disminuir el grosor (o viceversa), lo que permite encontrar, por ejemplo, la distancia al primer mínimo de $\Re[\epsilon_r(x, \omega)]$ a modo de dieléctrico efectivo de grosor b (ver fig. 4.3).



(a)



(b)

Figura 4.2: Parte real (a) e imaginaria (b) de la solución a (4.9) en el intervalo $0.2 \leq \omega/c \leq 20$ para los valores (4.11). Nótese que la parte imaginaria, además de ser impar, sufre una reflexión en $\omega_R = \pi$.

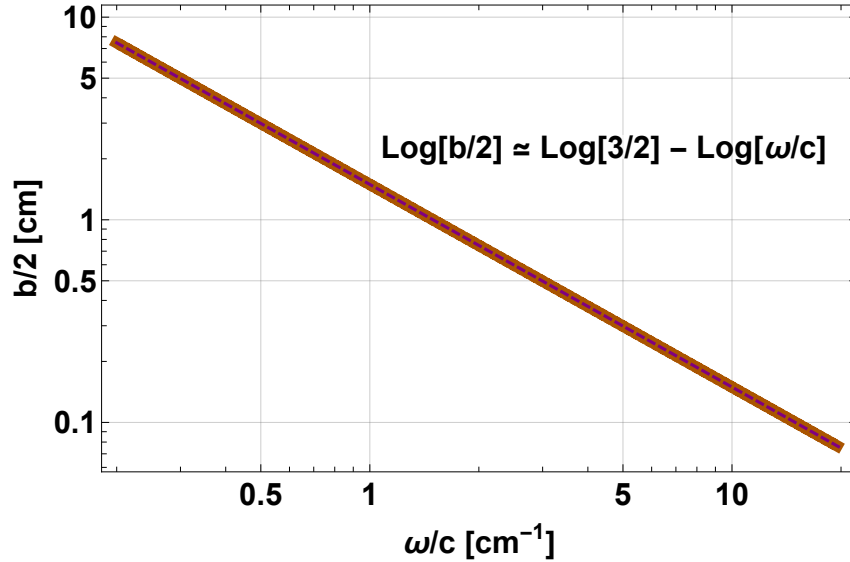


Figura 4.3: Distancia de $x = 0$ al primer mínimo de $\Re[\epsilon_r(x, \omega)]$ mostrando que el grosor $b \simeq 3c/\omega$ para los valores en (4.11).

Por otro lado, definiendo $u(x) = \log \epsilon_r(x, \omega)$ & $v(x) = \partial_x u(x)$, (4.9) puede escribirse como un sistema autónomo, a saber

$$\frac{d}{dx} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \\ \frac{2i\omega}{c} \frac{f_+(\omega)}{f_-(\omega)} v - 2\mu_r (e^u - 1) \frac{\omega^2}{c^2} \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

cuya gráfica (fig. 4.4) muestra que su parte real forma trayectorias cerradas, mientras que la parte imaginaria forma líneas de puntos fijos: estables para $\omega > \omega_R$ (a modo de sumidero) e inestables para $\omega < \omega_R$ (a modo de fuente).

Por último, la ecuación diferencial demoníaca también puede simplificarse mediante una aproximación armónica, lo que lleva a un resultado analítico para la función dieléctrica en un régimen donde $\epsilon(x, \omega)$ tiene pequeñas desviaciones de la unidad. Para ello, sea

$$\log \epsilon_r(x, \omega) = v(x) \exp \left(\frac{i\omega}{c} \cdot \frac{f_+(\omega)}{f_-(\omega)} x \right), \quad (4.13)$$

transformando (4.9) en

$$\partial_x^2 v(x) - \left(\frac{i\omega}{c} \cdot \frac{f_+(\omega)}{f_-(\omega)} \right)^2 v(x) = -2\mu_r \left(\exp \left(v(x) e^{\frac{i\omega}{c} \cdot \frac{f_+(\omega)}{f_-(\omega)} x} \right) - 1 \right) \frac{\omega^2}{c^2} e^{-\frac{i\omega}{c} \cdot \frac{f_+(\omega)}{f_-(\omega)} x}. \quad (4.14)$$

Expandiendo el término exponencial a primer orden, se obtiene que

$$v(x) \simeq v_0 \cos \left(x \sqrt{1 + 2\mu_r} \frac{\omega}{c} \right) + \frac{v'_0}{\sqrt{1 + 2\mu_r} \omega/c} \sin \left(x \sqrt{1 + 2\mu_r} \frac{\omega}{c} \right), \quad (4.15)$$

donde $v_0 = \log \epsilon_r(0, \omega)$ & $v'_0 = \left(\partial_x - \frac{i\omega}{c} \frac{f_+(\omega)}{f_-(\omega)} \right) \log \epsilon_r(x, \omega)|_{x=0}$ son las condiciones iniciales.

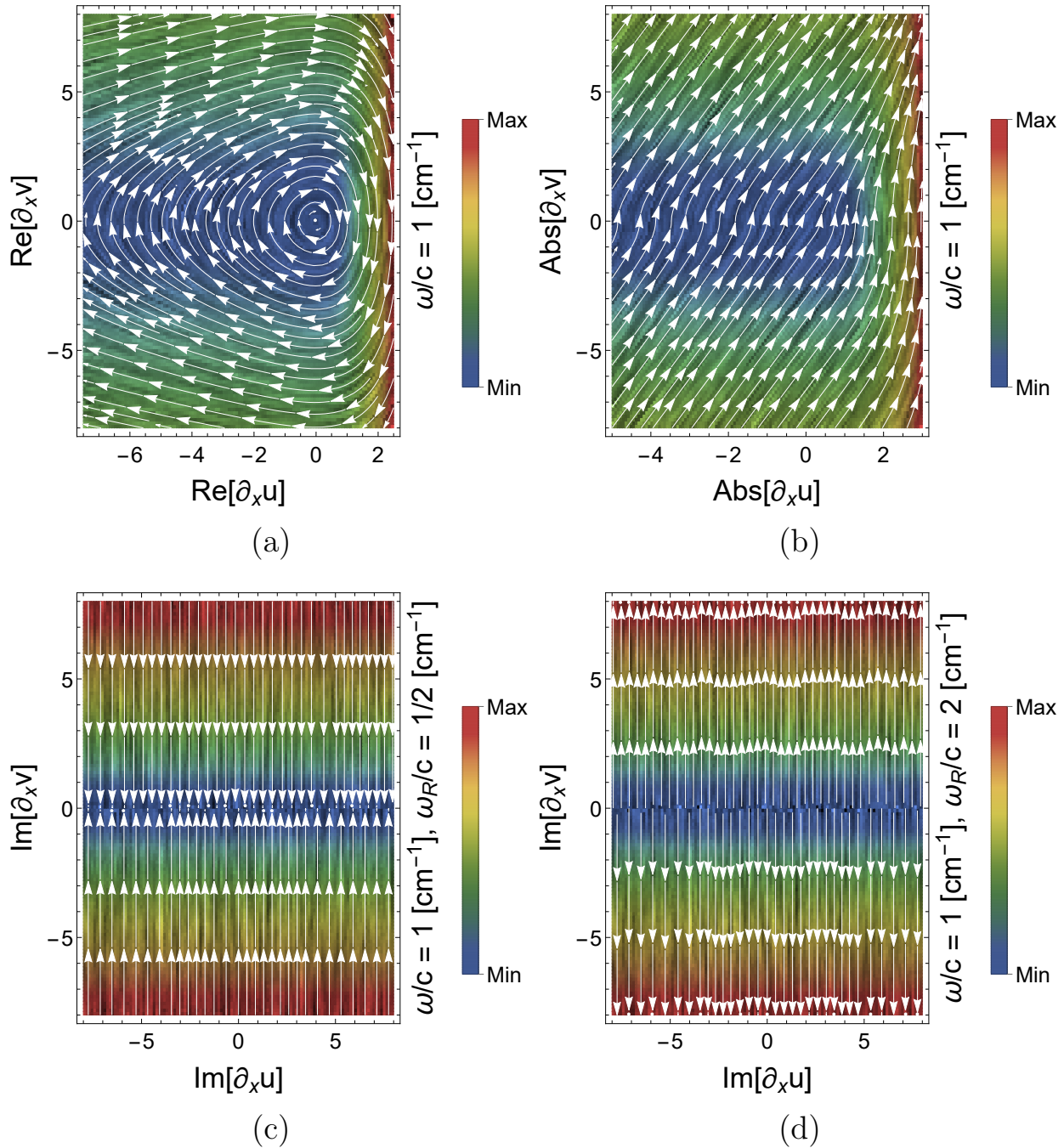


Figura 4.4: Estabilidad de la ecuación diferencial demoníaca para a) parte real formando trayectorias cerradas, b) absoluto de la función, mostrando una cizalladura en el espacio fase; además, en la parte imaginaria se forman líneas de puntos fijos c) estables para $\omega > \omega_R$ (a modo de sumidero) y d) inestables para $\omega < \omega_R$ (a modo de fuente).

4.3. Realización de un demonio dinámico electromagnético con placas dieléctricas

A continuación se procede a emular dinámicamente la propagación de una onda en el interior de una cavidad con funciones dieléctricas juiciosamente diseñadas. La función de onda del sistema descrito por (4.7) se descompone en modos propios, obteniéndose el problema de eigenvalores no-lineal (trascendental) de la forma

$$\mathcal{D}(\omega)\mathbf{x} = \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{x}. \quad (4.16)$$

Usando una base ortonormal para una cavidad metálica sobre el intervalo $x \in [0, L]$ con condiciones tipo Neumann en las paredes ($x = 0$ & $x = L$), i.e.

$$\phi_m(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(\kappa_m x), \quad \text{con} \quad \kappa_m = \frac{m\pi}{L}, \quad \& \quad m \in \mathbb{Z}^*, \quad (4.17)$$

se calculan los elementos de matriz $\langle m | \mathcal{D}(\omega) | n \rangle$ como²

$$\langle m | \mathcal{D}(\omega) | n \rangle = - \int dx \phi_m(x) \left\{ \partial_x^2 - \xi^2 + \mu_r \epsilon_r(x, \omega) \frac{\omega^2}{c^2} + \partial_x^2 \log \epsilon_r(x, \omega) + \partial_x \log \epsilon_r(x, \omega) \partial_x \right\} \phi_n(x). \quad (4.18)$$

Al centro de dicha cavidad inicialmente al vacío (ϵ_\emptyset) se añade un conjunto Ω de $2N + 1$ cortinas dieléctricas bicapa contiguas (ver fig. 4.5). La configuración tándem de las cortinas asegura que la parte real (imaginaria) de la función dieléctrica debe ser par (impar) de acuerdo a las soluciones encontradas para la permitividad dieléctrica del demonio (ver fig. 4.2). Por consiguiente, la parte derecha (izquierda) de la k -ésima cortina ϵ_k (ϵ_k^*) se modela según Lorentz-Drude como³

$$\epsilon_k(\omega, \Gamma_k) = 1 + \frac{\omega_{p_k}^2}{\omega_{0_k}^2 - \omega^2 - i\Gamma_k \omega} = \epsilon_k^*(\omega, -\Gamma_k), \quad (4.19)$$

cuyas constantes de resorte, de plasma y de amortiguamiento son ω_0 , ω_p & Γ , respectivamente. Por consiguiente, la función dieléctrica del sistema ($0 \leq x \leq L$) está dada por

$$\epsilon_r(x, \omega) = \Theta\left(x - a_{N+\frac{1}{2}}\right) + \Theta\left(a_{-N-\frac{1}{2}} - x\right) + \sum_{k=-N}^N \left\{ \epsilon_k(\omega, \Gamma_k) \cdot \Pi_k(x, a_k) + \epsilon_k^*(\omega, \Gamma_k^*) \cdot \Pi_k^*(x, a_k) \right\} \quad (4.20a)$$

donde Π_k es una ventana rectangular de grosor $b/2$ en la posición a_k —el centro de la bicapa—

$$\Pi_k(x, a_k) = \Theta(x - a_k) - \Theta\left(x - a_k - \frac{b}{2}\right) = \Pi_k^*(-x, -a_k), \quad \text{con} \quad a_k = \frac{L}{2} + kb. \quad (4.20b)$$

² A pesar de ser una matriz de dimensión infinita, es posible establecer una cota a la cantidad de modos propios requeridos en la simulación en vista de que los efectos de ω_p para frecuencias superiores al régimen metálico hacen irrelevante el uso de paquetes muy complejos (o frecuencias individuales demasiado altas) para el sistema de bicapas con grosor finito.

³ La notación \star indica a los elementos correspondientes a la parte izquierda de la bicapa, si bien el comportamiento de ϵ_k^* parece aludir al conjugado, la dependencia con ω no ha cambiado.

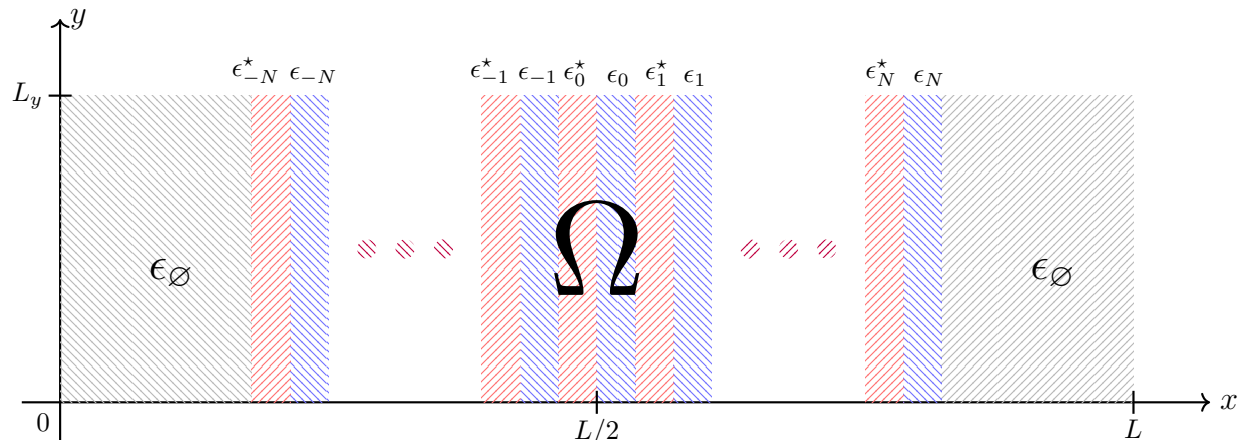


Figura 4.5: Sistema formado por un conjunto Ω de $2N + 1$ bicapas dieléctricas centradas en una cavidad metálica al vacío (ϵ_\emptyset) de longitud L , con condiciones tipo Neumann en las paredes ($x = 0$ & $x = L$). La configuración tándem de las cortinas asegura que la parte real (imaginaria) de la función dieléctrica debe ser par (impar) como en la fig. 4.2.

Cabe mencionar que la derivada del término $\log \epsilon_r$ se interpreta —según teoría de distribuciones— como

$$\partial_x \log \epsilon_r = \begin{cases} \sum_{k=-N}^N \left\{ \text{Log } \epsilon_k(\omega, \Gamma_k) \cdot \partial_x \Gamma_k(x, a_k) + \star \right\} & \text{si } x \in \Omega, \\ 0 & \text{si } x \notin \Omega, \end{cases} \quad (4.21)$$

donde Log representa la rama principal del logaritmo. Las integrales que se requieren para obtener los elementos de matriz son

$$I_1 = \int_0^L dx \phi_m(x) \partial_x^2 \phi_n(x) = -\kappa_n^2 \delta_{mn}, \quad (4.22a)$$

$$I_2 = \int_0^L dx \phi_m(x) \xi^2 \phi_n(x) = \delta_{mn} (1 + \delta_{n,0}) \xi^2, \quad \text{con} \quad \xi^2 = \left(\frac{n_y \pi}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{n_z \pi}{L_z} \right)^2 \quad (4.22b)$$

$$I_3(x \in \Omega) = \int_\Omega dx \phi_m(x) \epsilon_r(x, \omega) \phi_n(x) = \begin{cases} \frac{2}{(m^2 - n^2)\pi} \left\{ \epsilon_k \cdot f_{m,n}^{(-)}(a_{k+\frac{1}{2}}) - \epsilon_k^* \cdot f_{m,n}^{(-)}(a_{k-\frac{1}{2}}) - (\epsilon_k - \epsilon_k^*) \cdot f_{m,n}^{(-)}(a_k) \right\} & \text{si } m \neq n \\ \sum_{k=-N}^N \left\{ (\epsilon_k + \epsilon_k^*) \frac{b}{2L} + \frac{1}{n\pi} \left\{ \epsilon_k \cdot g_{n,n}(a_{k+\frac{1}{2}}) - \epsilon_k^* \cdot g_{n,n}(a_{k-\frac{1}{2}}) - (\epsilon_k - \epsilon_k^*) \cdot g_{n,n}(a_k) \right\} \right\} & \text{si } m = n \neq 0 \\ (\epsilon_k + \epsilon_k^*) \frac{b}{L} & \text{si } m = n = 0 \end{cases} \quad (4.22c)$$

donde

$$f_{m,n}^{(\pm)}(u) = m \sin(\kappa_m u) \cos(\kappa_n u) \pm n \sin(\kappa_n u) \cos(\kappa_m u), \quad \& \quad g_{m,n}(u) = \cos(\kappa_m u) \sin(\kappa_n u). \quad (4.22d)$$

$$I_3(x \notin \Omega) = \int_{\Omega^c} dx \phi_m(x) \epsilon_r(x, \omega) \phi_n(x) = \begin{cases} \frac{2}{(m^2 - n^2)\pi} \left\{ f_{m,n}^{(-)}\left(a_{-N-\frac{1}{2}}\right) - f_{m,n}^{(-)}\left(a_{N+\frac{1}{2}}\right) \right\} & \text{si } m \neq n \\ 1 - \left(N + \frac{1}{2}\right) \frac{2b}{L} + \frac{1}{n\pi} \left\{ g_{n,n}\left(a_{-N-\frac{1}{2}}\right) - g_{n,n}\left(a_{N+\frac{1}{2}}\right) \right\} & \text{si } m = n \neq 0 \\ 2 - 2\left(N + \frac{1}{2}\right) \frac{2b}{L} & \text{si } m = n = 0 \end{cases} \quad (4.22e)$$

$$I_4 = \int_0^L dx \phi_m(x) \partial_x^2 \log \epsilon_r(x, \omega) \phi_n(x) = -\frac{2\pi}{L^2} \sum_{k=-N}^N \left\{ \text{Log } \epsilon_k \cdot f_{m,n}^{(+)}\left(a_{k+\frac{1}{2}}\right) - \text{Log } \epsilon_k^* \cdot f_{m,n}^{(+)}\left(a_{k-\frac{1}{2}}\right) - (\text{Log } \epsilon_k - \text{Log } \epsilon_k^*) \cdot f_{m,n}^{(+)}(a_k) \right\}. \quad (4.22f)$$

$$I_5 = \int_0^L dx \phi_m(x) \partial_x \log \epsilon_r(x, \omega) \partial_x \phi_n(x) = +\frac{2n\pi}{L^2} \sum_{k=-N}^N \left\{ \text{Log } \epsilon_k \cdot g_{m,n}\left(a_{k+\frac{1}{2}}\right) - \text{Log } \epsilon_k^* \cdot g_{m,n}\left(a_{k-\frac{1}{2}}\right) - (\text{Log } \epsilon_k - \text{Log } \epsilon_k^*) \cdot g_{m,n}(a_k) \right\}. \quad (4.22g)$$

Cabe mencionar que si se requirieran cortinas especulares pero de diferentes grosores tales que $b_k = b_{-k}$, el término a_k en (4.20b) se modifica según

$$kb \mapsto B_k = \frac{\text{sgn}(k)}{2} \left(\sum_{l=-|k|}^{|k|} b_l - b_k \right) \quad (4.23a)$$

donde B_k representa la distancia desde el centro de la cortina central hasta el centro de la k -ésima cortina, por lo que

$$a_{k \pm \frac{1}{2}} \mapsto \frac{L}{2} + B_k \pm \frac{b_k}{2} \quad (4.23b)$$

en $I_3(x \in \Omega)$, I_4 e I_5 . Los términos con $\pm N \pm \frac{1}{2}$ en $I_3(x \notin \Omega)$ se siguen similarmente.

4.3.1. Eigensistema del haz matricial

Dado que los elementos de matriz de $\mathcal{D}(\omega)$ están conformados por una combinación lineal de funciones algebraicas (I_1, I_2, I_3) y trascendentes elementales (I_4, I_5), el eigensistema no puede calcularse de la forma típica. Como *primer paso* para resolver el problema completo de eigenvalores, se prescinde de la parte trascendental y se multiplica (4.16) por su mínimo común denominador (m.c.D.), obteniendo una matriz polinomial, la cual se puede escribir como un polinomio matricial en ω con coeficientes matriciales constantes \mathcal{M}_n , esto es

$$\begin{pmatrix} \sum_{n=0} c_n^{(0,0)} \omega^n & \cdots & \sum_{n=0} c_n^{(0,k)} \omega^n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{n=0} c_n^{(j,0)} \omega^n & \cdots & \sum_{n=0} c_n^{(j,k)} \omega^n \end{pmatrix} \Rightarrow \sum_{n=0} \begin{pmatrix} c_n^{(0,0)} & \cdots & c_n^{(0,k)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_n^{(j,0)} & \cdots & c_n^{(j,k)} \end{pmatrix} \omega^n = \sum_{n=0} \mathcal{M}_n \omega^n \quad (4.24)$$

donde $\{c_n^{(j,k)}\}$ son constantes. Dicho polinomio matricial se reorganiza para obtener el haz matricial

$$\mathcal{D}^\#(\omega)\mathbf{x} = \mathcal{M}_0\mathbf{x}_0 + \mathcal{M}_1\mathbf{x}_1 + \cdots + \mathcal{M}_n\mathbf{x}_n - \omega\mathcal{M}_{n+1}\mathbf{x}_n = 0, \quad \text{donde } \mathbf{x}_n = \omega^n\mathbf{x}. \quad (4.25a)$$

Nótese que el monomio de mayor grado en ω se ha aislado en una forma específica; para teoría matemática al respecto ver Markus [109] o Manfred Möller [110], por ejemplo. Posteriormente, se reorganiza el haz matricial en una dimensión superior según el grado del polinomio, a saber

$$\left(\begin{array}{c|ccc} \mathcal{M}_0 & \mathcal{M}_1 & \cdots & \mathcal{M}_n \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & \mathbb{I}_n \otimes \mathbb{I} & \\ 0 & & & \end{array} \right) \begin{pmatrix} \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{pmatrix} = \omega \left(\begin{array}{ccc|c} 0 & \cdots & 0 & \mathcal{M}_{n+1} \\ \hline & & & 0 \\ & & \mathbb{I}_n \otimes \mathbb{I} & \vdots \\ & & & 0 \end{array} \right) \begin{pmatrix} \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{pmatrix}, \quad (4.25b)$$

donde \mathbb{I} es la matriz identidad cuya dimensión —en principio infinita— está determinada por el n.º de modos (4.17) a tomar en cuenta en la simulación. Al multiplicar la ecuación anterior por la inversa de la matriz del lado derecho, el eigenproblema —algebraico en ω — queda linealizado como

$$\left(\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \vdots & & \mathbb{I}_n \otimes \mathbb{I} & \\ 0 & & & \\ \hline \mathcal{M}_{n+1}^{-1}\mathcal{M}_0 & \mathcal{M}_{n+1}^{-1}\mathcal{M}_1 & \cdots & \mathcal{M}_{n+1}^{-1}\mathcal{M}_n \end{array} \right) \begin{pmatrix} \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{pmatrix}. \quad (4.25c)$$

Asimismo, en el apéndice B se muestra una aplicación trivial del método.

Nótese que de las $(2N + 1)$ -bicas dieléctricas que conforman el sistema sólo $N + 1$ son diferentes, por ello el grado del polinomio matricial resultante será $\mathcal{G} = 2 + 4(N + 1)$. Con esto en cuenta, la linealización requerirá una de dimensión $\mathcal{D} = (m + 1)\mathcal{G}$, por lo que el lado izquierdo de

(4.25c) se puede escribir como⁴

$$\left[\mathbb{I}_{\mathcal{D}} + \sum_{n=0}^{\mathcal{G}-1} \left(\hat{\mathbf{e}}_{\mathcal{G}} \otimes \hat{\mathbf{e}}_{n+1} \right) \otimes M_{\mathcal{G}}^{-1} M_n \right] \begin{pmatrix} \mathbf{x}_0 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

donde $\mathbb{I}_{\mathcal{D}}$ es la matriz identidad de dimensión \mathcal{D} con la diagonal desplazada $(m+1)$ -columnas, $\{\hat{\mathbf{e}}_{n+1}\}$ es la base canónica —vectores con componente 1 en la posición $(n+1)$ y el resto 0—, y $\{M_n\}$ son los coeficientes matriciales asociados a ω^n .

Una vez realizado el procedimiento anterior, se hallan trivialmente los eigenvalores $\{\lambda_n\}$ de la parte algebraica (ver el algoritmo 1 para esta primera parte), los cuales aparecen en el plano inferior o superior a la recta real si se usan dieléctricos con absorción o emisión, respectivamente.⁵ Aunque es necesario tener en cuenta todos los eigenvalores —como en cualquier otra situación en el cálculo de las funciones de Green— en el caso de una configuración en tándem es imprescindible descartar aquellos con $\Im[\lambda_n] > 0$ para la convergencia de las integrales que incluyen el resolvente del operador de onda, evitando así las ganancias ausentes (no físicas) en la función de onda, por lo que el camino de integración en la definición de la función de Green es la habitual que encapsula los polos en el plano inferior (ver por ejemplo [99]).

Entrada: Matriz $D(\omega)$ parte algebraica.

Salida : Eigenvalores $\{\lambda_n\}$.

1 Inicio;

2 Calcular Haz matricial $D^{\#}(\omega)$; /* Multiplicar $D(\omega)$ por el m.c.D. */

3 Construir Problema de eigenvalores linealizado; /* Ec. (4.25c) */

4 Obtener Eigenvalores $\{\lambda_n\}$;

5 Eliminar λ_n si $\Im[\lambda_n] > 0$; /* Verificar falsos positivos */

6 Comprobar $\det D(\lambda_n) \rightarrow 0$; /* Usar suficiente precisión */

7 Fin

Algoritmo 1: Eigenproblema no-lineal parte I

Dado que la norma de Frobenius–Hilbert–Schmidt (euclidiana) de la parte algebraica de la matriz finita $\mathcal{D}(\omega)$ es mayor o similar a la de su parte trascendental, los eigenvalores del problema completo $\omega_n \simeq \lambda_n$; esto no es impedimento, ya que de acuerdo a teoría de perturbaciones, la función de onda se corrige en un orden de magnitud más grande respecto a la corrección de la energía a primer orden, además estas normas están relacionadas con el cuadrado de las amplitudes de los modos de la función de onda, así como sus traslapes (ver por ejemplo § 5.1 de Sakurai [113]). Por

⁴ Huelga decir que en el caso de usar cortinas de valores idénticos en la terna $\{\omega_p, \omega_k, \Gamma_k\}$ —independientemente del uso de grosores variables— el grado del polinomio \mathcal{G} se vería reducido en vista del uso del m.c.D. para construir el haz matricial.

⁵ Al usar una configuración tándem, los eigenvalores mostrarán una simetría respecto al eje de las abscisas. Cabe mencionar que en el caso de potenciales complejos (e.g. [111, 112]) dicha simetría de los eigenvalores en el plano complejo está ausente.

ello, como *segundo paso*, se busca una variación λ_ϵ en cada uno de los eigenvalores algebraicos encontrados anteriormente, por lo que ahora se resuelve

$$\left(\mathcal{D}(\omega + \lambda_\epsilon) - \frac{(\omega + \lambda_\epsilon)^2}{c^2} \right) \mathbf{x} = 0 \quad \forall \quad \omega = \{\lambda_n\}, \quad (4.27a)$$

donde el término entre paréntesis ha de convertirse en un haz matricial respecto a λ_ϵ al expandir en serie,⁶ a saber

$$\mathcal{D}^\#(\omega + \lambda_\epsilon) \mathbf{x} \simeq \left(\mathcal{D}^\#(\omega) + \lambda_\epsilon \partial_\omega \mathcal{D}^\#(\omega) + \mathcal{O}(\lambda_\epsilon^n) \right) \mathbf{x} = 0. \quad (4.27b)$$

Posteriormente, se toma el mínimo de las posibles correcciones —los eigenvalores del haz matricial en λ_ϵ —, por lo que λ_n se aproxima asintóticamente al eigenvalor del problema completo (ω_n) al realizar el proceso anterior iterativamente, i.e.

$$\det \left(\mathcal{D}(\omega_n) - \frac{\omega_n^2}{c^2} \mathbb{I} \right) \rightarrow 0, \quad \text{donde} \quad \omega_n = \lambda_n + \sum_k \min(\{\lambda_\epsilon^{(k)}\}_n) \quad (4.27c)$$

y $\min(\{\lambda_\epsilon^{(k)}\}_n)$ —en el entendido de que la comparación se hace por medio de sus valores absolutos— representa la corrección a la k -ésima iteración de λ_n . En casos fortuitos donde dicho mínimo sea de raíces complejas conjugadas, una de éstas generará un camino de convergencia hacia ω_n^* , pero no debe descartarse, basta tomar el conjugado para su uso posterior. Finalmente, los eigenvectores $\{\mathbf{v}_n\}$ correspondientes a la eigenfrecuencias $\{\omega_n\}$ se calculan obteniendo el espacio nulo de (4.16) evaluando en cada eigenfrecuencia, a saber

$$\left(\mathcal{D}(\omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \mathbb{I} \right) \Big|_{\omega=\{\omega_n\}} \cdot \mathbf{v}_n = 0. \quad (4.28)$$

Cabe mencionar que algunos \mathbf{v}_n podrían aparecer degenerados o resultar —supuestamente— en el trivial dependiendo de la precisión y tolerancia numérica al realizar los cálculos; para el primer caso basta tomar una combinación lineal normalizada de los vectores encontrados, mientras que para el segundo, es necesario verificar tal resultado⁷ antes de descartar la eigenfrecuencia correspondiente. El uso de una alta precisión al plantear el eigensistema en general evita la aparición de estos casos.

El método anteriormente descrito es arbitrariamente preciso (ver algoritmo 2 para esta segunda parte), de no hacer la expansión en serie aún sería posible utilizar parcialmente un haz matricial, ya que la matriz en (4.25c) contendrá términos con logaritmo, por lo que calcular su determinante seguirá siendo computacionalmente demandante,⁸ incluso para un número pequeño de modos y

⁶ Usualmente a primer orden basta, donde la serie de Taylor para la función dieléctrica es simplemente

$$\epsilon_k(\omega + \lambda_\epsilon) \stackrel{\text{Taylor}}{\simeq} \epsilon(\omega) - \frac{\lambda_\epsilon \cdot \Omega^\epsilon(\omega, 0) \omega_p^2}{\Omega(\omega)^2}, \quad \log \epsilon(\omega + \lambda_\epsilon) \stackrel{\text{Taylor}}{\simeq} \log \epsilon(\omega) - \frac{\lambda_\epsilon \cdot \Omega^\epsilon(\omega, 0) \omega_p^2}{\Omega(\omega)(\omega_p^2 + \Omega(\omega))},$$

con $\Omega(\omega) = \omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega$, & $\Omega^\epsilon(\omega, \lambda_\epsilon) = 2\omega + i\Gamma + \lambda_\epsilon$.

⁷ Por ejemplo, si el determinante no converge lo suficiente al límite establecido por estar la corrección cerca de la de resonancia, el espacio nulo daría el trivial a menos que se imponga una tolerancia numérica.

⁸ Podría intentarse —por ejemplo— el cálculo del determinante *á la* Dieudonné (complemento de Schur)[114], i.e.

$$\det \begin{pmatrix} \mathbb{A} & \mathbb{B} \\ \mathbb{C} & \mathbb{D} \end{pmatrix} = \begin{cases} \det(\mathbb{A} - \mathbb{B}\mathbb{D}^{-1}\mathbb{C}) \cdot \det \mathbb{D} & \text{si } \mathbb{D}^{-1} \text{ existe} \\ \det(\mathbb{D} - \mathbb{C}\mathbb{A}^{-1}\mathbb{B}) \cdot \det \mathbb{A} & \text{si } \mathbb{A}^{-1} \text{ existe} \end{cases}$$

donde $\mathbb{A}, \mathbb{B}, \mathbb{C}, \mathbb{D}$ son matrices de dimensión $p \times p$, $p \times q$, $q \times p$ & $q \times q$, respectivamente.

cortinas, además de que posteriormente se requieren métodos numéricos para hallar las raíces de la ecuación trascendental resultante.

Entrada: Matriz $D(\omega)$ completa, Eigenvalores $\{\lambda_n\}$.

Salida : Eigenvalores $\{\omega_n\}$, Eigenvectores $\{\mathbf{v}_n\}$.

1 **Inicio;**

2 **Evaluar** $D^\#(\lambda_n + \epsilon)$; /* Ec. (4.27a) */

3 **Haz matricial** $D^\#(\lambda_n + \epsilon)$; /* Ec. (4.27b) */

4 **Construir** Problema de eigenvalores linealizado en ϵ ;

5 **Obtener** Eigenvalores $\{\lambda_\epsilon\}$;

6 **Iterar** $\lambda_n \mapsto \lambda_n + \text{mín}(\{\lambda_\epsilon\})$;

7 **Comprobar** $\det(D(\omega) - \omega^2/c^2\mathbb{I}) \rightarrow 0$; /* Ec. (4.27c) */

8 **Calcular** Espacios nulos $\{\mathbf{v}_n\}$; /* Ec. (4.28) */

9 **Fin**

Algoritmo 2: Eigenproblema no-lineal parte II

4.3.2. Función de onda en el tiempo

Para reconstruir la función de onda considérese su descomposición en modos propios m de la cavidad para cada una de las eigenfrecuencias $\omega_n \in \mathbb{C}$ en la forma

$$\langle x|\Psi, t\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \langle x|m\rangle \langle m|\omega_n\rangle \langle \omega_n|\Psi_0\rangle \exp(-i\omega_n t) \quad (4.29a)$$

donde $\langle x|m\rangle = \phi_m(x) \in \mathbb{R}$ es la base, $\langle m|\omega_n\rangle = v_n^{(m)} \in \mathbb{C}$ es la m -ésima componente del eigenvector asociado al modo m de la eigenfrecuencia ω_n , y $\langle \omega_n|\Psi_0\rangle = c_n \in \mathbb{C}$ son constantes relacionadas al traslape de la base con la función de onda inicial $\Psi(x, 0)$, por lo que debe cumplirse que

$$\sum_n v_n^{(m)} c_n \propto \int dx \phi_m^*(x) \left\{ \Psi(x, t) + i\partial_t \Psi(x, t) \right\} \Big|_{t=0}. \quad (4.29b)$$

Sin pérdida de generalidad, multiplicando por $\phi_{m'}^*(x)$ en ambos lados de (4.29a) en $t = 0$ e integrando se tiene

$$\int dx \phi_{m'}^*(x) \Psi(x, t) \Big|_{t=0} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \int dx \phi_{m'}^*(x) \phi_m(x) v_n^{(m)} c_n = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \delta_{m'm} \left\{ v_n^{(m)} c_n \right\}, \quad (4.30a)$$

análogamente, de la derivada temporal de (4.29a)

$$\int dx \phi_{m'}^*(x) \partial_t \Psi(x, t) \Big|_{t=0} = -i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \delta_{m'm} \left\{ v_n^{(m)} \omega_n c_n \right\}. \quad (4.30b)$$

Sumando la parte real de las ecuaciones (4.30), i.e.

$$\int dx \phi_m^*(x) \left\{ \Re[\Psi(x, t)] + i\Re[\partial_t \Psi(x, t)] \right\} \Big|_{t=0} = \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \Re[v_n^{(m)} c_n] + i\Im[v_n^{(m)} \omega_n c_n] \right\}, \quad (4.31)$$

se observa que

- i) Si $\omega_n \in \mathbb{R}$ y $v_n^{(m)} = \delta_{m,n}$ la relación entre c_n y las condiciones iniciales es trivial,⁹ i.e.

$$\int dx \phi_m^*(x) \left\{ \Re[\Psi(x, t)] + \frac{i}{\omega_n} \Re[\partial_t \Psi(x, t)] \right\} \Big|_{t=0} = \Re[c_n] + i\Im[c_n]. \quad (4.32a)$$

- ii) Si $\omega_n \in \mathbb{C}$ y $v_n^{(m)} = \delta_{m,n}$ la parte imaginaria de ω_n alimenta la segunda condición inicial en conjunción con la primera, e.g.

$$\int dx \phi_m^*(x) \left\{ \Re[\Psi(x, t)] + i\Re[\partial_t \Psi(x, t)] \right\} \Big|_{t=0} = \Re[c_n] + i \left(\Re[\omega_n] \Im[c_n] + \Re[c_n] \Im[\omega_n] \right). \quad (4.32b)$$

- iii) Si $\omega_n \in \mathbb{C}$ y $v_n^{(m)} \neq \delta_{m,n}$, se apela a la causalidad del sistema que impone que para cada ω_n exista $-\omega_n^*$, por lo que la función de onda es real, quedando (4.31) como

$$\int dx \phi_m^*(x) \left\{ \Re[\Psi(x, t)] + i\Re[\partial_t \Psi(x, t)] \right\} \Big|_{t=0} = \sum_{n=1}^{\infty} c_n v_n^{(m)} \{1 + \omega_n\}. \quad (4.32c)$$

La relación (4.32c) se escribe en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_\infty \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1^{(1)} & v_2^{(1)} & \cdots & v_\infty^{(1)} \\ v_1^{(2)} & v_2^{(2)} & \cdots & v_\infty^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_1^{(\infty)} & v_2^{(\infty)} & \cdots & v_\infty^{(\infty)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + \omega_1 & & & 0 \\ & 1 + \omega_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 1 + \omega_\infty \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_\infty \end{pmatrix} \quad (4.33)$$

donde las b_m representan la integral de las condiciones iniciales (miembro izquierdo de (4.32c)), por lo que en una configuración acotada de modos es posible obtener los coeficientes c_n . Cabe recalcar que aún definiendo la 2da condición inicial como cero, la función de onda resultante tendrá una velocidad inicial autodefinida, que se puede interpretar como la coalescencia de dos ondas con dicha velocidad que al $t = 0$ forman la primera condición inicial.

Dicho esto, la descomposición en modos propios (4.29a) con $\partial_t \Phi(x, t)|_{t=0} = 0$ se expresa de forma matricial de la siguiente manera:

- i) La base se reescribe como un vector $\Phi(x)$ de entradas $\phi_n(x)$, i.e.

$$\phi_m(x) \mapsto \Phi_{m \times 1}(x) = \left(\phi_1(x), \phi_2(x), \dots, \phi_m(x) \right)^T. \quad (4.34a)$$

- ii) Los eigenvectores $v_n^{(m)}$ (espacios nulos) constituyen las filas de la matriz rectangular \mathbb{V} , a saber

$$v_n^{(m)} \mapsto \mathbb{V}_{n \times m} = \begin{pmatrix} v_1^{(1)} & v_1^{(2)} & \cdots & v_1^{(m)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_n^{(1)} & v_n^{(2)} & \cdots & v_n^{(m)} \end{pmatrix}. \quad (4.34b)$$

⁹ Como en el caso de la ec. de onda 1D (sin fuentes) donde la parte real e imaginaria de c_n corresponde directamente con la 1ra y 2da condición inicial, respectivamente. (Ver por ejemplo el caso en el apéndice B.)

Que dicha matriz sea rectangular recae en el hecho de que se eliminan los eigenvalores con $\Im[\lambda_n] > 0$. Nótese además que uno de los efectos de que esta matriz no sea simplemente δ_{nm} es que cada elemento de la base oscilará con cada una de las eigenfrecuencias.

iii) Las exponenciales $\exp(-i\omega_n t)$ conforman la matriz diagonal $\mathbb{E}(t)$, i.e.

$$\exp(-i\omega_n t) \mapsto \mathbb{E}_{n \times n}(t) = \text{diag}\left(\exp(-i\omega_1 t), \dots, \exp(-i\omega_n t)\right). \quad (4.34c)$$

iv) Las constantes c_n forman un covector \mathbf{c} , compuesto del producto del vector inicial \mathbf{b} —el traslape de la función de onda inicial con la base— con la inversa generalizada de la matriz de eigenvectores \mathbb{V}^+ , i.e.

$$c_n \mapsto \mathbf{c}_{1 \times n} = \mathbf{b}_{1 \times m} \mathbb{V}_{m \times n}^+, \quad \text{donde} \quad \mathbb{V}^+ = \left(\mathbb{V}^\dagger \mathbb{V}\right)^{-1} \mathbb{V}^\dagger. \quad (4.34d)$$

Mientras $\dim(\{\omega_n\})$ sea mayor o igual a la dimensión original del problema se puede asegurar la existencia y unicidad de la inversa. Ver por ejemplo Gregory and Krishnamurthy [115] o Ben-Israel and Greville [116].

Finalmente, la función de onda $\Psi(x, t)$ es

$$\Psi(x, t) = \mathbf{c}_{1 \times n} \mathbb{E}_{n \times n}(t) \mathbb{V}_{n \times m} \Phi_{m \times 1}(x) \in \mathbb{R}. \quad (4.34e)$$

Cabe mencionar que en vista de que para cada ω_n existe $-\omega_n^*$, se puede hacer el cálculo sólo con las eigenfrecuencias de un cuadrante —inferior, claro está— y al final tomar la parte real de la función de onda resultante.

4.3.3. Resultados de la emulación

Después de una exhaustiva exploración de parámetros, llámense: n.º de bicapas ($2N+1$), n.º de modos (4.17), longitud de caja (L), grosor de bicapa (b), frecuencia de plasma (ω_p), de resorte (ω_k) y de amortiguamiento (Γ_k), se encuentra que:

- i) El n.º de bicapas contiguas debe ser uno; utilizar una cantidad mayor de éstas no sólo no mejora la simulación, sino que puede comprometer el efecto buscado.
- ii) El grosor de las cortinas dieléctricas debe ser acorde al rango de frecuencias en el que se trabaja (ver fig. 4.3), lo que recae indirectamente en el n.º de modos.
- iii) El triunvirato de las constantes ω_p , ω_k & Γ_k debe satisfacer

$$\frac{\omega_p}{2} \simeq \omega_k > \Gamma_k > 0 \quad (4.35)$$

para una óptima observación del atrapamiento de la onda. La disminución de $\omega_k \rightarrow \omega_p/4$ reduce notablemente el efecto, además de que la onda empieza a quedarse atrapada dentro del dieléctrico. Mientras que si $\Gamma_k \rightarrow \omega_k$, el atrapamiento es factible, pero se pierde definición.

- iv) El tiempo de Talbot es proporcional a ω_p , mientras que Γ_k es inversamente proporcional al tiempo que tarda en observarse la asimetría.
- v) Si algún número de onda κ_m —de la base ϕ_m en (4.17)— es un múltiplo del inverso del grosor de la bicapa, el comportamiento suele distorsionarse por el atrapamiento de la onda en el dieléctrico. De ahí que fuere deseable la existencia de una delta dieléctrica demoniaca en analogía con lo visto en el cap. 2.

Valores particulares

Para efectos de la simulación,¹⁰ sea una bicapa de grosor $b = 7.5$ [mm], inmersa en una cavidad de longitud $L = 10$ [cm]. Para dicha configuración, el efecto buscado requiere que ω_p esté en el intervalo

$$\frac{\pi}{8} \lesssim \frac{\omega_p}{c} \lesssim \frac{13\pi}{8} \quad (4.36)$$

en conjunción con (4.35), por lo que en particular se elige

$$\omega_p = 2\omega_k = 4\Gamma_k = \frac{3\pi}{4}c, \quad (4.37)$$

mientras que ξ^2 en (4.22b) se toma tal que $n_y = n_z = 1$ & $L_y = L_z = L$. Usando 26 modos,¹¹ se tiene que $\dim(\{\lambda_n\})=156$, de los cuales 48 son reales y 108 son complejos (ver fig. 4.6a), y se cumple que para cada λ_n existe $-\lambda_n^*$, por lo que se procede a calcular la corrección a los eigenvalores (4.27b) usando únicamente los 51 eigenvalores de un cuadrante inferior, obteniéndose los $\{\omega_n\}$ en la fig. 4.6b. Las iteraciones necesarias para la convergencia asintótica se

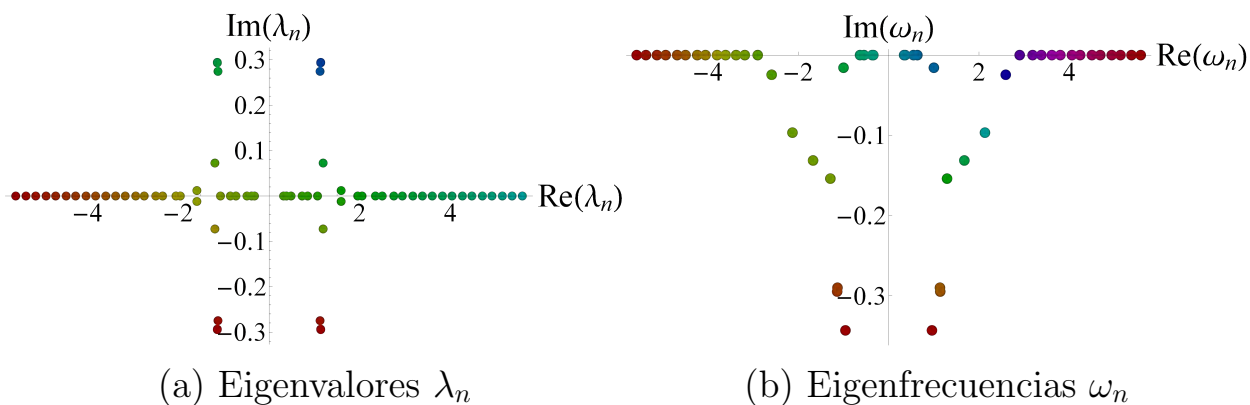


Figura 4.6: Eigensistema de una bicapa de grosor $b = 7.5$ mm con los valores en (4.37) y 26 modos (4.17) en una cavidad de $L = 10$ [cm]. Los valores que no pertenecen a los reales forman vecindades —eigenvalores muy cerca entre sí—, por lo que una buena precisión evita multiplicidades espurias, así como caer en la frecuencia de resonancia del dieléctrico.

¹⁰ Cálculos numéricos realizados en *Wolfram-Mathematica* usando un procesador *AMD-Ryzen 7600X@5.4GHz* y *RAM-DDR5 32GB@2400MHz*, paralelizando cuanto proceso fuera posible.

¹¹ Recordar que los modos (4.17) empiezan desde $m = 0$.

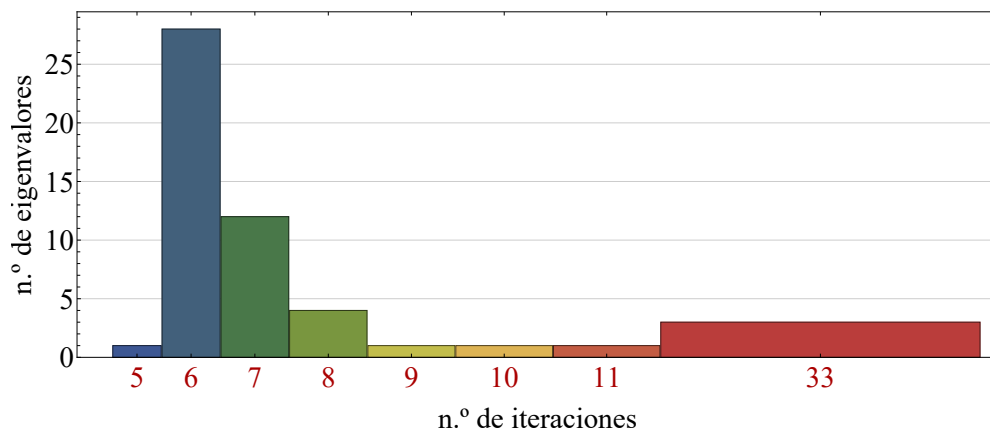
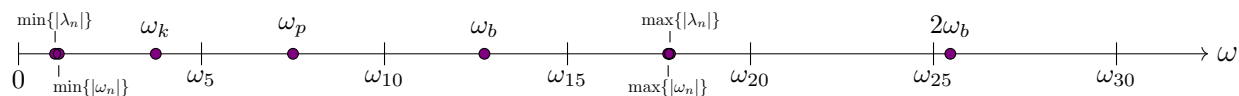


Figura 4.7: Estadística del n.º de iteraciones requeridas para la convergencia asintótica de $\{\omega_n\}$.

muestran en la fig. 4.7 tomando como cota que $\det(\mathcal{D}(\omega_n) - \omega_n^2/c^2) < 10^{-16}$ ó 2^5 iteraciones, usando —al menos— 2^{10} dígitos de precisión en los eigenvalores para la correcta convergencia del determinante, así como disminuir el n.º de iteraciones necesarias. Posteriormente, se obtienen todos los espacios nulos usando una tolerancia de 10^{-48} , asegurando el hallazgo de todos los espacios nulos.¹² A modo de comparación cualitativa, la distribución de frecuencias es



donde ω_m son las frecuencias de caja —suponiendo la relación de dispersión típica $\kappa_m = \omega_m/c$ en (4.17), no confundir con las eigenfrecuencias ω_n —, ω_b es la frecuencia asociada al grosor b (fig. 4.3); asimismo, se incluye (4.37) además del máximo y mínimo del valor absoluto de los eigenvalores. Finalmente, para el caso de una onda uniformemente distribuida, la condición inicial \mathbf{b} en (4.34d) es

$$\mathbf{b} = (1, 0, \dots, 0). \quad (4.38)$$

El sistema evoluciona como se muestra en los siguientes gráficos: a tiempos cortos (fig. 4.8) se tienen asimetrías desde el inicio de la evolución, así como una acumulación notable de la onda en el lado izquierdo de la cavidad a partir de $\tau \sim 8$ [cm], así mismo en la fig. 4.9 se muestra una clara asimetría en la función de onda en $\tau = ct = 7$ [cm] (o $t = 233$ [ps]). A tiempos más prolongados (fig. 4.10) se muestran varias ventanas de asimetría predominantemente del lado izquierdo de la cavidad, además del colapso y resurgimiento de la onda. Así mismo, en la fig. 4.11 se nota que el fenómeno anterior constituye un efecto transitorio ya que éste se invierte hacia el otro lado de la cavidad al seguir evolucionando el sistema. Posteriormente en la fig. 4.12 se muestra un comportamiento oscilatorio de la onda entre los lados de la cavidad, el cual es un claro reminiscente del comportamiento del demonio de Maxwell estudiado en el cap. 3, en especial para el caso mostrado en la fig. 3.5.

¹² Como se mencionó anteriormente, pueden existir configuraciones del sistema con frecuencias cuyo espacio nulo sea realmente el trivial y la frecuencia debe descartarse.

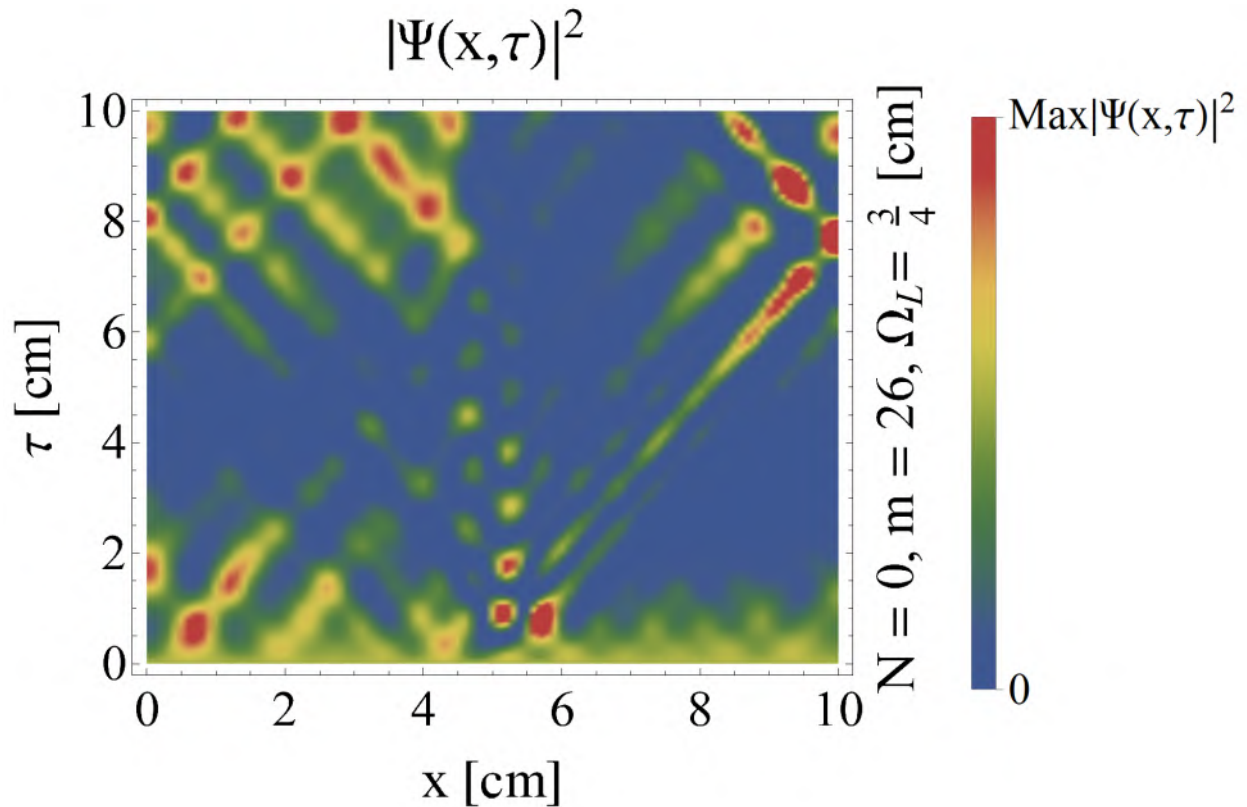


Figura 4.8: Gráfico de densidad de la cavidad resonante a tiempos cortos, cuya disposición se muestra en la fig. 4.9. Nótese la existencia de asimetrías desde el inicio de la evolución, cabe recordar que el tiempo que tarda en mostrarse la primera —e insigne— asimetría a partir de $\tau \sim 8$ [cm] varía inversamente con valor de la constante Γ_k .

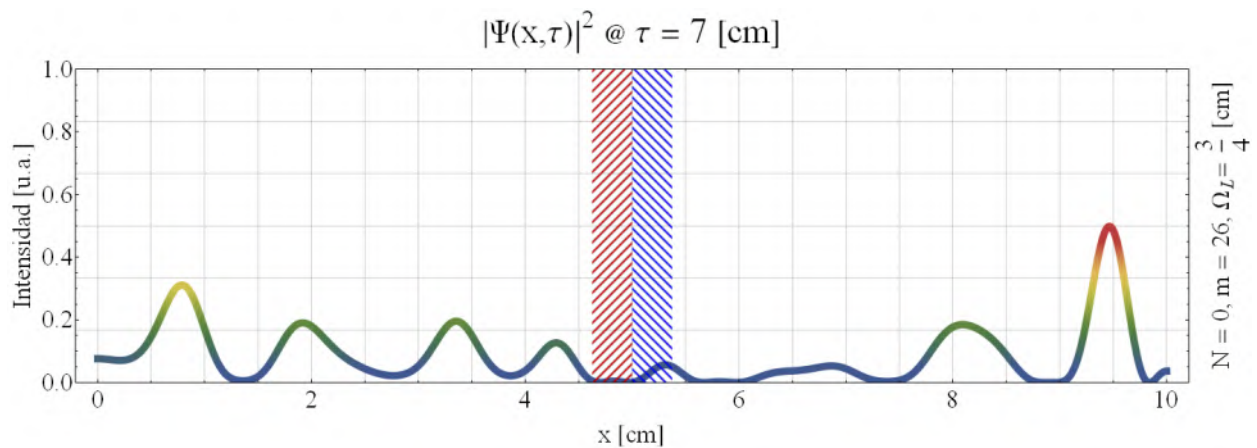


Figura 4.9: Perfil de la función de onda en $\tau = 7$ [cm] con 26 modos. El sistema se compone de una bicapa dieléctrica con valores (4.37) que ocupa un grosor $\Omega_L = 3/4$ [cm] y está centrada en una cavidad de $L = 10$ [cm].

Cabe mencionar que el valor del grosor de la bicapa es determinante en la formación y nitidez del fenómeno. En general, una pequeña variación en el grosor recae directa y proporcionalmente en el tiempo de Talbot —dilata o contrae las ventanas de asimetría en la gráficas de densidad—, como se puede apreciar en las gráficas de densidad del apéndice C (fig. C.1). Similarmente, en la tabla 4.1 se muestra una relación aproximada del grosor b respecto al n.º de modos, tal que se muestre un comportamiento afín en la evolución del sistema cuyo tiempo de retención de la onda en un lado de la caja sea ~ 80 [cm] (ver figuras C.2); esto además permite comparar cualitativamente con el caso particular en la fig. 4.12 donde dicho tiempo de retención es ~ 130 [cm] sólo por tener una cortina casi un 15 % más gruesa. Finalmente, en la fig. 4.13a se muestra el caso con una cortina con $b = 0.1$ [mm], indicando que si bien las asimetrías aún son posibles, no son precisamente notorias como en los casos anteriores; mientras que de la fig. 4.13b se desprende que la inclusión del término con ∇ en (4.1) es determinante en la formación de asimetrías fehacientes durante la evolución del sistema (comparar con fig. 4.12).

n.º de modos	16	21	26	31	36	41	46	51	56
Grosor b (aprox.)	$\frac{24}{25}$	$\frac{19}{25}$	$\frac{16}{25}$	$\frac{27}{50}$	$\frac{12}{25}$	$\frac{21}{50}$	$\frac{19}{50}$	$\frac{17}{50}$	$\frac{8}{25}$

Tabla 4.1: Tabla de n.º de modos respecto al grosor de la bicapa tal que el tiempo de asimetría lateral es ~ 80 [cm], usando los valores en (4.37) en una cavidad de $L = 10$ [cm]. Haciendo el ajuste de curva correspondiente, se encuentra que $b \sim 10.9978/m^{0.87775}$, donde m se entiende como el n.º de modos.

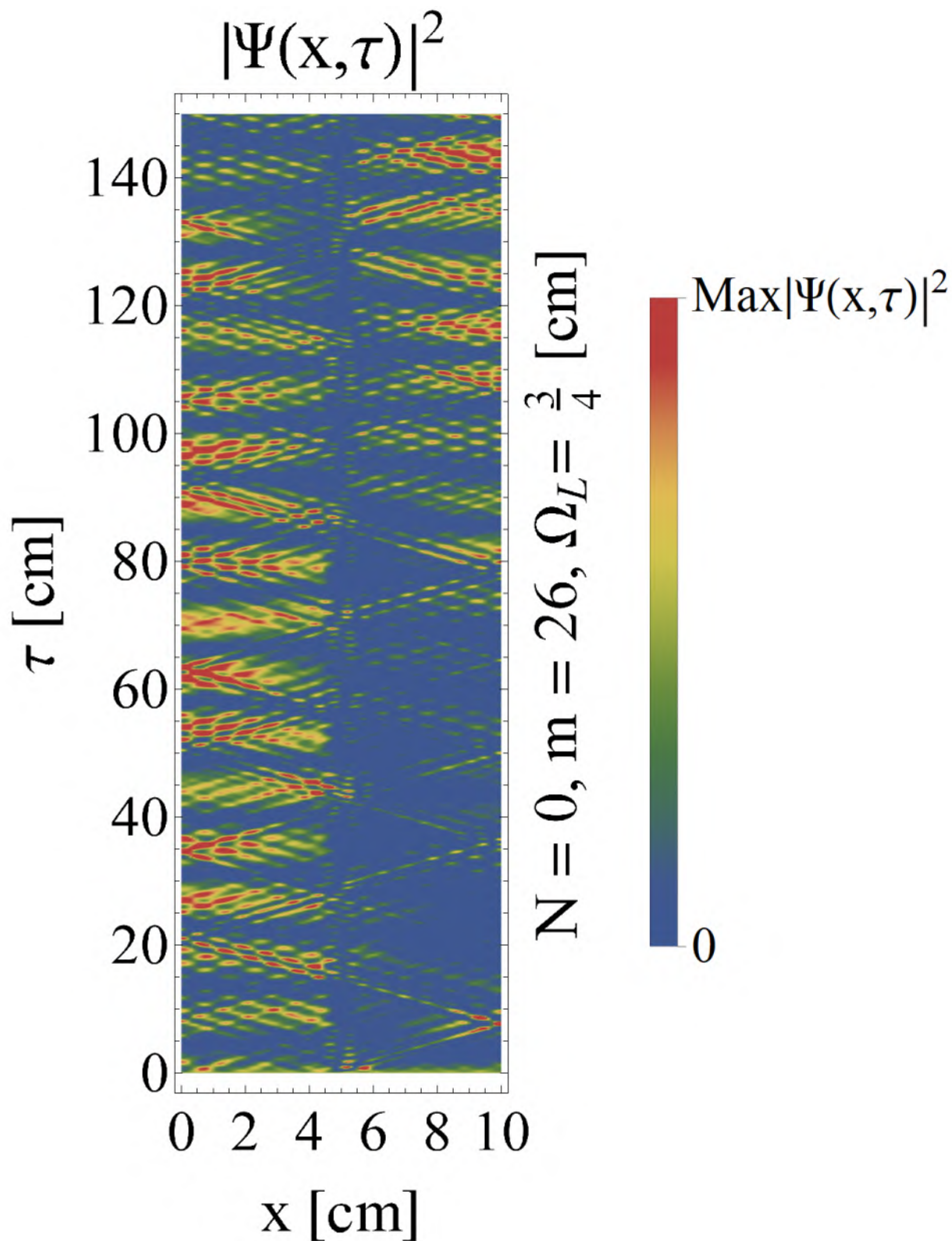


Figura 4.10: Gráfico de densidad de la cavidad resonante en $0 < \tau < 150$, cuya disposición se muestra en la fig. 4.9. Nótese el atrapamiento de la onda predominantemente del lado izquierdo de la caja.

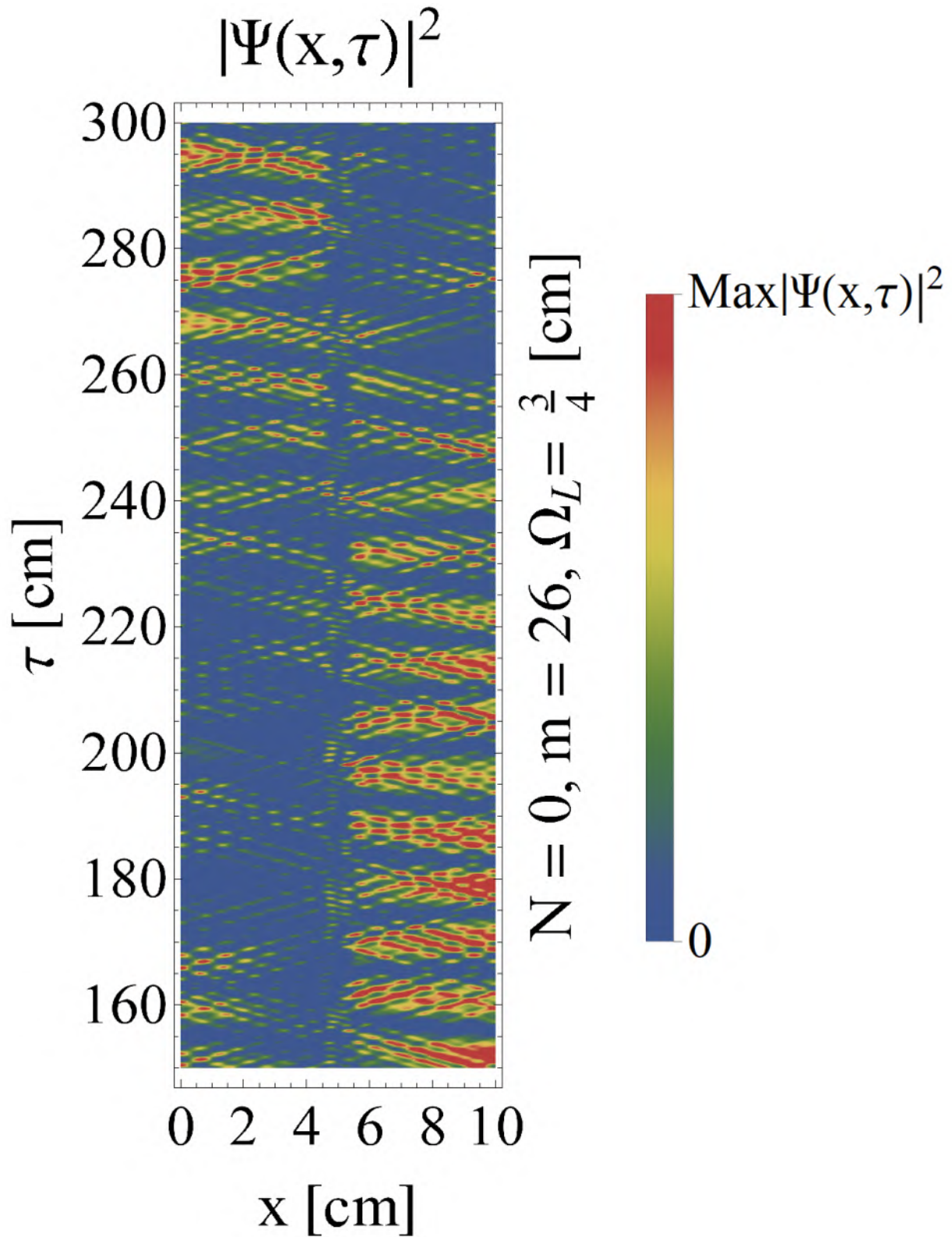


Figura 4.11: Gráfico de densidad de la cavidad resonante en $150 < \tau < 300$, cuya disposición se muestra en la fig. 4.9. Nótese el atrapamiento de la onda predominantemente del lado derecho de la caja.

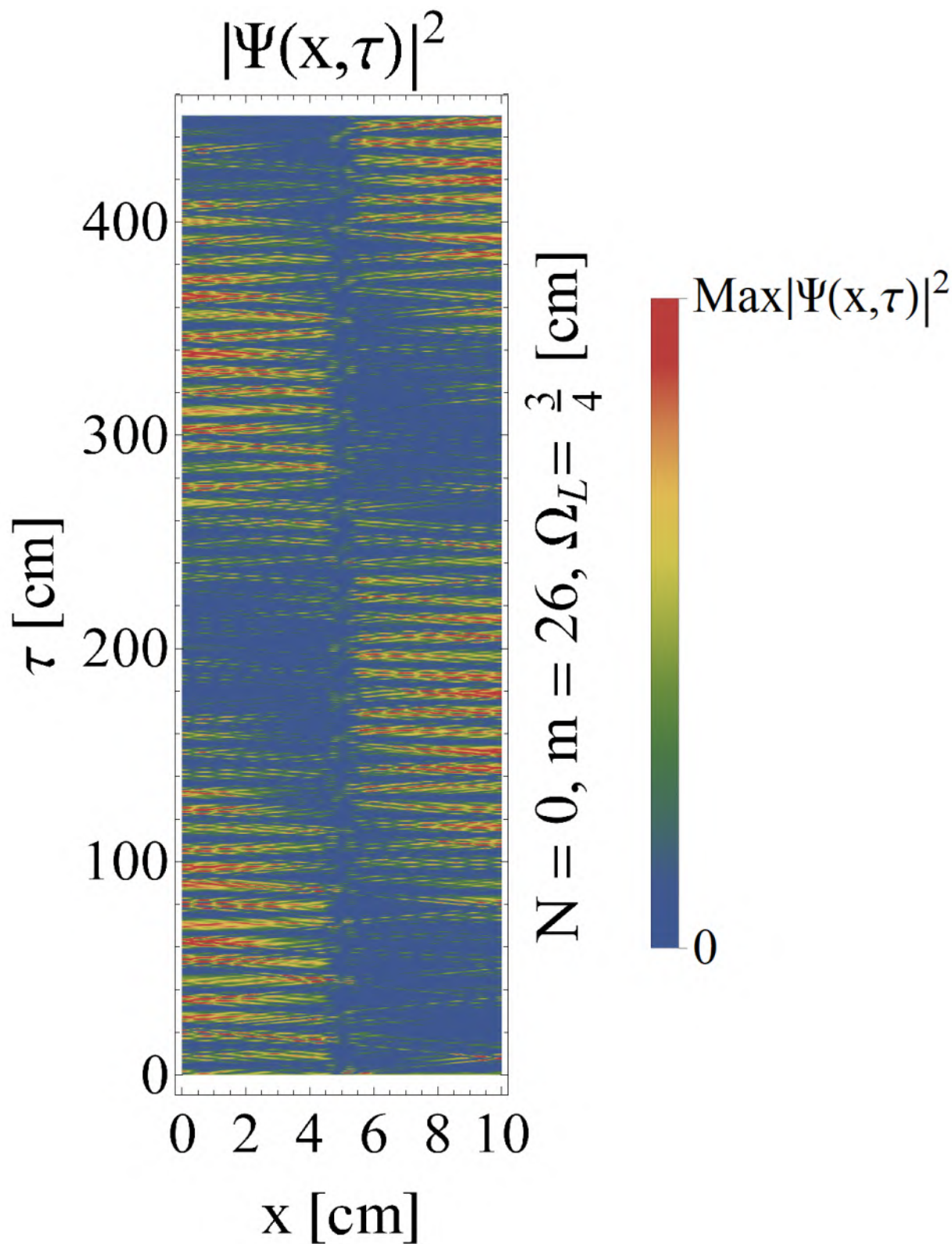


Figura 4.12: Gráfico de densidad de la cavidad resonante en $0 < \tau < 450$, cuya disposición se muestra en la fig. 4.9. Nótese el atrapamiento oscilatorio de la onda —mediado por ω_p y b — entre los lados de la cavidad, lo cual es un claro reminiscente del comportamiento del demonio de Maxwell en la fig. 3.5.

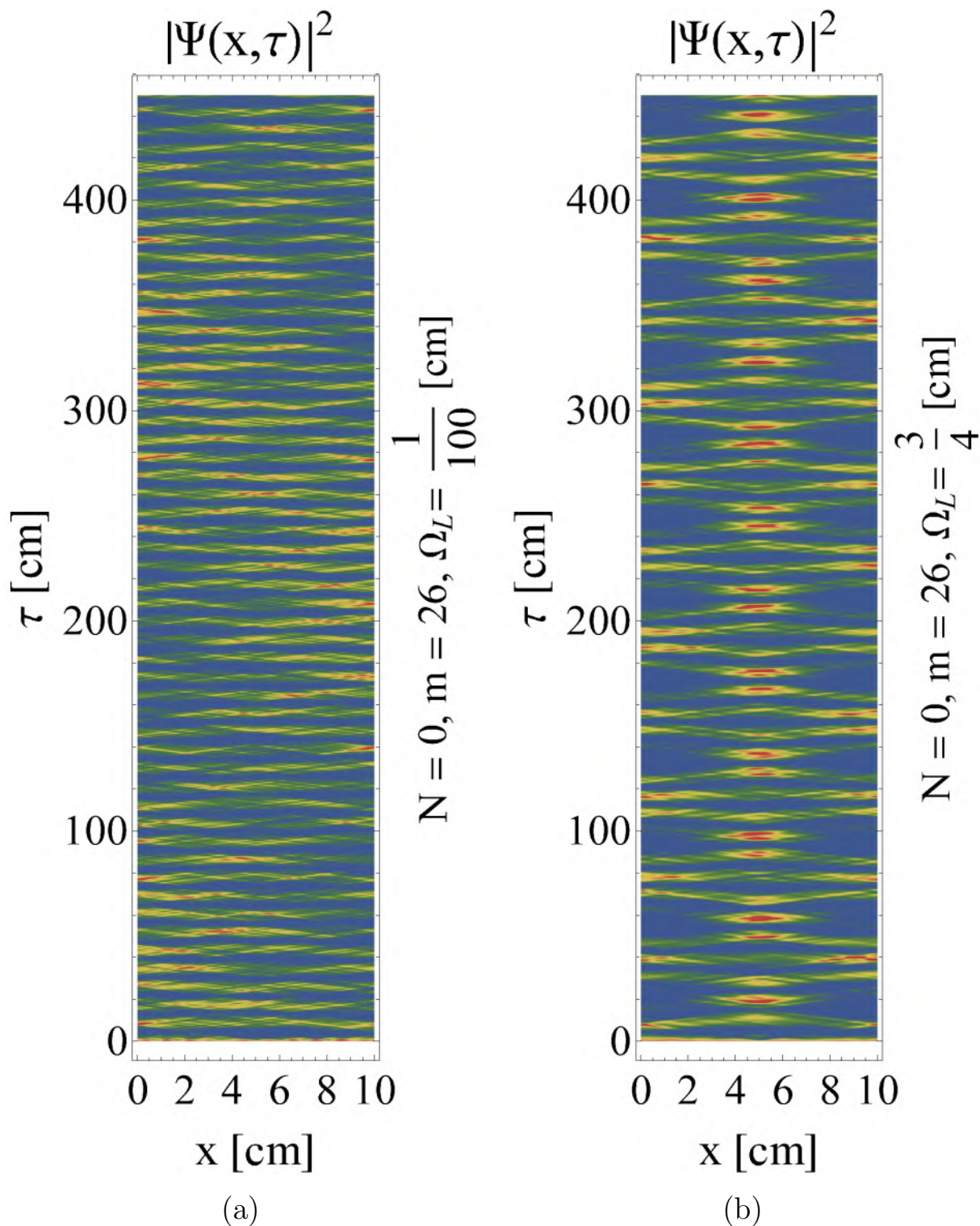


Figura 4.13: Gráficos de densidad de la cavidad resonante en $0 < \tau < 450$. El sistema se compone de una bicapa dieléctrica con valores (4.37) centrada en una cavidad de $L = 10$ [cm], en (a) la cortina es muy delgada ($\Omega_L = 0.1$ [mm]), mientras que en (b) $\Omega_L = 7.5$ [mm] excluyendo los términos trascendentales en (4.18) —esto es, la típica omisión del término con ∇ en (4.1)—. En ambos casos se observa una clara disminución de las asimetrías respecto al caso en la fig. 4.12.

Capítulo 5

Corrientes neutras débiles, dispersión e^- -nucleón y demonios cuánticos

Los experimentos que involucran violación de paridad o reversión temporal han sido una fuente de nueva física [117], ejemplos prominentes son el descubrimiento de las corrientes neutras débiles [118–120], violación de paridad en física atómica o molecular [121] y en dispersión de electrones [122, 123], cambios en la distribución de la carga eléctrica y momento magnético del protón por extrañeza [124] o modelos para explicar la asimetría de materia-antimateria [125]. En el presente capítulo se estudiará un proceso irreversible en analogía con un modelo de interacción débil que involucra la dispersión de partículas por un potencial que depende explícitamente del momento.

Como preámbulo al caso concerniente, un ejemplo en el ámbito de física atómica es el siguiente. El estado base $|nljm\rangle$ de un átomo hidrogenoide —o alcalino— se ve perturbado por contribuciones de otros eigenestados, producto de interacciones neutras débiles. Dichas contribuciones se modelan por un potencial en el núcleo que viola paridad pero no reversión temporal —ya que el espín revierte su signo, intercambiando las componentes de helicidad opuestas— a saber

$$V(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}) = \lambda \left(V(\hat{\mathbf{p}})\delta(\hat{\mathbf{x}}) + \delta(\hat{\mathbf{x}})V(\hat{\mathbf{p}}) \right), \quad \text{donde} \quad V(\hat{\mathbf{p}}) = \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \quad (5.1)$$

$\hat{\mathbf{S}}$ y $\hat{\mathbf{p}}$ son los operadores de espín y momento del electrón, respectivamente; mientras que $\delta(\hat{\mathbf{x}})$ es un potencial puntual, no relativista, producido por el nucleón ubicado en $x = 0$ (que corresponde aproximadamente al centro de masa); en 3D, este potencial particular se interpreta como una condición de frontera especial en el origen para la función de onda del electrón (ver por ejemplo [126–128]). Nótese que $\mathbf{S} \cdot \mathbf{p}$ es invariante bajo rotaciones pero cambia de signo bajo paridad, y dado que $\delta^{(3)}(\mathbf{x})$ es escalar, $V(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}})$ es pseudo-escalar. Esto significa que $V(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}})$ debe conectar l par e impar ($\Delta l = \pm 1$), pero no puede cambiar j y m , i.e. puede ser que cambie la orientación del espín y que el orbital suba o baje en uno, según corresponda. Los elementos de matriz del potencial (5.1) son

$$\langle n'l'j'm' | V(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}) | nljm \rangle = \lambda \int d^3x R_{n'l'}^* Y_{l'}^{*j'=\pm 1/2, m'} \left(\mathbf{S} \cdot (+i\hbar \overleftarrow{\nabla}) \delta^{(3)}(\mathbf{x}) + \delta^{(3)}(\mathbf{x}) \mathbf{S} \cdot (-i\hbar \overrightarrow{\nabla}) \right) R_{nl} Y_l^{j=\pm 1/2, m}, \quad (5.2)$$

donde se usó la función de onda

$$\langle \mathbf{x} | n l j m \rangle = R_{nl}(r) Y_l^{j=l\pm 1/2, m}(\theta, \phi) \quad (5.3a)$$

con los armónicos esféricos espinoriales

$$Y_l^{j=l\pm 1/2, m}(\theta, \phi) = \pm \sqrt{\frac{l \pm m + 1/2}{2l + 1}} Y_l^{m-1/2}(\theta, \phi) \chi_{\uparrow} + \sqrt{\frac{l \pm m + 1/2}{2l + 1}} Y_l^{m+1/2}(\theta, \phi) \chi_{\downarrow}, \quad (5.3b)$$

donde proyecciones entran en la dinámica salvo que se requiera una descripción que viole inversión temporal. Evidentemente, el elemento de la matriz desaparece a menos que la parte radial de la función de onda sea finita y distinta de cero en el origen, y recordando que $R_{nl} \propto r^l$, la interacción conecta $S_{J=\frac{1}{2}}$ & $P_{J=\frac{1}{2}}$. No obstante, esto no impone una restricción sobre n , por lo que también habría una mezcla de todos los estados radiales con $l = 0, 1$.

5.1. Dispersión e^- -nucleón

En la fuerza nuclear débil hay varios tipos de vértice de interacción para cada uno de los bosones W^{\pm} y Z^0 , que pueden —o no— tener neutrinos involucrados. Experimentos históricos que involucran neutrinos son

Decaimiento β^+ [129] $\frac{A}{Z}X \rightarrow \frac{A}{Z-1}X' + e^+ + \nu_e$ $(p \rightarrow n + e^+ + \nu_e)$	Captura electrónica [130, 131] $\frac{A}{Z}X + e^- \rightarrow \frac{A}{Z-1}X' + \nu_e$ $(p + e^- \rightarrow n + \nu_e)$	Decaimiento β^- [132] $\frac{A}{Z}X \rightarrow \frac{A}{Z+1}X' + e^- + \bar{\nu}_e$ $(n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e)$
--	---	--

—donde el número másico A es el número atómico Z más el número de neutrones—, el decaimiento β doble [133] y la búsqueda de resonancias de Glashow ($e^- + \bar{\nu}_e \rightarrow W^-$) [134, 135]. En este caso se

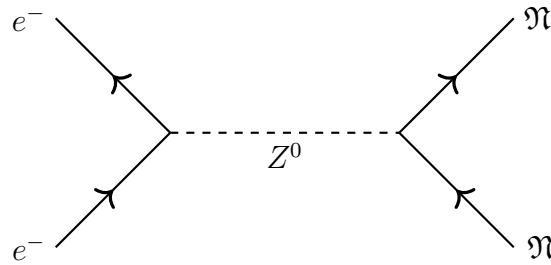


Figura 5.1: Diagrama de Feynman de la dispersión elástica e^- -nucleón mediada por Z^0 .

considera únicamente el vértice que preserva la carga y no tiene neutrino involucrado (ver fig. 5.1). Esta dispersión e^- -nucleón, o específicamente protón, también se puede modelar con el potencial en (5.1). Así mismo, los experimentos de dispersión puede utilizarse para mediciones precisas de la constante de Fermi y el ángulo de Weinberg [136, 137].

Proposición (Amplitud de dispersión). La amplitud de dispersión $f_{s's}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ de (5.1) es

$$f_{s's}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \propto -\lambda \langle s' | \mathbf{S} | s \rangle \cdot (\mathbf{k}' - i\nabla) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})|_{\mathbf{x}=0}, \quad (5.4)$$

donde $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})|_{\mathbf{x}=0}$ es la función de onda entrante de momentum \mathbf{k} evaluada en $\mathbf{x} = 0$, \mathbf{k}' el momentum saliente y $|s\rangle$ el espinor de Pauli

$$|s\rangle = \cos(\beta/2) \exp(-i\alpha/2) \chi_{\uparrow} + \sin(\beta/2) \exp(i\alpha/2) \chi_{\downarrow} \quad (5.5)$$

en la representación diagonal de σ_z del electrón entrante.

Demostración (Amplitud de dispersión). De la definición

$$f_{s's}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \langle \mathbf{k}', s' | V(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}) | \Psi_{\mathbf{k}}, s \rangle, \quad (5.6a)$$

se sustituye el potencial y se insertan conjuntos completos

$$\begin{aligned} -\frac{4\pi\hbar^2}{2m\lambda} f_{s's}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= \langle \mathbf{k}', s' | V(\hat{\mathbf{p}}) \delta(\hat{\mathbf{x}}) | \Psi_{\mathbf{k}}, s \rangle + \langle \mathbf{k}', s' | \delta(\hat{\mathbf{x}}) V(\hat{\mathbf{p}}) | \Psi_{\mathbf{k}}, s \rangle \\ &= \int d^3x \delta(\mathbf{x}) \left(\langle \mathbf{k}', s' | \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}}, s \rangle + \langle \mathbf{k}', s' | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \Psi_{\mathbf{k}}, s \rangle \right) \\ &= \int d^3x \delta(\mathbf{x}) \langle s' | \mathbf{S} | s \rangle \cdot \left(+i\hbar \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x} \rangle \overleftarrow{\nabla} \langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle - i\hbar \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x} \rangle \overrightarrow{\nabla} \langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle \right) \\ &= \int d^3x \delta(\mathbf{x}) \langle s' | \mathbf{S} | s \rangle \cdot \left(+i\hbar (-i\mathbf{k}') \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) - i\hbar \nabla \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \right) \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x} \rangle, \end{aligned} \quad (5.6b)$$

con ondas planas

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}{(2\pi)^{3/2}}. \quad (5.6c)$$

Finalmente, al evaluar la integral

$$-\frac{4\pi\hbar^2}{2m\lambda} f_{s's}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \langle s' | \mathbf{S} | s \rangle \cdot \left(\hbar \mathbf{k}' - i\hbar \nabla \right) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})|_{\mathbf{x}=0}. \quad (5.6d)$$

■

En la aproximación de alta energía —*iconal*, ver por ejemplo § 8.3 de Gottfried and Yan [138]— el término $\mathbf{S} \cdot \mathbf{k}' \Psi_{\mathbf{k}}(0)$ en (5.4) es particularmente dominante; además, recordando que la dependencia angular de la amplitud de dispersión está en el punto de observación, la expresión

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{k}' = S_z k \cos \theta + \left(S^+ e^{-i\phi} + S^- e^{+i\phi} \right) k \sin \theta, \quad (5.7a)$$

donde se usó que

$$\mathbf{k}' = |\mathbf{k}| (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \quad \& \quad S^{(\pm)} = \frac{1}{2} (S_x \pm iS_y), \quad (5.7b)$$

revela que el espín se conserva en la dirección longitudinal z (helicidad), mientras que en la dirección perpendicular (x, y) , éste se invierte. Asimismo, en la fig. 5.2 se presenta un esquema de la

sección eficaz diferencial $|f_{s's}(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2$ —con una razón de proporción de 5 entre la parte longitudinal y transversal de (5.4) para exhibir el comportamiento— de un proceso de dispersión $A \rightarrow B$, mostrando que un electrón entrante $|+\rangle_A$ tendrá más probabilidad de retrodispesión (línea azul) respecto a un electrón $|-\rangle_A$ con más probabilidad de dispersión frontal (línea roja). Naturalmente cuando $\theta \rightarrow 0$ en (5.7a) los comportamientos anteriores son absolutos. De esta forma el problema se desacopla de forma efectiva, ya que la amplitud con helicidad conservada longitudinal no depende de la parte transversalmente dispersada, por lo que la función de onda asintótica va como

$$\langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}, \pm \rangle \simeq \phi(x, y) e^{ikz} |\pm \rangle \quad (5.8)$$

donde el espinor está desacoplado (comparar con (5.3b)). Por consiguiente cada componente del espinor sigue su propia ecuación —sin intercambiar $\Psi^{(-)}$ por $\Psi^{(+)}$, por ejemplo— violando inversión temporal.

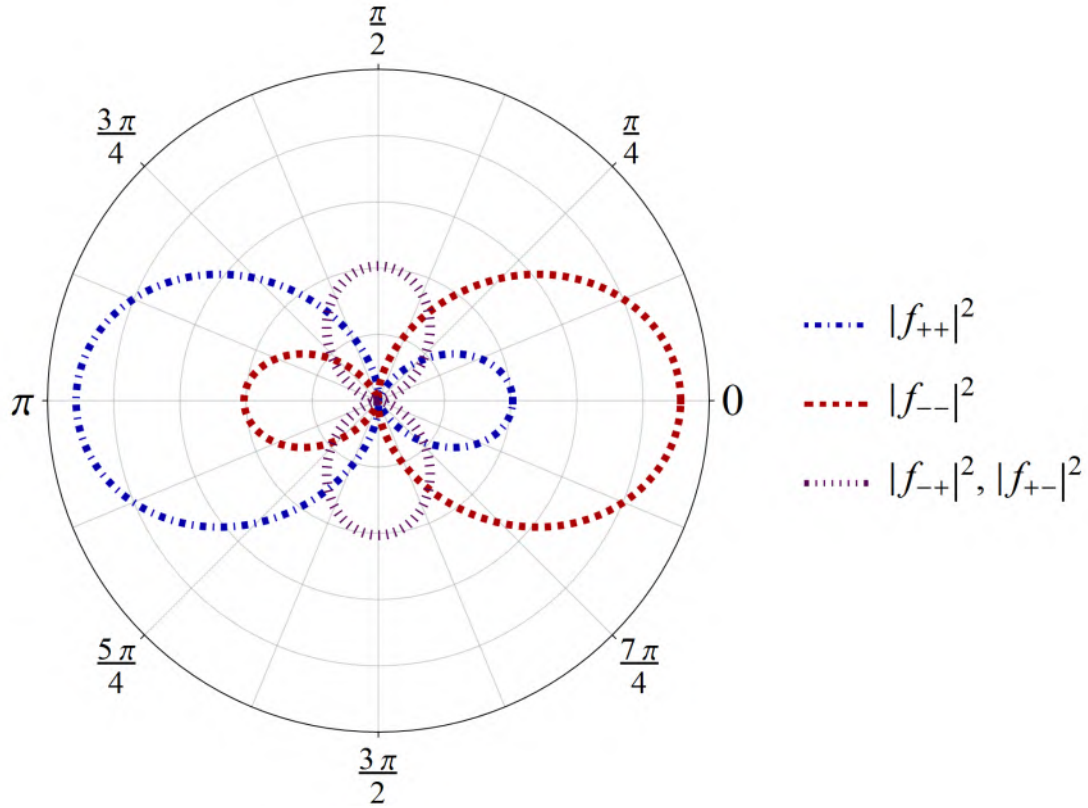


Figura 5.2: Esquema de la sección eficaz diferencial $|f_{s's}(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2$ para un proceso de dispersión $A \rightarrow B$. La línea azul (roja) corresponde a la dispersión longitudinal —polarización z — con $|+\rangle_A \rightarrow |+\rangle_B$ ($|-\rangle_A \rightarrow |-\rangle_B$); mientras que la línea morada es la dispersión transversal —polarización (x, y) — con $|\pm\rangle_A \rightarrow |\mp\rangle_B$.

El cálculo de la sección eficaz ha sido una herramienta para acotar modelos fenomenológicos [139], en particular, el teorema óptico

$$\Im[f(\mathbf{k}, \mathbf{k})] = -\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2} \cdot \Im\langle \mathbf{k}|V|\Psi_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{k}{4\pi}\sigma_T \quad (5.9)$$

es una consecuencia de la conservación de la probabilidad para potenciales cortos [140, 141].

Proposición (Sección eficaz). *La sección eficaz para el potencial en (5.1) es¹*

$$\langle \sigma_T \rangle_{s's} = \frac{3\lambda^2 k^2 m^2}{\pi\hbar^2} = \frac{4\pi}{k} \Im[f_{s's}(\mathbf{k}, \mathbf{k})]. \quad (5.10)$$

Demostración (Sección eficaz). *De la relación entre la la sección eficaz y la amplitud de dispersión*

$$\frac{d\sigma_T}{d\Omega_{\mathbf{k}'}} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 = \left(\frac{mL^3}{\pi\hbar^2}\right)^2 \langle \Psi_{\mathbf{k}}|V(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}})|\mathbf{k}' \rangle \langle \mathbf{k}'|V(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}})|\Psi_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (5.11a)$$

se insertan conjuntos completos en la base coordenada

$$\begin{aligned} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mL^3}\right)^2 \frac{d\sigma_T}{d\Omega_{\mathbf{k}'}} &= \lambda^2 \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \langle \Psi_{\mathbf{k}}| \left(V(\hat{\mathbf{p}})|\mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}'|V(\hat{\mathbf{x}}) + V(\hat{\mathbf{x}})|\mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}'|V(\hat{\mathbf{p}}) \right) |\mathbf{k}' \rangle \\ &\quad \times \langle \mathbf{k}'| \left(V(\hat{\mathbf{p}})|\mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x}|V(\hat{\mathbf{x}}) + V(\hat{\mathbf{x}})|\mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x}|V(\hat{\mathbf{p}}) \right) |\Psi_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \lambda^2 \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \langle \Psi_{\mathbf{k}}|\mathbf{x}' \rangle \left(V(\overleftarrow{\mathbf{p}'})V(\mathbf{x}') + V(\mathbf{x}')V(\overrightarrow{\mathbf{p}'}) \right) \langle \mathbf{x}'|\mathbf{k}' \rangle \\ &\quad \times \langle \mathbf{k}'|\mathbf{x} \rangle \left(V(\overleftarrow{\mathbf{p}})V(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})V(\overrightarrow{\mathbf{p}}) \right) \langle \mathbf{x}|\Psi_{\mathbf{k}} \rangle. \end{aligned} \quad (5.11b)$$

Utilizando $|\Psi_{\mathbf{k}} \rangle = |\mathbf{k} \rangle$, promediando en el espín² e integrando en $\Omega_{\mathbf{k}'}$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda^2} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mL^3}\right)^2 \langle \sigma_T \rangle_{s's} &= \sum_{s's} \int d\Omega_{\mathbf{k}'} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \langle \mathbf{k}|\mathbf{x}' \rangle \langle s'|\mathbf{S} \cdot (\hbar\mathbf{k} + \hbar\mathbf{k}') V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}'|\mathbf{k}' \rangle \\ &\quad \times \langle \mathbf{k}'|\mathbf{x} \rangle V(\mathbf{x}) (\hbar\mathbf{k}' + \hbar\mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}|s \rangle \langle \mathbf{x}|\mathbf{k} \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{L^6} \cdot \frac{3}{2} \int d\Omega_{\mathbf{k}'} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' (\mathbf{k} + \mathbf{k}')^2 V(\mathbf{x}')V(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \\ &= \frac{2\hbar^2 k^2}{L^6} \cdot \frac{3}{2} \cdot 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \theta_{\mathbf{k}'}) \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' (1 + \cos \theta_{\mathbf{k}'}) V(\mathbf{x}')V(\mathbf{x}) \\ &\quad \times e^{-ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \cos \theta_{\mathbf{k}'}} e^{ik \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \\ &= \frac{2\hbar^2 k^2}{L^6} \cdot \frac{3}{2} \cdot 2\pi \cdot 2 = \frac{3k^2}{\pi\hbar^2} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{L^3}\right)^2 \end{aligned} \quad (5.11c)$$

¹ Si el potencial se expresa en eV, las unidades de λ deben ser tales que $[\lambda] = \frac{\hbar^2 c^2 / eV^2}{eV/c^2} \rightarrow \frac{(\text{distancia})^2}{\text{masa}}$, de esta forma $[(\sigma_T)_{s's}] \rightarrow \text{Área}$.

² Recordar que para estados iniciales no-polarizados se suma sobre los estados de espín inicial y se divide entre $(2s + 1)$; así mismo se debe sumar sobre los estados finales si la polarización final no es observada. Por otro lado, también se puede promediar sobre \mathbf{k} —integrando en $d\Omega_{\mathbf{k}}$ — pero al tener un potencial tipo $\delta(x)$ no es necesario.

donde se emplearon ondas planas (5.6c) con la sustitución $2\pi \mapsto L$ y

$$\sum_{s's} \langle s' | \mathbf{S} \cdot \mathbf{S} | s \rangle = \sum_{s''s's} \langle s' | \mathbf{S} | s'' \rangle \langle s'' | \mathbf{S} | s \rangle = \frac{3}{2} \quad (5.11d)$$

ya que es una suma sobre estados $-\langle \uparrow \downarrow | \mathbf{S} | \uparrow \downarrow \rangle = (0, 0, \pm 1/2)$ y $\langle \downarrow \uparrow | \mathbf{S} | \downarrow \uparrow \rangle = (1/2, \pm i/2, 0)$ — en la segunda línea, $|\mathbf{k}| \equiv k = |\mathbf{k}'|$ — dispersión elástica — y el eje de dispersión $z \parallel \hat{\mathbf{k}}_z \parallel \widehat{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}$ por lo que

$$(\mathbf{k} + \mathbf{k}')^2 = 2k^2(1 + \cos \theta_{\mathbf{k}'}) \quad \& \quad \mathbf{k}' \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') = k|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \cos \theta_{\mathbf{k}'} \quad (5.11e)$$

en la tercera línea, y $V(x) = \delta(x)$ en la cuarta.

Por otro lado, de la ecuación de Lippmann–Schwinger

$$|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\mathbf{k}\rangle - \frac{1}{H_0 - E - i\epsilon} V |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (5.12a)$$

donde H_0 es el Hamiltoniano libre y $|\mathbf{k}\rangle$ son los eigenestados de H_0 con eigenenergías $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, el término

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | V | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle &= \left[\langle \Psi_{\mathbf{k}} | + \langle \Psi_{\mathbf{k}} | V \frac{1}{H_0 - E + i\epsilon} \right] V | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \langle \Psi_{\mathbf{k}} | V | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle + \langle \Psi_{\mathbf{k}} | V \left[\wp \frac{1}{H_0 - E} - i\pi \delta(H_0 - E) \right] V | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle, \end{aligned} \quad (5.12b)$$

con \wp la parte principal. Al tomar la parte imaginaria de la expresión anterior se obtiene

$$\Im \langle \mathbf{k} | V | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle = -\pi \langle \Psi_{\mathbf{k}} | V \delta(H_0 - E) V | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle \quad (5.12c)$$

ya que para potenciales Hermitianos los elementos diagonales (eigenvalores) son reales. Insertando conjuntos completos en $|\mathbf{k}', s'\rangle$, usando $|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\mathbf{k}\rangle$, e integrando en $d^3 k'$

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2\pi} \sum_s \Im \langle \mathbf{k}, s | V | \Psi_{\mathbf{k}}, s \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{s's} \int dk' k'^2 \int d\Omega_{\mathbf{k}'} \langle \Psi_{\mathbf{k}}, s | V | \mathbf{k}', s' \rangle \\ &\quad \times \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m} (k'^2 - k^2) \right) \langle \mathbf{k}', s' | V | \Psi_{\mathbf{k}}, s \rangle \quad (5.12d) \\ &= \frac{\lambda^2 \hbar^2 k^2}{L^6} \cdot (2k)^2 \cdot \frac{m}{\hbar^2 k} \cdot 4\pi \cdot \frac{1}{2} \sum_{s's} \langle s | \mathbf{S} | s' \rangle \langle s' | \mathbf{S} | s \rangle = \frac{3\lambda^2 k^3 m}{\pi \hbar^4} \left(\frac{2\pi \hbar^2}{L^3} \right)^2 \end{aligned}$$

Donde se empleó

$$\delta \left(\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - k'^2) \right) = \frac{m}{\hbar^2 k} \left(\delta(k - k') - \delta(k + k') \right) \quad (5.12e)$$

($\delta(k + k')$ no contribuye ya que $k, k' > 0$). Al multiplicar (5.12d) por $mL^3 / 2\hbar^2$

$$-\frac{mL^3}{2\pi \hbar^2} \cdot \frac{1}{2} \sum_{s=\pm} \Im \langle \mathbf{k}, s | V | \Psi_{\mathbf{k}}, s \rangle = \frac{3\lambda^2 k^3 m^2}{\hbar^2} \frac{2\pi}{L^3} \stackrel{L \rightarrow 2\pi}{=} \frac{3\lambda^2 k^3 m^2}{4\pi^2 \hbar^2} \stackrel{(5.9)}{=} \frac{k}{4\pi} \langle \sigma_T \rangle_{s's} \quad (5.12f)$$

por lo que se demuestra el teorema óptico. ■

5.2. Hamiltoniano con aproximación iconal

En vista de que la teoría se desacopla de forma efectiva en parte longitudinal y transversal, se puede usar el *ansatz*

$$\langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}}, s \rangle = \Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x}) | + \rangle + \Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{x}) | - \rangle \quad \text{donde} \quad \Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{x}) = \phi^{(\pm)}(x, y) \psi^{(\pm)}(z), \quad (5.13)$$

que permite escribir la ec. de Schrödinger para cada componente del espinor como

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V_C(\hat{\mathbf{x}}) + V(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}) - E \right) |\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}, \pm \rangle = 0, \quad (5.14)$$

donde $V_C(\hat{\mathbf{x}})$ es el potencial de Coulomb (que si bien no sabe de espín se pone por completitud).

Proposición (Ec. de Schrödinger desacoplada). *Desacoplando la parte transversal (x, y) de la longitudinal z en (5.14), se obtiene para cada una de las componentes $|\pm \rangle$*

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_z^2 + V_C^{\text{eff}}(z) - E' \right) \psi(z) \pm \Lambda \left(\delta(z) (-i\hbar \partial_z) \psi(z) + (-i\hbar \partial_z) (\delta(z) \psi(z)) \right) = 0, \quad (5.15a)$$

donde

$$\Phi \Lambda = \lambda \cdot \frac{\hbar}{2} |\phi(x, y)|_{x, y=0}^2, \quad V_C^{\text{eff}}(z) = \frac{1}{\Phi} \int d^2x \phi^*(x, y) V_C(\mathbf{x}) \phi(x, y), \quad (5.15b)$$

$$\Phi = \int d^2x |\phi(x, y)|^2, \quad \Phi E' = E + \frac{\hbar^2}{2m} \int d^2x \phi^*(x, y) \nabla_{\perp}^2 \phi(x, y). \quad (5.15c)$$

Demostración (Ec. de Schrödinger desacoplada). *Calculando el valor esperado del Hamiltoniano en la base coordenada transversal y multiplicando por $\langle z |$, esto es, multiplicando (5.14) por $\langle z | \otimes \langle \Psi_{\mathbf{k}} |$ e insertando conjuntos completos en (x, y) , se tienen las siguientes evaluaciones*

i) *Energía cinética $\hat{\mathbf{p}}^2/2m$*

$$\begin{aligned} \int d^2x \langle \Psi_{\mathbf{k}} | x, y \rangle \langle x, y, z | \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} | \Psi_{\mathbf{k}}, \pm \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^2x \phi^*(x, y) (\nabla_{\perp}^2 + \partial_z^2) \phi(x, y) \psi(z) | \pm \rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\int d^2x \phi^*(x, y) \nabla_{\perp}^2 \phi(x, y) + \int d^2x |\phi(x, y)|^2 \cdot \partial_z^2 \right) \psi(z) | \pm \rangle. \end{aligned} \quad (5.16a)$$

ii) *Potencial de Coulomb $V_C(\hat{\mathbf{x}})$*

$$\int d^2x \langle \Psi_{\mathbf{k}} | x, y \rangle \langle x, y, z | V_C(\hat{\mathbf{x}}) | \Psi_{\mathbf{k}}, \pm \rangle = \int d^2x \phi^*(x, y) V_C(\mathbf{x}) \phi(x, y) \psi(z) | \pm \rangle. \quad (5.16b)$$

iii) *Potencial $V(\hat{\mathbf{p}}) \delta^3(\hat{\mathbf{x}})$*

$$\begin{aligned} &\int d^2x \langle z | \otimes \langle \Psi_{\mathbf{k}} | \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{p}} | x, y \rangle \langle x, y | \delta^3(\hat{\mathbf{x}}) | \Psi_{\mathbf{k}}, \pm \rangle \\ &= \int d^2x \left(\langle \Psi_{\mathbf{k}} | x, y \rangle \mathbf{S} \cdot \overleftarrow{\hat{\mathbf{p}}}_{\perp} \delta^3(\mathbf{x}) \langle x, y, z | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle + \langle \Psi_{\mathbf{k}} | x, y \rangle S_z \overrightarrow{p}_z \langle x, y, z | \delta^3(\hat{\mathbf{x}}) | \Psi_{\mathbf{k}}, \rangle \right) | \pm \rangle \\ &= i\hbar \left[\phi^*(x, y) \mathbf{S} \cdot \overleftarrow{\nabla}_{\perp} \phi(x, y) - |\phi(x, y)|^2 S_z \overrightarrow{\partial}_z \right]_{x, y=0} \delta(z) \psi(z) | \pm \rangle \end{aligned} \quad (5.16c)$$

iv) Potencial $\delta^3(\hat{\mathbf{x}})V(\hat{\mathbf{p}})$

$$\begin{aligned} \int d^2x \langle z | \otimes \langle \Psi_{\mathbf{k}} | \delta^3(\hat{\mathbf{x}}) | x, y \rangle \langle x, y | \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \Psi_{\mathbf{k}}, \pm \rangle &= \int d^2x \delta^3(\mathbf{x}) \langle \Psi_{\mathbf{k}} | x, y \rangle \langle x, y, z | \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \Psi_{\mathbf{k}}, \pm \rangle \\ &= \int d^2x \delta^3(\mathbf{x}) \phi^*(x, y) \left(\mathbf{S} \cdot \vec{\mathbf{p}}_{\perp} \phi(x, y) + \phi(x, y) S_z p_z \right) \psi(z) | \pm \rangle \\ &= -i\hbar \delta(z) \left[\phi^*(x, y) \mathbf{S} \cdot \vec{\nabla}_{\perp} \phi(x, y) + |\phi(x, y)|^2 S_z \vec{\partial}_z \right]_{x,y=0} \psi(z) | \pm \rangle \end{aligned} \quad (5.16d)$$

v) Eigenenergía E

$$\int d^2x \langle \Psi_{\mathbf{k}} | E | x, y \rangle \langle x, y, z | \Psi_{\mathbf{k}}, \pm \rangle = E \int d^2x |\phi(x, y)|^2 \psi(z) | \pm \rangle. \quad (5.16e)$$

Al sumarlo todo se llega a

$$\begin{aligned} \left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_z^2 + V_{\text{eff}}(z) - E' \right) \psi(z) + \lambda \Xi \delta(z) \psi(z) \right. \\ \left. + \lambda |\phi(x, y)|_{x,y=0}^2 \left(\delta(z) S_z p_z \psi(z) + S_z p_z [\delta(z) \psi(z)] \right) \right\} | \pm \rangle = 0 \end{aligned} \quad (5.17a)$$

donde

$$\Xi = \frac{i\hbar}{\Phi} \left[\phi^*(x, y) \mathbf{S} \cdot \vec{\nabla}_{\perp} \phi(x, y) - \phi^*(x, y) \mathbf{S} \cdot \vec{\nabla}_{\perp} \phi(x, y) \right]_{x,y=0}, \quad \text{con } \nabla_{\perp} = (\partial_x, \partial_y, 0). \quad (5.17b)$$

Posteriormente, al multiplicar desde la izquierda por el espín, el término $\langle \pm | \Xi | \pm \rangle = 0$ ya que —como se vio anteriormente— las componentes perpendiculares invierten el espín mientras que las longitudinales lo conservan. Así mismo al usar que $S_z | \pm \rangle = \pm \frac{\hbar}{2} | \pm \rangle$ en el tercer término, se llega al resultado deseado.

El procedimiento anterior es análogo a calcular (5.14) en la base coordenada $|\mathbf{x}\rangle$, i.e.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_C(\mathbf{x}) - E \right) \langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}}, s \rangle - i\hbar \lambda \left(\delta^3(\mathbf{x}) \mathbf{S} \cdot \nabla \langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}}, s \rangle + \mathbf{S} \cdot \nabla (\delta^3(\mathbf{x}) \langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}}, s \rangle) \right) = 0, \quad (5.18)$$

y posteriormente multiplicar desde la izquierda por $\langle \pm | \phi^*(x, y)$ e integrar en la parte transversal (x, y) . ■

Dado que el haz incidente sufre poca deformación transversal, la función $\phi(x, y)$ es entonces la distribución original del haz para toda z . Asimismo, la densidad de probabilidad transversal $|\phi(x, y)|^2$ sería una constante relacionada con la amplitud de la onda entrante delimitada a un área finita A en (x, y) (i.e., $\Lambda \simeq \lambda \hbar / 2A$ & $\Phi \simeq 1$), por lo que se puede obtener una aproximación al potencial efectivo de Coulomb $V_C^{\text{eff}}(z)$ que siente la partícula, a saber

$$V_C^{\text{eff}}(z) \simeq -2\pi \int_0^{\rho_{\text{max}}} d\rho \rho \frac{Ze^2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} = 2\pi Ze^2 \left(|z| - \sqrt{\rho_{\text{max}}^2 + z^2} \right) \quad (5.19)$$

donde ρ_{max} —el alcance efectivo del potencial— está directamente relacionado con el parámetro de impacto $b = l/k$, por lo que sólo las ondas parciales —estados de momento angular bien definido— con $l \leq k\rho_{\text{max}}$ serán fuertemente dispersadas.

Nótese que al estar el espinor desacoplado, la dinámica de $\Psi^{(+)}$ es la imagen reversa de $\Psi^{(-)}$, y aunque globalmente hay una simetría T, al ignorar una componente la otra regresa un proceso irreversible. Por lo tanto, la física corresponde a dos demonios de Maxwell que violan P, preservan C —ya que Z^0 es neutro— y violan T, donde una componente del espín experimenta una barrera ($\lambda > 0$), mientras la otra experimenta un pozo de potencial (como si $\lambda < 0$).³ Cuando las poblaciones de helicidades opuestas — $\Psi^{(+)}$ & $\Psi^{(-)}$ — se toman como especies diferentes, la falta de simetría T individual produce un mecanismo de separación o asimetría similar al mecanismo de Sakharov para materia y antimateria [142], en donde el espín estrella del grupo de Lorentz $\mathfrak{su}(2) \times \mathfrak{su}(2)^*$ es el que ahora entra en juego.

5.3. Función de Green 1D exacta

En vista de que se tiene un problema efectivamente unidimensional, se puede calcular la función de Green 1D del problema⁴ siguiendo la metodología expuesta en § 2.2.3.

Proposición (Función de Green 1D). *La ecuación explícita en forma de operador para el potencial en (5.1) que hay que resolver es*

$$\left(\hat{H} - E + \lambda V(\hat{x}, \hat{p})\right) \hat{G}_p = \mathbb{I}, \quad (5.20a)$$

donde

$$V(\hat{x}, \hat{p}) = V(\hat{p})\delta(\hat{x}) + \delta(\hat{x})V(\hat{p}), \quad \mathcal{E} \quad V(\hat{p}) = \hat{S} \cdot \hat{p}, \quad (5.20b)$$

cuya solución es

$$G_p(x, x', E) + \lambda' [\hat{S} \cdot \partial_{x''}] G_0(x, x'', E)|_{x''=0} C_1(x', E) - \lambda' G_0(x, 0, E) C_2(x', E) = G_0(x, x', E) \quad (5.21a)$$

con $\lambda' = i\hbar\lambda$,

$$C_1(x', E) = \frac{G_0(0, x', E) + \lambda' G_0(0, 0, E) \cdot \frac{[\hat{S} \cdot \partial_x] G_0(x, x', E)|_{x=0}}{1 - \lambda' [\hat{S} \cdot \partial_x] G_0(x, 0, E)|_{x=0}}}{1 + \lambda' [\hat{S} \cdot \partial_{x''}] G_0(0, x'', E)|_{x''=0} + \lambda'^2 G_0(0, 0, E) \cdot \frac{[\hat{S} \cdot \partial_x] [\hat{S} \cdot \partial_{x''}] G_0(x, x'', E)|_{x, x''=0}}{1 - \lambda' [\hat{S} \cdot \partial_x] G_0(x, 0, E)|_{x=0}}} \quad (5.21b)$$

$$C_2(x', E) = \frac{[\hat{S} \cdot \partial_x] G_0(x, x', E)|_{x=0} - \lambda' [\hat{S} \cdot \partial_x] [\hat{S} \cdot \partial_{x''}] G_0(x, x'', E)|_{x, x''=0} C_1(x', E)}{1 - \lambda' [\hat{S} \cdot \partial_x] G_0(x, 0, E)|_{x=0}}. \quad (5.21c)$$

Demostración (Función de Green 1D). *Multiplicando por la izquierda por \hat{G}_0 , en la base coordenada $|x\rangle$ se tiene*

$$\langle x | \underbrace{\hat{G}_0 (\hat{H} - E) \hat{G}_p}_{\mathbb{I}} + \lambda \hat{G}_0 V(\hat{x}, \hat{p}) \hat{G}_p | x' \rangle = \langle x | \hat{G}_0 | x' \rangle. \quad (5.22a)$$

³ En el caso de baja energía, $\Psi^{(+)}$ tiene gran probabilidad de *tunelamiento*, mientras que para $\Psi^{(-)}$ sigue teniendo *transmisión*.

⁴ Cabe recordar que la función de Green 3D tiene una divergencia logarítmica en el origen, por lo que se requerirían técnicas de renormalización para poder dar una respuesta finita (e.g. $\lim_{\lambda \rightarrow 0} \lambda G^{3D}(0, 0, E) = \text{const.}$).

Insertando conjuntos completos en x'' y x'''

$$\begin{aligned} \langle x | \hat{G}_p | x' \rangle + \lambda \int dx'' \int dx''' \langle x | \hat{G}_0 | x'' \rangle \langle x'' | V(\hat{p}) \delta(\hat{x}) | x''' \rangle \langle x''' | \hat{G}_p | x' \rangle \\ + \lambda \int dx'' \int dx''' \langle x | \hat{G}_0 | x'' \rangle \langle x'' | \delta(\hat{x}) V(\hat{p}) | x''' \rangle \langle x''' | \hat{G}_p | x' \rangle = \langle x | \hat{G}_0 | x' \rangle, \end{aligned} \quad (5.22b)$$

o bien

$$\begin{aligned} G_p(x, x', E) + \lambda \int dx'' \int dx''' \delta(x''') G_0(x, x'', E) \langle x'' | V(\hat{p}) | x''' \rangle G_p(x''', x', E) \\ + \lambda \int dx'' \int dx''' \delta(x'') G_0(x, x'', E) \langle x'' | V(\hat{p}) | x''' \rangle G_p(x''', x', E) = G_0(x, x', E). \end{aligned} \quad (5.22c)$$

Integrando una vez

$$\begin{aligned} G_p(x, x', E) + \lambda \int dx'' G_0(x, x'', E) \langle x'' | V(\hat{p}) | 0 \rangle G_p(0, x', E) \\ + G_0(x, 0, E) \cdot \lambda \int dx''' \langle 0 | V(\hat{p}) | x''' \rangle G_p(x''', x', E) = G_0(x, x', E). \end{aligned} \quad (5.22d)$$

Sustituyendo $V(\hat{p})$

$$\begin{aligned} G_p(x, x', E) + \lambda \int dx'' G_0(x, x'', E) [-i\hbar \hat{S} \cdot \partial_{x''}] \delta(x'') G_p(0, x', E) \\ + G_0(x, 0, E) \cdot \lambda \int dx''' [+i\hbar \hat{S} \cdot \partial_{x'''}] \delta(x''') G_p(x''', x', E) = G_0(x, x', E). \end{aligned} \quad (5.22e)$$

Usando que

$$\int dx \delta'(x - \alpha) f(x) = -f'(\alpha), \quad (5.22f)$$

se obtiene

$$\begin{aligned} G_p(x, x', E) + \lambda' [\hat{S} \cdot \partial_{x''}] G_0(x, x'', E) |_{x''=0} G_p(0, x', E) \\ - \lambda' G_0(x, 0, E) [\hat{S} \cdot \partial_{x'''}] G_p(x''', x', E) |_{x'''=0} = G_0(x, x', E). \end{aligned} \quad (5.22g)$$

Al multiplicar (5.22g) desde la izquierda por $\delta(x) \hat{S} \cdot \partial_x$ e integrar en x , se tiene

$$\begin{aligned} [\hat{S} \cdot \partial_x] G_p(x, x', E) |_{x=0} \left(1 - \lambda' [\hat{S} \cdot \partial_x] G_0(x, 0, E) |_{x=0} \right) \\ + \lambda' G_p(0, x', E) [\hat{S} \cdot \partial_x] [\hat{S} \cdot \partial_{x''}] G_0(x, x'', E) |_{x, x''=0} = [\hat{S} \cdot \partial_x G_0(x, x', E)] |_{x=0}. \end{aligned} \quad (5.22h)$$

Evaluando (5.22g) en $x = 0$

$$\begin{aligned} G_p(0, x', E) \left(1 + \lambda' [\hat{S} \cdot \partial_{x''}] G_0(0, x'', E) |_{x''=0} \right) \\ - \lambda' G_0(0, 0, E) [\hat{S} \cdot \partial_{x'''}] G_p(x''', x', E) |_{x'''=0} = G_0(0, x', E) \end{aligned} \quad (5.22i)$$

se tiene un sistema de ecuaciones por medio del término tipo $[\hat{S} \cdot \partial_x] G_p(x, x', E) |_{x=0}$, para obtener $G_p(0, x', E)$, a saber

$$\begin{aligned} G_p(0, x', E) \left(1 + \lambda' [\hat{S} \cdot \partial_{x''}] G_0(0, x'', E) |_{x''=0} + \lambda'^2 G_0(0, 0, E) \cdot \frac{[\hat{S} \cdot \partial_x] [\hat{S} \cdot \partial_{x''}] G_0(x, x'', E) |_{x, x''=0}}{1 - \lambda' [\hat{S} \cdot \partial_x] G_0(x, 0, E) |_{x=0}} \right) \\ - \lambda' G_0(0, 0, E) \cdot \frac{[\hat{S} \cdot \partial_x] G_0(x, x', E) |_{x=0}}{1 - \lambda' [\hat{S} \cdot \partial_x] G_0(x, 0, E) |_{x=0}} = G_0(0, x', E) \end{aligned} \quad (5.22j)$$

Finalmente se sustituye $G_p(0, x', E)$ y $[\hat{S} \cdot \partial_x] G_p(x, x', E)|_{x=0}$ en (5.22g), y se llega al resultado deseado. ■

Este resultado es válido en general, siempre que $G_0(x, x', E)$ sea la función de Green para todo potencial conocido; por ejemplo, en el problema de dispersión e^- -p esto corresponde al potencial efectivo V_C^{eff} . Así mismo, conviene recordar que la función de Green 1D en el vacío $G_0(x, x', E)$ es simplemente (2.14), por lo que con este resultado es posible evaluar explícitamente la función de Green del potencial irreversible —de corrientes neutras débiles— sin la contribución de Coulomb. Es importante destacar que esta función de Green también puede dividirse en contribuciones simétricas y antisimétricas, donde estas últimas están asociadas a la simetría antiunitaria rota, como se vio en el capítulo 2.

5.4. Potencial barrera 1D irreversible

Dadas las cualidades del potencial en (5.1), es ilustrativo analizar un potencial que depende explícitamente del momentum, a saber

$$V(\hat{x}, \hat{p}) = G\Theta(L - |\hat{x}|) \hat{p} \Theta(L - |\hat{x}|), \quad (5.23)$$

donde G es una constante relacionada con la de Fermi y L se interpreta como el radio de interacción debido a Z^0 [143, 144]. El potencial (5.23) puede ser entendido partiendo desde la ec. de Dirac con un campo $A^\mu = (A_0, \mathbf{A})$ [eV/ec] y un potencial axial $Z^\mu = (Z_0, \mathbf{Z})$, a saber

$$\left[i\hbar\gamma_\mu\partial^\mu - e\gamma_\mu A^\mu - Q_w\gamma_\mu\gamma_5 Z^\mu - mc \right] \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = 0, \quad (5.24)$$

donde e y Q_w son la carga electromagnética y débil, respectivamente; mientras γ_5 toma en cuenta la violación de paridad.⁵ Cabe mencionar que hay corrientes neutras débiles en todo proceso electromagnético dado que Z^0 se acopla a todo lo que el fotón se acople [148]; por ejemplo, el potencial de Coulomb es modificado ligeramente por intercambio de Z^0 , y si bien tal efecto es minúsculo, persevera un efecto característico: violación de P [149]. Usando la representación⁶ de Pauli–Dirac: $\gamma^5 \doteq \text{antidiag}(\mathbb{I}, \mathbb{I})$, $\gamma_0 \doteq \text{diag}(\mathbb{I}, -\mathbb{I})$ & $\boldsymbol{\gamma} \doteq \text{antidiag}(\boldsymbol{\sigma}, -\boldsymbol{\sigma})$ —donde $\boldsymbol{\sigma}$ son las matrices de Pauli—, el operador entre corchetes de (5.24) se escribe como

$$i\hbar \begin{pmatrix} \partial_{ct} & \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \\ -\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla & -\partial_{ct} \end{pmatrix} - e \begin{pmatrix} A_0 & -\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} & -A_0 \end{pmatrix} - Q_w \begin{pmatrix} -\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{Z} & Z_0 \\ -Z_0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{Z} \end{pmatrix} - mc \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & \mathbb{I} \end{pmatrix} \quad (5.25)$$

donde se observa una transposición en los roles de las componentes de Z^μ respecto a los de A^μ al operar sobre las componentes de la función de onda. Así mismo, la parte magnética $-\mathbf{A}$ y \mathbf{Z} —

⁵ En la época de Fermi, cuando el neutrón todavía era una hipótesis [145] y W. Pauli rechazaba la teoría de H. Weyl [146], utilizar un potencial axial en la primicia de la ec. de Dirac [147] hubiera sido absurdo.

⁶ La notación usual es $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ que cumple $\{\gamma^5, \gamma^\nu\} = 0$. Si el tensor métrico $g^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$, entonces el producto escalar $\gamma_\mu p^\mu = g_{\mu\nu}\gamma^\mu p^\nu = \gamma^0 p^0 - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p} = i\hbar\gamma^0\partial_{ct} + i\hbar\boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla$, además de las relaciones constatadas en (1.7).

puede ser tomada como nula en vista de que la transferencia del cuadrimomento Q es mucho menor que la masa de Z^0 ($Q^2 \ll M_Z^2$) [150–153].⁷ De esta forma (5.24) se simplifica a

$$\begin{pmatrix} E/c - eA_0 - mc & -Q_w Z_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ Q_w Z_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -E/c + eA_0 - mc \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = 0. \quad (5.26)$$

En la aproximación no-relativista, la energía total del electrón es similar a su energía en reposo ($E - ecA_0 \sim mc^2$), por lo que de la segunda línea de (5.26) se tiene

$$\psi_- \sim \frac{1}{2mc} (Q_w Z_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \psi_+ \quad (5.27)$$

que al sustituir en la primera línea de (5.26) se obtiene

$$\left(\frac{E}{c} - eA_0 - mc \right) \psi_+ - \frac{1}{2mc} \left((\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2 + 2Q_w Z_0 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + Q_w^2 Z_0^2 \right) \psi_+ = 0, \quad (5.28)$$

que es justamente la ec. de Schrödinger con energía efectiva ($E - ecA_0 - mc^2$) y potencial efectivo $(2Q_w Z_0 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + Q_w^2 Z_0^2)/2m$ para la componente grande⁸ ψ_+ . Finalmente, nótese que en la reducción a 1D en z de (5.28) un electrón entrante por la izquierda o derecha es congruente con un electrón entrante con espín arriba o abajo, respectivamente. Regresando al potencial (5.23), la ec. de Schrödinger correspondiente en la base de posición resulta

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x, p) + V(x) - E \right) \Psi(x) = 0, \quad \text{con} \quad V(x, p) = \begin{cases} -i\hbar G \partial_x & \text{si } |x| < L, \\ 0 & \text{si } |x| \geq L, \end{cases} \quad (5.29)$$

y se añadió el típico potencial constante $V(x) = V_0 \Theta(L - |x|)$ con fines comparativos —que bien podría representar el término $Q_w^2 Z_0^2/2m$ en (5.28)—.

Proposición (Ec. de Schrödinger con barrera irreversible). *Al dividir el sistema en las zonas*

I) Incidencia & Reflexión, **II) Interacción,** **III) Transmisión,**

se tiene que la parte espacial de la función de onda es

a) Para incidencia izquierda (fig. 5.3a)

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_I(x) = c_0 e^{ik_0 x} + c_1 e^{-ik_0 x} & \text{si } x \leq -L, \\ \Psi_{II}(x) = c_2 e^{i\kappa x} + c_3 e^{-i\kappa x} & \text{si } -L < x < L, \\ \Psi_{III}(x) = c_4 e^{ik_0 x} & \text{si } x \geq L, \end{cases} \quad (5.30a)$$

b) Para incidencia derecha (fig. 5.3b)

$$\Psi^R(x) = \begin{cases} \Psi_I^R(x) = c_0^R e^{-ik_0 x} + c_1^R e^{ik_0 x} & \text{si } x \geq L, \\ \Psi_{II}^R(x) = c_2^R e^{-i\kappa x} + c_3^R e^{i\kappa x} & \text{si } -L < x < L, \\ \Psi_{III}^R(x) = c_4^R e^{-ik_0 x} & \text{si } x \leq -L, \end{cases} \quad (5.30b)$$

⁷ Los valores de las constantes pueden ser consultados en R. L. Workman *et al.* (Particle Data Group) [154].

⁸ Coloquialmente llamada «grande», en vista de que ψ_- —la «chica»— se ve disminuida en un factor del orden v/c .

cuyas constantes son

$$\kappa_{\pm} = \kappa \pm \gamma, \quad \kappa^2 = k_0^2 - \eta^2 + \gamma^2, \quad k_0^2 = 2mE/\hbar^2, \quad \eta^2 = 2mV_0/\hbar^2, \quad \& \quad \gamma = Gm/\hbar. \quad (5.30c)$$

Demostración (Ec. de Schrödinger con barrera irreversible). Utilizando el ansatz $\Psi(x, t) = X(x)T(t)$, la ec. de Schrödinger dependiente del tiempo separa en dos ec. diferenciales ordinarias, e.g.

$$-\partial_x^2 X - 2i\gamma\partial_x X + \eta^2 X = k_0^2 X, \quad \& \quad i\zeta\partial_t T = k_0^2 T, \quad \text{donde} \quad \zeta = 2m/\hbar \quad (5.31)$$

y k_0 debe ser interpretada una constante de separación hasta invocar el eigensistema $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ y entonces $E/\hbar = k_0^2/\zeta$. Posteriormente, al resolver (5.31) se llega a $T(t) \propto \exp(-itE/\hbar)$ & $X(x) \propto \exp(\pm i\kappa x) \exp(-i\gamma x)$.

Cabe mencionar que haciendo el cambio de variable $\xi = x - Gt$ & $\tau = t$, la zona de interacción (II) admite una solución del tipo $\Psi_{II}(\xi, \tau) \propto e^{\pm i\kappa\xi} e^{i\tau E/\hbar}$ donde $\kappa^2 \mapsto k_0^2 - \eta^2$ en vista de que $\partial_x = \underbrace{\partial_x \xi}_{1} \partial_\xi + \underbrace{\partial_x \tau}_{0} \partial_\tau$, & $\partial_t = \underbrace{\partial_t \tau}_{1} \partial_\tau + \underbrace{\partial_t \xi}_{-G} \partial_\xi$. Sin embargo, otros tipos de soluciones conllevan a otros tipos de realizaciones [155–158] que no representan el caso que concierne a un protón estático en el origen. ■

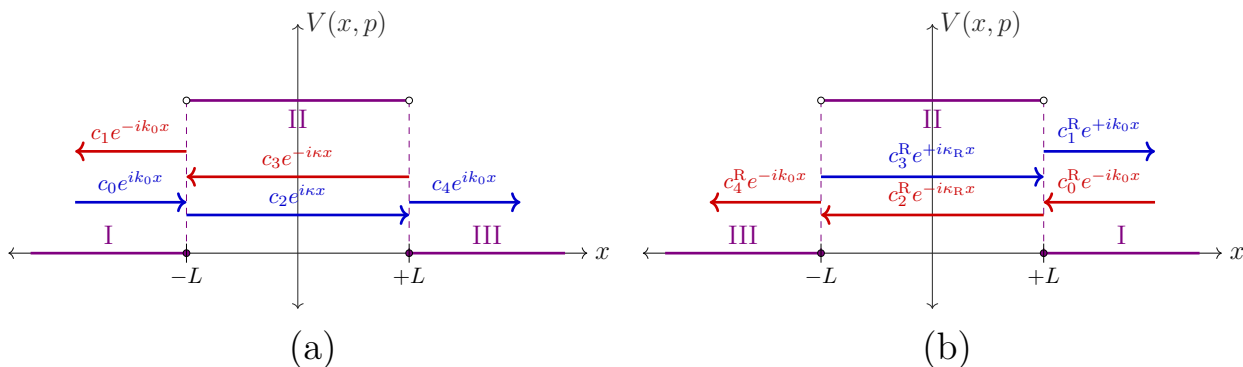


Figura 5.3: Esquema del potencial barrera en (5.23) para una onda entrante desde la a) izquierda, y b) derecha.

Al sustituir $\Psi_{II}(x)$ en (5.29) se tiene

$$c_2 \kappa_-^2 e^{i\kappa x} + c_3 \kappa_+^2 e^{-i\kappa x} + 2\gamma (c_2 \kappa_- e^{i\kappa x} - c_3 \kappa_+ e^{-i\kappa x}) = (k_0^2 - \eta^2) (c_2 e^{i\kappa x} + c_3 e^{-i\kappa x}) \quad (5.32)$$

y se observa que

- i) Las ondas que viajan hacia la izquierda experimentan un momentum disminuido ($\hbar\kappa_-$), mientras que las derechas experimentan un momentum incrementado ($\hbar\kappa_+$) —empero el efecto completo puede ser comprendido desde otra perspectiva, como se verá más adelante—.
- ii) Con $V_0 = 0$, las ondas de incidencia izquierda (derecha) perciben una barrera (pozo) de potencial de intensidad $+\gamma$ ($-\gamma$).

iii) Con $V_0 \neq 0$, las ondas experimentan un potencial —sea barrera ($V_0 > 0$) o pozo ($V_0 < 0$)— con diferente intensidad, dependiendo de su dirección de movimiento.

Proposición (Reflexión y transmisión). *Los canales de reflexión (R) y transmisión (T) para el sistema en (5.29) con soluciones (5.30) son*

$$\frac{1}{R} = \frac{\eta^2/2k_0 - \gamma}{\eta^2/2k_0 + \gamma} + \frac{\kappa^2 \csc^2(2\kappa L)}{(\eta^2/2k_0 + \gamma)^2}, \quad \wp \quad \frac{1}{T} = 1 + \frac{\eta^4/4k_0^2 - \gamma^2}{\kappa^2 \csc^2(2\kappa L)}. \quad (5.33)$$

Demostración (Reflexión y transmisión). *La transmisión $T_{\frac{c_4}{c_3}}$ y reflexión $R_{\frac{c_1}{c_2}}$ se definen a partir de la corriente de probabilidad*

$$\begin{aligned} j_{c_n} &= \frac{1}{m} \Im \left[\Psi_{c_n}^* \hat{p} \Psi_{c_n} \right] = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi_{c_n}^*(x) \partial_x \Psi_{c_n}(x) - \Psi_{c_n}(x) \partial_x \Psi_{c_n}^*(x) \right), \\ &\doteq \pm \frac{\hbar \Re[k_n]}{m} |c_n|^2 e^{\mp 2\Im[k_n]x} \quad \text{si} \quad \Psi_{c_n} = c_n e^{\pm ik_n x}, \end{aligned} \quad (5.34)$$

por lo que hay que encontrar los coeficientes c_n a partir de las condiciones de frontera

$$\begin{aligned} [\Psi_I(x) - \Psi_{II}(x)]_{x=-L} &= 0, & [\partial_x \Psi_I(x) - \partial_x \Psi_{II}(x)]_{x=-L} &= 0, \\ [\Psi_{II}(x) - \Psi_{III}(x)]_{x=L} &= 0, & [\partial_x \Psi_{II}(x) - \partial_x \Psi_{III}(x)]_{x=L} &= 0, \end{aligned} \quad (5.35a)$$

las cuales se pueden escribir de forma matricial como

$$\begin{pmatrix} e^{-ik_0L} & e^{ik_0L} & -e^{-i\kappa-L} & -e^{i\kappa+L} & 0 \\ ik_0e^{-ik_0L} & -ik_0e^{ik_0L} & -i\kappa_-e^{-i\kappa-L} & i\kappa_+e^{i\kappa+L} & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\kappa-L} & e^{-i\kappa+L} & -e^{ik_0L} \\ 0 & 0 & i\kappa_-e^{i\kappa-L} & -i\kappa_+e^{-i\kappa+L} & -ik_0e^{ik_0L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = 0. \quad (5.35b)$$

Calculando la matriz escalonada reducida por filas en términos de c_0 se obtiene

$$\frac{c_1}{c_0} = (\kappa_- - k_0)(\kappa_+ + k_0)(e^{2iL(\kappa_- + \kappa_+)} - 1)e^{-2ik_0L} \cdot \chi^{-1} = \frac{(\gamma + \eta^2/2k_0)e^{-2ik_0L}}{k_0(1 - \eta^2/2k_0^2) + i\kappa \cot(2\kappa L)}, \quad (5.36a)$$

$$\frac{c_2}{c_0} = 2k_0(\kappa_+ + k_0)e^{iL(\kappa_- - k_0)} \cdot \chi^{-1} = \frac{\frac{1}{2}(\kappa + \gamma + k_0) \exp(-iL(\kappa + \gamma + k_0))}{\kappa \cos(2\kappa L) - ik_0(1 - \eta^2/2k_0^2) \sin(2\kappa L)}, \quad (5.36b)$$

$$\frac{c_3}{c_0} = 2k_0(\kappa_- - k_0)e^{iL(2\kappa_- + \kappa_+ - k_0)} \cdot \chi^{-1} = \frac{\frac{1}{2}(\kappa - \gamma - k_0) \exp(iL(\kappa - \gamma - k_0))}{\kappa \cos(2\kappa L) - ik_0(1 - \eta^2/2k_0^2) \sin(2\kappa L)}, \quad (5.36c)$$

$$\frac{c_4}{c_0} = 2k_0(\kappa_- + \kappa_+)e^{2iL(\kappa_- - k_0)} \cdot \chi^{-1} = \frac{i\kappa e^{-2iL(\gamma + k_0)} \csc(2\kappa L)}{k_0(1 - \eta^2/2k_0^2) + i\kappa \cot(2\kappa L)}, \quad (5.36d)$$

y

$$\chi = (\kappa_- + k_0)(\kappa_+ + k_0) - e^{2iL(\kappa_- + \kappa_+)}(\kappa_- - k_0)(\kappa_+ - k_0). \quad (5.36e)$$

Además, nótese que

$$c_3(\kappa) = c_2(-\kappa), \quad \wp \quad \frac{c_1}{c_4} = \frac{(\gamma + \eta^2/2k_0)e^{2i\gamma L}}{i\kappa \csc(2\kappa L)}. \quad (5.37)$$

Entonces

$$R_{e_1} = \frac{|j_{c_1}|}{|j_{c_0}|} = \frac{|c_1|^2}{|c_0|^2} = \frac{16k_0^2(\gamma + \eta^2/2k_0)^2}{|\chi|^2 \csc^2(2\kappa L)}, \quad \& \quad T_{e_4} = \frac{|j_{c_4}|}{|j_{c_0}|} = \frac{|c_4|^2}{|c_0|^2} = \frac{16\kappa^2 k_0^2}{|\chi|^2}, \quad (5.38a)$$

donde

$$|\chi|^2 = 16k_0^2 (\kappa^2 - (\gamma^2 - \eta^4/4k_0^2) \sin^2(2\kappa L)). \quad (5.38b)$$

Finalmente, al desarrollar los términos se llega a los resultados declarados. ■

Corolario (Reflexión y transmisión). *La razón entre los canales R y T en (5.33) con $\eta = 0$ es⁹*

$$\left. \frac{R}{T} \right|_{\eta=0} = \frac{\gamma^2 \sin^2(2\kappa L)}{\kappa^2}, \quad \text{y satisface } T|_{\eta=0} - R|_{\eta=0} = 1. \quad (5.39)$$

Nótese la presencia del efecto Ramsauer–Townsend en (5.33) para $2\kappa L = n\pi$, i.e. transmisión total por resonancias. Por otro lado, $T + R \neq 1$ en general, ya que R no está necesariamente acotada en el intervalo $[0, 1]$ si $\gamma > k_0$, o bien T no es necesariamente positiva definida —o es mayor a la unidad— para algún intervalo en k_0 . Sin embargo, dado que no hay fuentes ni sumideros en este problema, lo que acaece en la zona de interacción (II) no debe ir en detrimento de las leyes de conservación —además de que el potencial (5.23) es hermitiano—. Así mismo, sólo el caso $k_0 > \gamma$ es de interés ya que el potencial γ representa la interacción débil, por lo que se requiere una normalización \mathcal{N} de tal forma que se cumpla la conservación de probabilidad convencional, en particular porque la corriente de probabilidad en la zona de interacción se ve modificada por el potencial γ a modo de «campo electrodébil externo». Así mismo, en el apéndice D se muestran diferentes casos de la reflexión y transmisión normalizada para este sistema.

Proposición (Normalización). *Al aplicar una normalización \mathcal{N} a la transmisión T en (5.33) tal que*

$$\mathcal{N} = 1 - \frac{2\gamma}{\kappa^2} \left(\gamma + \frac{\eta^2}{2k_0} \right) \sin^2(2\kappa L), \quad (5.40)$$

se satisface $\mathcal{N}T + R = 1$ para valores $\gamma/k_0 \leq (1 - V_0/E)$.

Demostración (Normalización). *Por un lado, se requiere que la reflexión (5.33) cumpla con*

$$0 \leq R \leq 1 \quad \Rightarrow \quad 0 \leq \frac{(\gamma + \eta^2/2k_0)^2}{\kappa^2 \csc^2(2\kappa L) - \gamma^2 + \eta^4/4k_0^2} \leq 1. \quad (5.41a)$$

La desigualdad izquierda se cumple trivialmente, mientras que la derecha requiere

$$\frac{2\gamma}{\kappa^2} \left(\gamma + \frac{\eta^2}{2k_0} \right) \sin^2(2\kappa L) \leq 1, \quad (5.41b)$$

y dado que $\sin^2(2\kappa L) \in [0, 1]$, se puede establecer una mínima cota superior en k_0 para todo valor de $2\kappa L$, a saber

$$k_0^3 - k_0(\gamma^2 + \eta^2) - \gamma\eta^2 \geq 0 \quad \stackrel{\gamma \neq 0}{\Leftrightarrow} \quad \frac{k_0}{\gamma} \left(\frac{k_0}{\gamma} - 1 \right) \geq \frac{\eta^2}{\gamma^2}, \quad \text{o bien } 1 - \frac{\gamma}{k_0} \geq \frac{V_0}{E}, \quad (5.41c)$$

⁹ Huelga decir que para $\gamma = 0$ se recuperan las relaciones típicas para una barrera o pozo reversibles.

y como $0 < \gamma/k_0 \leq 1$, para $V_0 < 0$ siempre se satisface la desigualdad, para $0 \leq V_0 < E$ existe un intervalo de validez, y para $V_0 > E$ nunca se cumple la desigualdad. Por otro lado, la corriente de probabilidad para $\Psi_{II}(x)$ es

$$\frac{j_{II}(x)}{j_{c_0}(x)} = \frac{\kappa_- |c_2|^2 - \kappa_+ |c_3|^2 - \gamma (c_2 c_3^* e^{i\kappa x} + c_2^* c_3 e^{-i\kappa x})}{k_0 |c_0|^2} = \frac{\kappa^2 - 2\gamma(\gamma + \eta^2/2k_0) \sin^2((L-x)\kappa)}{|\chi|^2/16k_0^2} \quad (5.42a)$$

donde se usó (5.34),

$$\frac{|c_2(\kappa)|^2}{|c_0|^2} = \frac{4k_0^2(\kappa + \gamma + k_0)^2}{|\chi|^2} = \frac{|c_3(-\kappa)|^2}{|c_0|^2}, \quad \text{y} \quad \frac{c_2^* c_3}{|c_0|^2} = \frac{-8k_0^3(\gamma + \eta^2/2k_0)e^{2i\kappa L}}{|\chi|^2}. \quad (5.42b)$$

Al evaluar (5.42a) en las interfaces (las paredes del potencial) se obtiene

$$\frac{j_{II}(L)}{j_{c_0}(L)} = \frac{16\kappa^2 k_0^2}{|\chi|^2} = T, \quad \text{y} \quad \frac{j_{II}(-L)}{j_{c_0}(-L)} = 1 - \frac{16k_0^2(\gamma + \eta^2/2k_0)^2}{|\chi|^2 \csc^2(2\kappa L)} = 1 - R = \mathcal{N}T, \quad (5.42c)$$

donde se observa que en $x = L$ se obtiene justamente T en (5.33), mientras que en $x = -L$ se debe tener la transmisión «real» $\mathcal{N}T = 1 - R$. Esto se puede entender en vista de que γ funge como «campo electrodébil externo» —ver (5.24)—, por lo que la corriente de probabilidad en II sin la contribución externa sería

$$J_{II} = \frac{1}{m} \Im [\Psi_{II}^* \hat{p} \Psi_{II}] + \frac{\hbar\gamma}{m} \rho_{II} = \frac{\hbar\kappa^2}{m} \frac{(k_0 + \gamma)}{|\chi|^2/16k_0^2} |c_0|^2, \quad \text{con} \quad \rho_{II} = \Psi^* \Psi \quad (5.43a)$$

o específicamente

$$\rho_{II}(x) = |c_2|^2 + |c_3|^2 + c_2 c_3^* e^{2i\kappa x} + c_2^* c_3 e^{-2i\kappa x} = \frac{\kappa^2 + 2k_0(\gamma + \eta^2/2k_0) \sin^2((L-x)\kappa)}{|\chi|^2/16k_0^2} |c_0|^2, \quad (5.43b)$$

recuperándose además la ec. de continuidad

$$\partial_t \rho(x, t) + \partial_x j(x, t) = 0. \quad (5.43c)$$

Usando (5.42c) y (5.34) en (5.43a)

$$\frac{J_{II}(x)}{j_{c_0}(x)} = \left(1 + \frac{\gamma}{k_0}\right) T, \quad (5.43d)$$

entonces la razón entre las corrientes (5.42a) y (5.43d)

$$\frac{j_{II}(x)}{J_{II}(x)} = \frac{1 - \frac{2\gamma}{\kappa^2}(\gamma + \eta^2/2k_0) \sin^2((L-x)\kappa)}{(1 + \gamma/k_0)} \quad (5.43e)$$

o bien la transmisión normalizada es

$$\mathcal{N}T = \frac{j_{II}(-L)}{j_{c_0}(-L)} = T \left(1 - \frac{2\gamma}{\kappa^2} \left(\gamma + \frac{\eta^2}{2k_0}\right) \sin^2((L-x)\kappa)\right) \Big|_{x=-L}. \quad (5.43f)$$

Proposición (Paridad e inversión temporal). *El caso de una onda incidente por la derecha se puede analizar notando que $\Psi^R(x)$ es la inversión temporal de la imagen especular de $\Psi(x)$ (hasta por una fase). Encontrándose que*

$$c_n^R(\kappa, k_0) = c_n^*(-\kappa, -k_0), \quad c_n^R(\gamma) = c_n(-\gamma), \quad \& \quad c_n(\kappa, k_0, \gamma) = c_n^*(-\kappa, -k_0, -\gamma). \quad (5.44)$$

Demostración (Paridad e inversión temporal). *Para la primera relación, se aplican los operadores de paridad (ϖ) e inversión temporal (Θ) a la función de onda*

$$\Theta\varpi[\Psi_{\kappa, k_0}(x)] = \Theta[\Psi_{\kappa, k_0}(-x)] = \Psi_{-\kappa, -k_0}^*(-x) = \Psi_{\kappa, k_0}^R(x). \quad (5.45a)$$

Esto es, se toma el conjugado de la función de onda refleja para el caso izquierdo $\Psi(x) \mapsto \Psi^(-x)$ y se invierten las velocidades $(k_0, \kappa) \mapsto (-k_0, -\kappa)$, obteniéndose*

$$\Theta\varpi\Psi(x) = \begin{cases} \Theta\varpi\Psi_I(x) = c_0^*(-\kappa, -k_0)e^{-ik_0x} + c_1^*(-\kappa, -k_0)e^{ik_0x} & \text{si } -x \leq -L, \\ \Theta\varpi\Psi_{II}(x) = c_2^*(-\kappa, -k_0)e^{-i\kappa+x} + c_3^*(-\kappa, -k_0)e^{i\kappa-x} & \text{si } -L < -x < L, \\ \Theta\varpi\Psi_{III}(x) = c_4^*(-\kappa, -k_0)e^{-ik_0x} & \text{si } -x \geq L, \end{cases} \quad (5.45b)$$

que debe ser igual a $\Psi^R(x)$ por (5.45a), encontrándose así que $c_n^R(\kappa, k_0) = c_n^*(-\kappa, -k_0)$.

Para la segunda relación, se aplica paridad e inversión temporal a la ec. de Schrödinger

$$\begin{aligned} \Theta\varpi \left[\frac{p^2}{2m} + V(x, p) + V(x) - E \right] \Psi(x) &\Rightarrow \Theta \left[\frac{(-p)^2}{2m} + V(-x, -p) + V(-x) - E \right] \varpi\Psi(x) \\ \Rightarrow \left[\frac{(p^*)^2}{2m} + V(-x, p^*) + V(-x) - E \right] \Theta\Psi(-x) &\Rightarrow \left[\frac{p^2}{2m} + V(x, p^*) + V(x) - E \right] \Psi^R(x) = 0, \end{aligned} \quad (5.45c)$$

donde se usó la paridad de los potenciales y (5.45a) en el último paso, asimismo nótese que usar p^* en el potencial es como decir que $\gamma \mapsto -\gamma$, entonces $c_n^R(\gamma) = c_n(-\gamma)$. Naturalmente esta relación también se obtiene al aplicar las condiciones de frontera sobre $\Psi^R(x)$ y obtener c_n^R .

Finalmente, la tercera relación es una consecuencia de las dos anteriores: la física de una onda incidente por la izquierda es congruente a una onda incidente por la derecha con el signo del potencial opuesto, i.e.

$$[\Psi_k(x)]_{-\gamma} \cong [\Psi_k^R(x)]_{\gamma}. \quad (5.45d)$$

Recapitulando, las consecuencias trascendentales del potencial que depende explícitamente del momentum —con $\eta = 0$ para una mayor apreciación— son las siguientes:

i) Al comparar $\Psi_I(x)$ con $\Psi_I^R(x)$ se observa que la reflexión adquiere una fase, e.g.

$$\frac{\Psi_I(x)}{c_0} = e^{ik_0x} + \frac{\gamma e^{-2ik_0L}}{k_0 + i\kappa \cot(2\kappa L)} e^{-ik_0x} \quad \text{vs.} \quad \frac{\Psi_I^R(x)}{c_0} = e^{-ik_0x} - \frac{\gamma e^{-2ik_0L}}{k_0 + i\kappa \cot(2\kappa L)} e^{ik_0x}, \quad (5.46a)$$

por lo que dependiendo de la dirección de la onda, ésta experimenta una barrera o un pozo (comparar con el caso $\gamma = 0 \wedge \eta \neq 0$).

- ii) El camino óptico, interpretado como la fase que adquiere la función de onda al cruzar el potencial, depende de la dirección de transmisión, esto es, las ondas izquierdas perciben una pared más gruesa (fig. 5.4a) versus las ondas derechas perciben un pozo menos ancho (fig. 5.4b), e.g.

$$\frac{\Psi_{\text{III}}(x)}{c_0} = \frac{\kappa e^{-2iL(k_0+\gamma)} e^{ik_0x}}{\kappa \cos(2\kappa L) - ik_0 \sin(2\kappa L)} \quad \text{vs.} \quad \frac{\Psi_{\text{III}}^{\text{R}}(x)}{c_0} = \frac{\kappa e^{-2iL(k_0-\gamma)} e^{-ik_0x}}{\kappa \cos(2\kappa L) - ik_0 \sin(2\kappa L)}, \quad (5.46b)$$

cuya consecuencia directa es **el cambio en las probabilidades NT y R según el escenario de incidencia** (en la fig. D.2 del apéndice D se muestra el comportamiento de dichas probabilidades). Además, esto está en acuerdo con que una barrera de potencial disminuye la curvatura de la onda (halada hacia afuera), mientras que un pozo, la aumenta (empujada hacia dentro). Esto contrasta fuertemente con la aproximación de Born que asegura la independencia del signo del potencial para la amplitud de dispersión, siempre y cuando el potencial sea lo suficientemente débil y angosto.

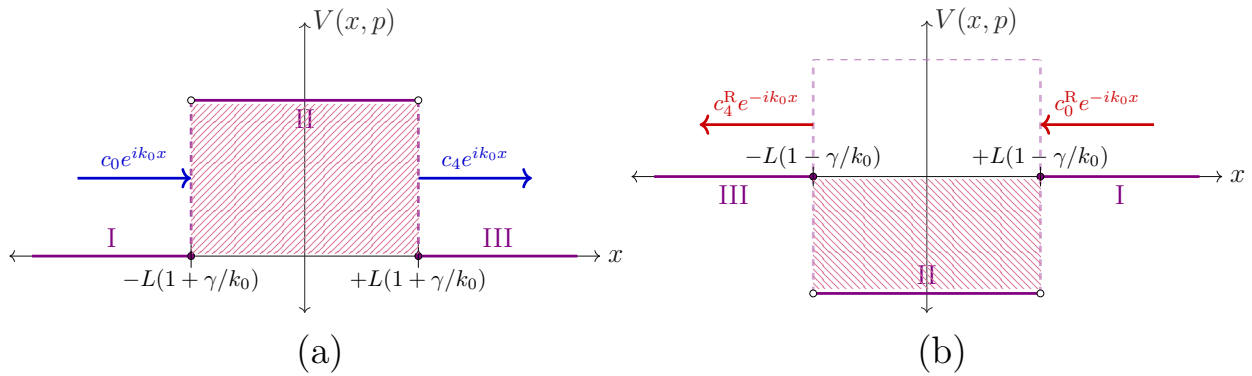
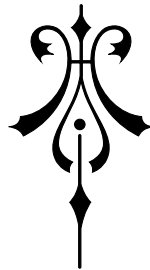


Figura 5.4: Esquema del potencial barrera en (5.23) según es percibido para una onda entrante desde a) izquierda, y b) derecha. Nótese el cambio en la longitud y el signo del potencial dependiendo de la dirección de incidencia.



Conclusiones

En esta tesis se ha discutido un problema de irreversibilidad en el tiempo y en el espacio en distintas realizaciones. En particular, se ha reportado una nueva función de Green asimétrica en forma cerrada perteneciente a sistemas irreversibles (2.16b) que no se encuentra en las referencias estándar como Grosche and Steiner [76]. La estructura meromórfica de dicha solución ha sido lo suficientemente dócil como para permitir identificar adecuadamente los rangos de energía en los que el dispositivo es efectivo. De este modo, se ha identificado cómo mediante una semi-transformada de Fourier, el propagador sufrirá los respectivos cambios debidos a la irreversibilidad. La ruptura de la simetría se localiza en un término especial de la función de Green cuyo polo está relacionado con la energía de referencia a la que opera el dispositivo. Posteriormente, ha sido propuesto y estudiado con éxito un modelo dinámico para un sistema que divide un conjunto de ondas que representan partículas independientes. Esta descripción ha sido posible a través de un operador hamiltoniano dado por (2.5a) y el potencial irreversible en (2.5b). El sistema funciona con un momentum de referencia que decide cómo dos subsistemas con diferentes temperaturas, se distribuyen en cada compartimento de la cavidad. El resultado recuerda a la acción del demonio clásico mostrado en la fig. 2.3b, como se ha confirmado al analizar la dinámica de las ondas en fig. 3.3. Como resultado interesante, la versión ondulatoria del demonio de Maxwell contiene —en su evolución— la estructura de interferencia de las alfombras (cuánticas) de Talbot en el tiempo. El lector familiarizado con las funciones *theta de Jacobi* puede encontrar en los patrones de interferencia las típicas trayectorias de valor *theta* constante que aparecen en muchas otras aplicaciones, incluyendo la factorización de números naturales usando sumas gaussianas [159]. Para tiempos largos, se puede distinguir una estructura de colapsos y resurgimientos, dicha estructura muestra las asimetrías esperadas para periodos de tiempo limitados asociados a las longitudes de Talbot, donde a diferencia del proceso clásico, no se produce una verdadera termalización debido a estos resurgimientos. El comportamiento temporal apoya las conclusiones en relación con la irreversibilidad y la aparente disminución de la entropía; y en efecto, con la definición de Shannon para una función de desorden dependiente de la base —estados de energía— se observan regímenes en los que se establecen configuraciones ordenadas a medida que transcurre el tiempo. Así mismo, también se estudiaron las densidades y las energías medias en cada compartimento en las figuras 3.2. En general, se puede afirmar que la segunda ley de la termodinámica podría restablecerse si se tiene en cuenta el trabajo medio realizado por el potencial en lugar de la evolución entrópica de las ondas solamente. Esta antigua resolución de la paradoja en la física clásica también encuentra su camino en la dinámica cuántica

sin postulados de colapso, en vista de que otras explicaciones ofrecidas hasta ahora se basan en gran medida en la teoría de la información, siempre y cuando las mediciones también formen parte del proceso de evolución.

Por otro lado, y como se mencionó en la introducción, este enfoque de irreversibilidad —llamado demonio de Maxwell— puede aplicarse a varios tipos de sistema de ondas, y prestando especial atención a las cavidades electromagnéticas, donde los operadores de onda no-hermitianos con paridad espacial impar surgen de forma natural en los medios dieléctricos, es plausible estudiar un sistema electromagnético demoníaco empleando las ecuaciones de Maxwell con una dependencia espacial y de frecuencia en la función dieléctrica (4.9) y técnicas de descomposición de modos (4.16), permitiendo así diseñar un metamaterial por yuxtaposición de capas con las propiedades buscadas, con el objetivo tanto de predecir su comportamiento general en una construcción realista, como de enfriar la radiación (así sean ondas electromagnéticas, acústicas o elásticas) mediante la separación de los componentes «caliente» y «frío» en el espacio, en particular, la fig. 4.12 es un claro reminiscente de la fig. 3.5.

En el último capítulo, se propone un proceso de dispersión mediado por una corriente neutra débil representado por un potencial que depende explícitamente del momentum (5.1) y que puede interpretarse como un demonio de Maxwell en vista de que la dispersión en la fig. 5.2 se ve modificada dependiendo de la helicidad del electrón. Por otro lado, la aproximación iconal muestra una conexión con el mecanismo de Sakharov en el que un sector de la teoría no tiene la simetría de la teoría completa; en particular, la asimetría entre materia y antimateria podría interpretarse mediante una generalización de dicho mecanismo. Así mismo, se encuentra la respectiva función de Green irreversible de este sistema en § 5.3, en analogía con la estudiada en § 2.2.3. Finalmente, se propone un potencial 1D que depende explícitamente del momentum (5.23), el cual es obtenido como una reducción a 1+1 dimensiones de la ec. de Dirac con un campo axil (5.24), por lo que una onda entrando por la izquierda o derecha es análogo a un electrón con espín arriba o abajo, respectivamente. De esta forma se encuentra que las probabilidades de reflexión y transmisión se ven modificadas por dicho potencial en vista de que la longitud del potencial percibida por la onda se ve dilatada o contraída según el escenario de incidencia, violando paridad.



Referencias

- [1] J. Struck, C. Ölschläger, M. Weinberg, P. Hauke, J. Simonet, A. Eckardt, M. Lewenstein, K. Sengstock, and P. Windpassinger. Tunable gauge potential for neutral and spinless particles in driven optical lattices. *Physical Review Letters*, 108(22):225304, may 2012. doi:[10.1103/physrevlett.108.225304](https://doi.org/10.1103/physrevlett.108.225304).
- [2] Marco Polini, Francisco Guinea, Maciej Lewenstein, Hari C. Manoharan, and Vittorio Pellegrini. Artificial honeycomb lattices for electrons, atoms and photons. *Nature Nanotechnology*, 8(9):625–633, sep 2013. doi:[10.1038/nnano.2013.161](https://doi.org/10.1038/nnano.2013.161).
- [3] Immanuel Bloch. Ultracold quantum gases in optical lattices. *Nature Physics*, 1(1):23–30, oct 2005. doi:[10.1038/nphys138](https://doi.org/10.1038/nphys138).
- [4] Matthias Meister, Albert Roura, Ernst M Rasel, and Wolfgang P Schleich. The space atom laser: an isotropic source for ultra-cold atoms in microgravity. *New Journal of Physics*, 21(1):013039, 2019. doi:[10.1088/1367-2630/aaf7b5](https://doi.org/10.1088/1367-2630/aaf7b5).
- [5] U. Kuhl, S. Barkhofen, T. Tudorovskiy, H. J. Stöckmann, T. Hossain, L. de Forges de Parny, and F. Mortessagne. Dirac point and edge states in a microwave realization of tight-binding graphene-like structures. *Physical Review B*, 82(9), sep 2010. doi:[10.1103/physrevb.82.094308](https://doi.org/10.1103/physrevb.82.094308).
- [6] J. A. Franco-Villafañe, E. Sadurní, S. Barkhofen, U. Kuhl, F. Mortessagne, and T. H. Seligman. First experimental realization of the Dirac oscillator. *Physical Review Letters*, 111(17), oct 2013. doi:[10.1103/physrevlett.111.170405](https://doi.org/10.1103/physrevlett.111.170405).
- [7] S. Barkhofen, M. Bellec, U. Kuhl, and F. Mortessagne. Disordered graphene and boron nitride in a microwave tight-binding analog. *Physical Review B*, 87(3), jan 2013. doi:[10.1103/physrevb.87.035101](https://doi.org/10.1103/physrevb.87.035101).
- [8] Matthieu Bellec, Ulrich Kuhl, Gilles Montambaux, and Fabrice Mortessagne. Tight-binding couplings in microwave artificial graphene. *Physical Review B*, 88(11), sep 2013. doi:[10.1103/physrevb.88.115437](https://doi.org/10.1103/physrevb.88.115437).
- [9] S. Longhi. Photonic realization of the relativistic Dirac oscillator. *Optics Letters*, 35(8):1302, apr 2010. doi:[10.1364/ol.35.001302](https://doi.org/10.1364/ol.35.001302).
- [10] Felix Dreisow, Matthias Heinrich, Robert Keil, Andreas Tünnermann, Stefan Nolte, Stefano Longhi, and Alexander Szameit. Classical simulation of relativistic zitterbewegung in photonic lattices. *Physical Review Letters*, 105(14), sep 2010. doi:[10.1103/physrevlett.105.143902](https://doi.org/10.1103/physrevlett.105.143902).
- [11] E. Sadurní. The Dirac–Moshinsky oscillator: theory and applications. In *American Institute of Physics Conference Series*, volume 1334, pages 249–290, 2011. doi:[10.1063/1.3555484](https://doi.org/10.1063/1.3555484).
- [12] Kenjiro K. Gomes, Warren Mar, Wonhee Ko, Francisco Guinea, and Hari C. Manoharan. Designer Dirac fermions and topological phases in molecular graphene. *Nature*, 483(7389):306–310, mar 2012. doi:[10.1038/nature10941](https://doi.org/10.1038/nature10941).

-
- [13] E. Sadurní, J. A. Franco-Villafañe, U. Kuhl, F. Mortessagne, and T. H. Seligman. Schematic baryon models, their tight binding description and their microwave realization. *New Journal of Physics*, 15(12):123014, dec 2013. doi:[10.1088/1367-2630/15/12/123014](https://doi.org/10.1088/1367-2630/15/12/123014).
- [14] A. S. Rosado, J. A. Franco-Villafañe, C. Pineda, and E. Sadurní. Stern–Gerlach splitters for lattice quasispin. *Physical Review B*, 94(4), jul 2016. doi:[10.1103/physrevb.94.045129](https://doi.org/10.1103/physrevb.94.045129).
- [15] P. Majari, E. Sadurní, M. R. Setare, J. A. Franco-Villafañe, and T. H. Seligman. Photonic realization of the κ -deformed Dirac equation. *Physical Review A*, 104(1):013522, 2021. doi:[10.1103/physreva.104.013522](https://doi.org/10.1103/physreva.104.013522).
- [16] A. J. Martínez-Galera, I. Brihuega, A. Gutiérrez-Rubio, T. Stauber, and J. M. Gómez-Rodríguez. Towards scalable nano-engineering of graphene. *Scientific Reports*, 4(1), dec 2014. doi:[10.1038/srep07314](https://doi.org/10.1038/srep07314).
- [17] Hossein Z. Jooya, Kamran Reihani, and Shih-I Chu. A graph-theoretical representation of multiphoton resonance processes in superconducting quantum circuits. *Scientific Reports*, 6(1), 2016. doi:[10.1038/srep37544](https://doi.org/10.1038/srep37544).
- [18] Kuo Yi Lim, D. J. Ripin, G. S. Petrich, L. A. Kolodziejski, E. P. Ippen, M. Mondol, Henry I. Smith, P. R. Villeneuve, S. Fan, and J. D. Joannopoulos. Photonic band-gap waveguide microcavities: Monorails and air bridges. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures*, 17(3):1171, 1999. doi:[10.1116/1.590717](https://doi.org/10.1116/1.590717).
- [19] Thomas Uehlinger, Gregor Jotzu, Michael Messer, Daniel Greif, Walter Hofstetter, Ulf Bissbort, and Tilman Esslinger. Artificial graphene with tunable interactions. *Physical Review Letters*, 111(18):185307, oct 2013. doi:[10.1103/physrevlett.111.185307](https://doi.org/10.1103/physrevlett.111.185307).
- [20] Wen-Jie Chen, Shao-Ji Jiang, Xiao-Dong Chen, Baocheng Zhu, Lei Zhou, Jian-Wen Dong, and C. T. Chan. Experimental realization of photonic topological insulator in a uniaxial metacrystal waveguide. *Nature Communications*, 5(1), 2014. doi:[10.1038/ncomms6782](https://doi.org/10.1038/ncomms6782).
- [21] Charles Poli, Matthieu Bellec, Ulrich Kuhl, Fabrice Mortessagne, and Henning Schomerus. Selective enhancement of topologically induced interface states in a dielectric resonator chain. *Nature Communications*, 6(1), 2015. doi:[10.1038/ncomms7710](https://doi.org/10.1038/ncomms7710).
- [22] Shukai Ma and Steven M. Anlage. Experimental realization of anti-unitary wave-chaotic photonic topological insulator graphs showing kramers degeneracy and symplectic ensemble statistics. *arXiv:2307.08622 [physics.optics]*, 2023. doi:[10.48550/arXiv.2307.08622](https://doi.org/10.48550/arXiv.2307.08622).
- [23] H. Y. Yuan, Weichao Yu, and Jiang Xiao. Loop theory for input-output problems in cavities. *Physical Review A*, 101(4):043824, 2020. doi:[10.1103/physreva.101.043824](https://doi.org/10.1103/physreva.101.043824).
- [24] Tristan Lawrie, Gregor Tanner, and Dimitrios Chronopoulos. A quantum graph approach to metamaterial design. *Scientific Reports*, 12(1), 2022. doi:[10.1038/s41598-022-22265-2](https://doi.org/10.1038/s41598-022-22265-2).
- [25] Marcos Moshinsky. Diffraction in time. *Physical Review*, 88(3):625–631, 1952. doi:[10.1103/physrev.88.625](https://doi.org/10.1103/physrev.88.625).
- [26] Marcos Moshinsky. Boundary conditions and time-dependent states. *Physical Review*, 84(3):525–532, 1951. doi:[10.1103/physrev.84.525](https://doi.org/10.1103/physrev.84.525).
- [27] Marcos Moshinsky. Poles of the s matrix for resonance reactions. *Physical Review*, 91(4):984–985, 1953. doi:[10.1103/physrev.91.984](https://doi.org/10.1103/physrev.91.984).
- [28] E. Sadurní, T. H. Seligman, and F. Mortessagne. Playing relativistic billiards beyond graphene. *New Journal of Physics*, 12(5):053014, may 2010. doi:[10.1088/1367-2630/12/5/053014](https://doi.org/10.1088/1367-2630/12/5/053014).
-

-
- [29] Thomas Stegmann, John A. Franco-Villafañe, Ulrich Kuhl, Fabrice Mortessagne, and Thomas H. Seligman. Transport gap engineering by contact geometry in graphene nanoribbons: Experimental and theoretical studies on artificial materials. *Physical Review B*, 95(3):035413, 2017. doi:[10.1103/physrevb.95.035413](https://doi.org/10.1103/physrevb.95.035413).
- [30] Guillermo Monsivais, Rafael Méndez-Sánchez, Alfredo de Anda, Jorge Flores, Luis Gutiérrez, and Alejandro Morales. Elastic Wannier–Stark ladders in torsional waves. *Journal of Mechanics of Materials and Structures*, 2(8):1629–1638, oct 2007. doi:[10.2140/jomms.2007.2.1629](https://doi.org/10.2140/jomms.2007.2.1629).
- [31] S. Bittner, B. Dietz, M. Miski-Oglu, A. Richter, C. Ripp, E. Sadurní, and W. P. Schleich. Bound states in sharply bent waveguides: Analytical and experimental approach. *Physical Review E*, 87(4), apr 2013. doi:[10.1103/physreve.87.042912](https://doi.org/10.1103/physreve.87.042912).
- [32] Markus K. Oberthaler, Roland Abfalterer, Stefan Bernet, Jörg Schmiedmayer, and Anton Zeilinger. Atom waves in crystals of light. *Physical Review Letters*, 77(25):4980–4983, dec 1996. doi:[10.1103/physrevlett.77.4980](https://doi.org/10.1103/physrevlett.77.4980).
- [33] E. Sadurní. Transparent lattices and their solitary waves. *Physical Review E*, 90(3), sep 2014. doi:[10.1103/physreve.90.033205](https://doi.org/10.1103/physreve.90.033205).
- [34] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Physical Review Letters*, 75(22):3969–3973, 1995. doi:[10.1103/physrevlett.75.3969](https://doi.org/10.1103/physrevlett.75.3969).
- [35] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, 269(5221):198–201, 1995. doi:[10.1126/science.269.5221.198](https://doi.org/10.1126/science.269.5221.198).
- [36] Oliver Morsch and Markus Oberthaler. Dynamics of Bose–Einstein condensates in optical lattices. *Reviews of Modern Physics*, 78(1):179–215, feb 2006. doi:[10.1103/revmodphys.78.179](https://doi.org/10.1103/revmodphys.78.179).
- [37] Chun-Chia Chen, Rodrigo González Escudero, Jiří Minář, Benjamin Pasquiou, Shayne Bennetts, and Florian Schreck. Continuous Bose-Einstein condensation. *Nature*, 606(7915):683–687, 2022. doi:[10.1038/s41586-022-04731-z](https://doi.org/10.1038/s41586-022-04731-z).
- [38] R. Verdel, V. Vitale, R. K. Panda, E. D. Donkor, A. Rodriguez, S. Lannig, Y. Deller, H. Strobel, M. K. Oberthaler, and M. Dalmonte. Data-driven discovery of relevant information in quantum simulators. *arXiv:2307.10040 [cond-mat.quant-gas]*, 2023. doi:[10.48550/arxiv.2307.10040](https://doi.org/10.48550/arxiv.2307.10040).
- [39] C. Dorso and J. Randrup. Early recognition of clusters in molecular dynamics. *Physics Letters B*, 301(4):328–333, 1993. doi:[10.1016/0370-2693\(93\)91158-j](https://doi.org/10.1016/0370-2693(93)91158-j).
- [40] P. Cordero and E. S. Hernández. Momentum-dependent potentials: Towards the molecular dynamics of fermionlike classical particles. *Physical Review E*, 51(3):2573–2580, 1995. doi:[10.1103/physreve.51.2573](https://doi.org/10.1103/physreve.51.2573).
- [41] Yasushi Nara, Tomoyuki Maruyama, and Horst Stoecker. Momentum-dependent potential and collective flows within the relativistic quantum molecular dynamics approach based on relativistic mean-field theory. *Physical Review C*, 102(2):024913, 2020. doi:[10.1103/physrevc.102.024913](https://doi.org/10.1103/physrevc.102.024913).
- [42] J. C. Maxwell. *Theory of Heat*. Cambridge University Press, 2009. doi:[10.1017/cbo9781139057943](https://doi.org/10.1017/cbo9781139057943).
- [43] Alexandre Silva, Francesco Monticone, Giuseppe Castaldi, Vincenzo Galdi, Andrea Alù, and Nader Engheta. Performing mathematical operations with metamaterials. *Science*, 343(6167):160–163, 2014. doi:[10.1126/science.1242818](https://doi.org/10.1126/science.1242818).
- [44] Farzad Zangeneh-Nejad and Romain Fleury. Performing mathematical operations using high-index acoustic metamaterials. *New Journal of Physics*, 20(7):073001, 2018. doi:[10.1088/1367-2630/aacba1](https://doi.org/10.1088/1367-2630/aacba1).
-

-
- [45] R. Hilsch. The use of the expansion of gases in a centrifugal field as cooling process. *Review of Scientific Instruments*, 18(2):108–113, 1947. doi:[10.1063/1.1740893](https://doi.org/10.1063/1.1740893).
- [46] R. Liew, J. C. H. Zeegers, J. G. M. Kuerten, and W. R. Michalek. Maxwell’s demon in the ranque-hilsch vortex tube. *Physical Review Letters*, 109(5):054503, 2012. doi:[10.1103/physrevlett.109.054503](https://doi.org/10.1103/physrevlett.109.054503).
- [47] Boye K. Ahlborn and Jeffrey M. Gordon. The vortex tube as a classic thermodynamic refrigeration cycle. *Journal of Applied Physics*, 88(6):3645–3653, 2000. doi:[10.1063/1.1289524](https://doi.org/10.1063/1.1289524).
- [48] The sorting demon of Maxwell. *Nature*, 20(501):126–126, jun 1879. doi:[10.1038/020126a0](https://doi.org/10.1038/020126a0).
- [49] L. Szilard. Über die entropieverminderung in einem thermodynamischen system bei eingriffen intelligenter wesen. *Zeitschrift für Physik*, 53(11-12):840–856, nov 1929. doi:[10.1007/bf01341281](https://doi.org/10.1007/bf01341281).
- [50] L. Brillouin. Maxwell’s demon cannot operate: Information and entropy. *Journal of Applied Physics*, 22(3):334–337, mar 1951. doi:[10.1063/1.1699951](https://doi.org/10.1063/1.1699951).
- [51] R. Landauer. Irreversibility and heat generation in the computing process. *IBM, Journal of Research and Development*, 5(3):183–191, jul 1961. doi:[10.1147/rd.53.0183](https://doi.org/10.1147/rd.53.0183).
- [52] Charles H. Bennett. The thermodynamics of computation – a review. *International Journal of Theoretical Physics*, 21(12):905–940, dec 1982. doi:[10.1007/bf02084158](https://doi.org/10.1007/bf02084158).
- [53] Seth Lloyd. Quantum-mechanical Maxwell’s demon. *Physical Review A*, 56(5):3374–3382, nov 1997. doi:[10.1103/physreva.56.3374](https://doi.org/10.1103/physreva.56.3374).
- [54] Koji Maruyama, Franco Nori, and Vlatko Vedral. Colloquium: The physics of Maxwell’s demon and information. *Reviews of Modern Physics*, 81(1):1–23, jan 2009. doi:[10.1103/revmodphys.81.1](https://doi.org/10.1103/revmodphys.81.1).
- [55] Robert J. Scully and Marlan O. Scully. *The Demon and the Quantum: From the Pythagorean Mystics to Maxwell’s Demon and Quantum Mystery*. Wiley-VCH, 2010. ISBN 978-3-527-40983-9.
- [56] Sang Wook Kim, Takahiro Sagawa, Simone De Liberato, and Masahito Ueda. Quantum szilard engine. *Physical Review Letters*, 106(7), feb 2011. doi:[10.1103/physrevlett.106.070401](https://doi.org/10.1103/physrevlett.106.070401).
- [57] Takahiro Sagawa and Masahito Ueda. Information thermodynamics: Maxwell’s demon in nonequilibrium dynamics. *arXiv:1111.5769v2 [cond-mat.stat-mech]*, 2011.
- [58] Martin Plesch, Oscar Dahlsten, John Goold, and Vlatko Vedral. Maxwell’s daemon: Information vs. particle statistics. *Scientific Reports*, 4(1), nov 2014. doi:[10.1038/srep06995](https://doi.org/10.1038/srep06995).
- [59] Harvey S. Leff and Andrew F. Rex. *Maxwell’s Demon: Entropy, Information, Computing*. Bonnier Publishing Fiction, 2014. URL www.jstor.org/stable/j.ctt7zts1p.
- [60] Eric Lutz and Sergio Ciliberto. Information: From Maxwell’s demon to Landauer’s eraser. *Physics Today*, 68(9):30–35, sep 2015. doi:[10.1063/pt.3.2912](https://doi.org/10.1063/pt.3.2912).
- [61] Andrew Rex. Maxwell’s demon – a historical review. *Entropy*, 19(6):240, may 2017. doi:[10.3390/e19060240](https://doi.org/10.3390/e19060240).
- [62] M. Naghiloo, J. J. Alonso, A. Romito, E. Lutz, and K. W. Murch. Information gain and loss for a quantum Maxwell’s demon. *Physical Review Letters*, 121(3), jul 2018. doi:[10.1103/physrevlett.121.030604](https://doi.org/10.1103/physrevlett.121.030604).
- [63] Marlan O. Scully. Extracting work from a single thermal bath via quantum negentropy. *Physical Review Letters*, 87(22), nov 2001. doi:[10.1103/physrevlett.87.220601](https://doi.org/10.1103/physrevlett.87.220601).
-

-
- [64] Gabriel N. Price, S. Travis Bannerman, Kirsten Viering, Edvardas Narevicius, and Mark G. Raizen. Single-photon atomic cooling. *Physical Review Letters*, 100(9), mar 2008. doi:[10.1103/physrevlett.100.093004](https://doi.org/10.1103/physrevlett.100.093004).
- [65] Patrice A. Camati, John P. S. Peterson, Tiago B. Batalhão, Kaonan Micadei, Alexandre M. Souza, Roberto S. Sarthour, Ivan S. Oliveira, and Roberto M. Serra. Experimental rectification of entropy production by Maxwell’s demon in a quantum system. *Physical Review Letters*, 117(24), dec 2016. doi:[10.1103/physrevlett.117.240502](https://doi.org/10.1103/physrevlett.117.240502).
- [66] Nathanaël Cottet, Sébastien Jezouin, Landry Bretheau, Philippe Campagne-Ibarcq, Quentin Ficheux, Janet Anders, Alexia Auffèves, Rémi Azouit, Pierre Rouchon, and Benjamin Huard. Observing a quantum Maxwell demon at work. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 114(29):7561–7564, jul 2017. doi:[10.1073/pnas.1704827114](https://doi.org/10.1073/pnas.1704827114).
- [67] Cyril Elouard, David Herrera-Martí, Benjamin Huard, and Alexia Auffèves. Extracting work from quantum measurement in Maxwell’s demon engines. *Physical Review Letters*, 118(26), jun 2017. doi:[10.1103/physrevlett.118.260603](https://doi.org/10.1103/physrevlett.118.260603).
- [68] A. Ruschhaupt, J. G. Muga, and M. G. Raizen. One-photon atomic cooling with an optical Maxwell demon valve. *Journal of Physics B*, 39(18):3833–3838, sep 2006. doi:[10.1088/0953-4075/39/18/012](https://doi.org/10.1088/0953-4075/39/18/012).
- [69] Mihai D. Vidrighin, Oscar Dahlsten, Marco Barbieri, M. S. Kim, Vlatko Vedral, and Ian A. Walmsley. Photonic Maxwell’s demon. *Physical Review Letters*, 116(5), feb 2016. doi:[10.1103/PhysRevLett.116.050401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.050401).
- [70] Aishwarya Kumar, Tsung-Yao Wu, Felipe Giraldo, and David S. Weiss. Sorting ultracold atoms in a three-dimensional optical lattice in a realization of Maxwell’s demon. *Nature*, 561(7721):83–87, sep 2018. doi:[10.1038/s41586-018-0458-7](https://doi.org/10.1038/s41586-018-0458-7).
- [71] Y. Masuyama, K. Funo, Y. Murashita, A. Noguchi, S. Kono, Y. Tabuchi, R. Yamazaki, M. Ueda, and Y. Nakamura. Information-to-work conversion by Maxwell’s demon in a superconducting circuit quantum electrodynamic system. *Nature Communications*, 9(1), mar 2018. doi:[10.1038/s41467-018-03686-y](https://doi.org/10.1038/s41467-018-03686-y).
- [72] Baldo-Luis Najera-Santos, Patrice A. Camati, Valentin Métillon, Michel Brune, Jean-Michel Raimond, Alexia Auffèves, and Igor Dotsenko. Autonomous Maxwell’s demon in a cavity QED system. *arXiv:2001.07445v1 [quant-ph]*, 2020.
- [73] Björn Annby-Andersson, Peter Samuelsson, Ville F. Maisi, and Patrick P. Potts. Maxwell’s demon in a double quantum dot with continuous charge detection. *Physical Review B*, 101(16):165404, apr 2020. doi:[10.1103/physrevb.101.165404](https://doi.org/10.1103/physrevb.101.165404).
- [74] Kensaku Chida, Samarth Desai, Katsuhiko Nishiguchi, and Akira Fujiwara. Power generator driven by Maxwell’s demon. *Nature Communications*, 8(1), may 2017. doi:[10.1038/ncomms15301](https://doi.org/10.1038/ncomms15301).
- [75] Gernot Schaller, Javier Cerrillo, Georg Engelhardt, and Philipp Strasberg. Electronic Maxwell demon in the coherent strong-coupling regime. *Physical Review B*, 97(19), may 2018. doi:[10.1103/physrevb.97.195104](https://doi.org/10.1103/physrevb.97.195104).
- [76] Christian Grosche and Frank Steiner. *Handbook of Feynman Path Integrals*. Springer Berlin Heidelberg, 1998. ISBN 978-3-662-14761-0. doi:[10.1007/bfb0109520](https://doi.org/10.1007/bfb0109520).
- [77] L. S. Schulman. *Techniques and Applications of Path Integration*. Dover Publications, 2005. ISBN 0486445283.
- [78] Hans Jürgen Stöckmann. *Quantum Chaos: An Introduction*. Cambridge University Press, 1999. doi:[10.1017/cbo9780511524622](https://doi.org/10.1017/cbo9780511524622).
- [79] S. Bittner, B. Dietz, M. Miski-Oglu, P. Oria Iriarte, A. Richter, and F. Schäfer. Observation of a Dirac point in microwave experiments with a photonic crystal modeling graphene. *Physical Review B*, 82(1), jul 2010. doi:[10.1103/physrevb.82.014301](https://doi.org/10.1103/physrevb.82.014301).
-

-
- [80] B. Dietz, T. Friedrich, H. L. Harney, M. Miski-Oglu, A. Richter, F. Schäfer, and H. A. Weidenmüller. Induced time-reversal symmetry breaking observed in microwave billiards. *Physical Review Letters*, 98(7):074103, 2007. doi:[10.1103/physrevlett.98.074103](https://doi.org/10.1103/physrevlett.98.074103).
- [81] Barbara Dietz and Achim Richter. Intermediate statistics in singular quarter-ellipse shaped microwave billiards. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 55(31):314001, 2022. doi:[10.1088/1751-8121/ac6915](https://doi.org/10.1088/1751-8121/ac6915).
- [82] J. H. Christenson, J. W. Cronin, V. L. Fitch, and R. Turlay. Evidence for the 2π decay of the k_2^0 meson. *Physical Review Letters*, 13(4):138–140, 1964. doi:[10.1103/physrevlett.13.138](https://doi.org/10.1103/physrevlett.13.138).
- [83] A. Love, G.G. Ross, and D.V. Nanopoulos. Muon-proton scattering and the effect of neutral currents in the scaling region. *Nuclear Physics B*, 49:513–524, 1972. doi:[10.1016/0550-3213\(72\)90616-5](https://doi.org/10.1016/0550-3213(72)90616-5).
- [84] Marion Fischer-Waetzmann. Analysis of parity-violating asymmetries in elastic electron-nucleus scattering. *Zeitschrift für Physik A Atoms and Nuclei*, 302(1):15–23, 1981. doi:[10.1007/bf01425098](https://doi.org/10.1007/bf01425098).
- [85] G. Rufa. Parity-violating asymmetry in elastic electron scattering on nuclei: Partial-wave analysis. *Nuclear Physics A*, 384(3):273–286, 1982. doi:[10.1016/0375-9474\(82\)90335-9](https://doi.org/10.1016/0375-9474(82)90335-9).
- [86] T.W Donnelly and R.D Peccei. Neutral current effects in nuclei. *Physics Reports*, 50(1):1–85, 1979. doi:[10.1016/0370-1573\(79\)90010-3](https://doi.org/10.1016/0370-1573(79)90010-3).
- [87] John von Neumann. *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Springer, 1932. ISBN 978-3-540-59207-5. doi:[10.1007/978-3-642-61409-5](https://doi.org/10.1007/978-3-642-61409-5).
- [88] E. C. G. Sudarshan, P. M. Mathews, and Jayaseetha Rau. Stochastic dynamics of quantum-mechanical systems. *Physical Review*, 121(3):920–924, 1961. doi:[10.1103/physrev.121.920](https://doi.org/10.1103/physrev.121.920).
- [89] A. Kossakowski. On quantum statistical mechanics of non-hamiltonian systems. *Reports on Mathematical Physics*, 3(4):247–274, 1972. doi:[10.1016/0034-4877\(72\)90010-9](https://doi.org/10.1016/0034-4877(72)90010-9).
- [90] V. Gorini, A. Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan. Completely positive dynamical semigroups of N-level systems. *Journal of Mathematical Physics*, 17(5):821, 1976. doi:[10.1063/1.522979](https://doi.org/10.1063/1.522979).
- [91] G. Lindblad. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Communications in Mathematical Physics*, 48(2):119–130, 1976. doi:[10.1007/bf01608499](https://doi.org/10.1007/bf01608499).
- [92] F. Benatti and H. Narnhofer. Entropy behaviour under completely positive maps. *Letters in Mathematical Physics*, 15(4):325–334, 1988. doi:[10.1007/bf00419590](https://doi.org/10.1007/bf00419590).
- [93] Jorge Israel Castro-Alatorre. *La ecuación de von-Neumann relativista y ensambles de Dirac*. Tesis de maestría, Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 2018. URL www.bibliocatalogo.buap.mx/record=b1427263.
- [94] L. H. Thomas. The motion of the spinning electron. *Nature*, 117(2945):514–514, 1926. doi:[10.1038/117514a0](https://doi.org/10.1038/117514a0).
- [95] Frank Wilczek. Majorana returns. *Nature Physics*, 5(9):614–618, 2009. doi:[10.1038/nphys1380](https://doi.org/10.1038/nphys1380).
- [96] M. Moshinsky and C. Quesne. Linear canonical transformations and their unitary representations. *Journal of Mathematical Physics*, 12(8):1772–1780, 1971. doi:[10.1063/1.1665805](https://doi.org/10.1063/1.1665805).
- [97] J. B. Majer, J. Peguiron, M. Grifoni, M. Tusveld, and J. E. Mooij. Quantum ratchet effect for vortices. *Physical Review Letters*, 90(5):056802, 2003. doi:[10.1103/physrevlett.90.056802](https://doi.org/10.1103/physrevlett.90.056802).
-

-
- [98] Sergey Smirnov, Dario Bercioux, Milena Grifoni, and Klaus Richter. Interplay between quantum dissipation and an in-plane magnetic field in the spin ratchet effect. *Physical Review B*, 78(24):245323, 2008. doi:[10.1103/physrevb.78.245323](https://doi.org/10.1103/physrevb.78.245323).
- [99] Marcos Moshinsky, Emerson Sadurní, and Adolfo del Campo. Alternative method for determining the Feynman propagator of a non-relativistic quantum mechanical problem. *Symmetry, Integrability and Geometry: Methods and Applications*, nov 2007. doi:[10.3842/sigma.2007.110](https://doi.org/10.3842/sigma.2007.110).
- [100] S. M. Blinder. Green's function and propagator for the one-dimensional δ -function potential. *Physical Review A*, 37(3):973–976, 1988. doi:[10.1103/physreva.37.973](https://doi.org/10.1103/physreva.37.973).
- [101] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series, and Products*. Elsevier LTD, Oxford, 2014. ISBN 0123849330.
- [102] A. P. Prudnikov, Yu. A. Brychkov, and O. I. Marichev. *Integral and Series Volume 2: Special Functions*. CRC Press, 1992. ISBN 2881240909.
- [103] Yael Hernández, Alfonso Rosado, and Emerson Sadurní. The stabilizer group of honeycomb lattices and its application to deformed monolayers. *Journal of Physics A*, 49(48):485201, nov 2016. doi:[10.1088/1751-8113/49/48/485201](https://doi.org/10.1088/1751-8113/49/48/485201).
- [104] Alfred Wehrl. General properties of entropy. *Reviews of Modern Physics*, 50(2):221–260, apr 1978. doi:[10.1103/revmodphys.50.221](https://doi.org/10.1103/revmodphys.50.221).
- [105] Sebastian Deffner. *Quantum Thermodynamics*. IOP Publishing, 2019. doi:[10.1088/2053-2571/ab21c6](https://doi.org/10.1088/2053-2571/ab21c6).
- [106] Gerardo Carmona. *Termodinámica clásica*. UNAM, Facultad de Ciencias, México, D.F., 2012. ISBN 978-970-32-4497-3.
- [107] Wolfgang P. Schleich. *Quantum Optics in Phase Space*. Wiley, feb 2001. ISBN 9783527294350. doi:[10.1002/3527602976](https://doi.org/10.1002/3527602976).
- [108] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons, 3 edition, 1999.
- [109] A. S. Markus. *Introduction to the Spectral Theory of Polynomial Operator Pencils*. American Mathematical Society, 2012. ISBN 978-0821890820.
- [110] Vyacheslav Pivovarchik Manfred Möller. *Spectral Theory of Operator Pencils, Hermite-Biehler Functions, and their Applications*. Springer-Verlag GmbH, 2015. ISBN 3319170694.
- [111] Lorea Chaos-Cador and Gastón García-Calderón. Resonant states for complex potentials and spectral singularities. *Physical Review A*, 87(4):042114, 2013. doi:[10.1103/physreva.87.042114](https://doi.org/10.1103/physreva.87.042114).
- [112] Jorge Villavicencio, Roberto Romo, and Alberto Hernández-Maldonado. Absorption dynamics and delay time in complex potentials. *Physica Scripta*, 93(5):055201, 2018. doi:[10.1088/1402-4896/aab41c](https://doi.org/10.1088/1402-4896/aab41c).
- [113] Jun J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, New York, revised edition, 1994. ISBN 0-805-38291-7. doi:[10.1063/1.2815083](https://doi.org/10.1063/1.2815083).
- [114] Leslie Hogben. *Handbook of Linear Algebra*. Taylor & Francis Ltd, 2 edition, 2016. ISBN 1138199893.
- [115] R. T. Gregory and E. V. Krishnamurthy. *Methods and Applications of Error-Free Computation*. Springer New York, 2011. ISBN 1461297540.
- [116] Adi Ben-Israel and Thomas Greville. *Generalized Inverses*. Springer New York, 2003. ISBN 0387002936.
-

-
- [117] M. S. Safronova, D. Budker, D. DeMille, Derek F. Jackson Kimball, A. Derevianko, and Charles W. Clark. Search for new physics with atoms and molecules. *Reviews of Modern Physics*, 90(2):025008, 2018. doi:[10.1103/revmodphys.90.025008](https://doi.org/10.1103/revmodphys.90.025008).
- [118] C. S. Wu, E. Ambler, R. W. Hayward, D. D. Hoppes, and R. P. Hudson. Experimental test of parity conservation in beta decay. *Physical Review*, 105(4):1413–1415, 1957. doi:[10.1103/physrev.105.1413](https://doi.org/10.1103/physrev.105.1413).
- [119] F.J. Hasert et al. Observation of neutrino-like interactions without muon or electron in the gargamelle neutrino experiment. *Physics Letters B*, 46(1):138–140, 1973. doi:[10.1016/0370-2693\(73\)90499-1](https://doi.org/10.1016/0370-2693(73)90499-1).
- [120] Steven J. Pollock. Signatures of an extra Z^0 gauge boson in elastic e^- -proton scattering. *Physical Review D*, 39(1):163–168, 1989. doi:[10.1103/physrevd.39.163](https://doi.org/10.1103/physrevd.39.163).
- [121] W. J. Marciano and A. I. Sanda. Parity violation in atoms induced by radiative corrections. *Physical Review D*, 17(11):3055–3064, 1978. doi:[10.1103/physrevd.17.3055](https://doi.org/10.1103/physrevd.17.3055).
- [122] T.W. Donnelly, M.J. Musolf, W.M. Alberico, M.B. Barbaro, A. De Pace, and A. Molinari. Parity-violating quasielastic electron scattering. *Nuclear Physics A*, 541(4):525–577, 1992. doi:[10.1016/0375-9474\(92\)90220-e](https://doi.org/10.1016/0375-9474(92)90220-e).
- [123] P. Souder and K. D. Paschke. Parity violation in electron scattering. *Frontiers of Physics*, 11(1), 2015. doi:[10.1007/s11467-015-0482-0](https://doi.org/10.1007/s11467-015-0482-0).
- [124] Ross D. Young. Strangeness in the proton. *Nature*, 544(7651):419–420, 2017. doi:[10.1038/nature21909](https://doi.org/10.1038/nature21909).
- [125] A. S. Rosado-González, J. I. Castro-Alatorre, and E. Sadurní. Relativistic density operators: Dirac dynamics, open quantum systems and non-standard neutrino interactions. *The European Physical Journal Plus*, 137(8), 2022. doi:[10.1140/epjp/s13360-022-03111-w](https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-022-03111-w).
- [126] K. Wódkiewicz. Fermi pseudopotential in arbitrary dimensions. *Physical Review A*, 43(1):68–76, 1991. doi:[10.1103/physreva.43.68](https://doi.org/10.1103/physreva.43.68).
- [127] M. A. B. Bég and R. C. Furlong. $\lambda\phi^4$ theory in the nonrelativistic limit. *Physical Review D*, 31(6):1370–1373, 1985. doi:[10.1103/physrevd.31.1370](https://doi.org/10.1103/physrevd.31.1370).
- [128] Su-Long Nyeo. Regularization methods for delta-function potential in two-dimensional quantum mechanics. *American Journal of Physics*, 68(6):571–575, 2000. doi:[10.1119/1.19485](https://doi.org/10.1119/1.19485).
- [129] E. Fermi. Versuch einer theorie der β -strahlen. *Zeitschrift für Physik*, 88(3-4):161–177, 1934. doi:[10.1007/bf01351864](https://doi.org/10.1007/bf01351864).
- [130] G. C. Wick. Sugli elementi radioattivi di F. Joliot e I. Curie. *Accademia nazionale dei lincei. Classe di scienze fisiche, matematiche e naturali.*, 19(24):319, 1934.
- [131] Luis W. Alvarez. Nuclear K electron capture. *Physical Review*, 52(2):134–135, 1937. doi:[10.1103/physrev.52.134](https://doi.org/10.1103/physrev.52.134).
- [132] Raymond Daudel, Maurice Jean, and Marcel Lecoïn. Sur la possibilité d’existence d’un type particulier de radioactivité phénomène de création e. *Journal de Physique et le Radium*, 8(8):238–243, 1947. doi:[10.1051/jphysrad:0194700808023800](https://doi.org/10.1051/jphysrad:0194700808023800).
- [133] M. Goeppert-Mayer. Double beta-disintegration. *Physical Review*, 48(6):512–516, 1935. doi:[10.1103/physrev.48.512](https://doi.org/10.1103/physrev.48.512).
- [134] The IceCube Collaboration. Detection of a particle shower at the Glashow resonance with IceCube. *Nature*, 591(7849):220–224, 2021. doi:[10.1038/s41586-021-03256-1](https://doi.org/10.1038/s41586-021-03256-1).
-

-
- [135] Carla Distefano. Giant ice cube hints at the existence of cosmic antineutrinos. *Nature*, 591(7849):206–207, 2021. doi:[10.1038/d41586-021-00486-1](https://doi.org/10.1038/d41586-021-00486-1).
- [136] Antonino Pullia and Jean-Pierre Vialle. Weak neutral currents discovery: a giant step for particle physics. *Europhysics News*, 41(1):23–26, 2010. doi:[10.1051/epn/2010103](https://doi.org/10.1051/epn/2010103).
- [137] K.S. Kumar, Sonny Mantry, W.J. Marciano, and P.A. Souder. Low-energy measurements of the weak mixing angle. *Annual Review of Nuclear and Particle Science*, 63(1):237–267, 2013. doi:[10.1146/annurev-nucl-102212-170556](https://doi.org/10.1146/annurev-nucl-102212-170556).
- [138] Kurt Gottfried and Tung-Mow Yan. *Quantum Mechanics: Fundamentals*. Springer New York, 2004. ISBN 0387220232.
- [139] Giulia Pancheri and Yogendra N. Srivastava. Introduction to the physics of the total cross section at LHC. *The European Physical Journal C*, 77(3), 2017. doi:[10.1140/epjc/s10052-016-4585-8](https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-016-4585-8).
- [140] M Kupczynski. Possible violation of the optical theorem in LHC experiments. *Physica Scripta*, T163:014021, 2014. doi:[10.1088/0031-8949/2014/t163/014021](https://doi.org/10.1088/0031-8949/2014/t163/014021).
- [141] Alexey V. Krasavin, Paulina Segovia, Rostyslav Dubrovka, Nicolas Olivier, Gregory A. Wurtz, Pavel Ginzburg, and Anatoly V. Zayats. Generalization of the optical theorem: experimental proof for radially polarized beams. *Light: Science & applications*, 7(1), 2018. doi:[10.1038/s41377-018-0025-x](https://doi.org/10.1038/s41377-018-0025-x).
- [142] Andrei D. Sakharov. Violation of CP invariance, C asymmetry, and baryon asymmetry of the universe. *Soviet Physics Uspekhi*, 34(5):392–393, 1967. doi:[10.1070/pu1991v034n05abeh002497](https://doi.org/10.1070/pu1991v034n05abeh002497).
- [143] D. Androić *et al.* (Qweak Collaboration). First determination of the weak charge of the proton. *Physical Review Letters*, 111(14):141803, 2013. doi:[10.1103/physrevlett.111.141803](https://doi.org/10.1103/physrevlett.111.141803).
- [144] The Jefferson Lab Qweak Collaboration. Precision measurement of the weak charge of the proton. *Nature*, 557(7704):207–211, 2018. doi:[10.1038/s41586-018-0096-0](https://doi.org/10.1038/s41586-018-0096-0).
- [145] J. Chadwick. Possible existence of a neutron. *Nature*, 129(3252):312–312, 1932. doi:[10.1038/129312a0](https://doi.org/10.1038/129312a0).
- [146] S. M. Bilenky. The history of neutrino oscillations. *Physica Scripta*, T121:17–22, 2005. doi:[10.1088/0031-8949/2005/t121/001](https://doi.org/10.1088/0031-8949/2005/t121/001).
- [147] P. A. M. Dirac. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 117(778):610–624, 1928. doi:[10.1098/rspa.1928.0023](https://doi.org/10.1098/rspa.1928.0023).
- [148] C.Y. Prescott, W.B. Atwood, R.L.A. Cottrell, H. DeStaebler, Edward L. Garwin, A. Gonidec, R.H. Miller, L.S. Rochester, T. Sato, D.J. Sherden, C.K. Sinclair, S. Stein, R.E. Taylor, J.E. Clendenin, V.W. Hughes, N. Sasao, K.P. Schüller, M.G. Borghini, K. Lübelmeyer, and W. Jentschke. Parity non-conservation in inelastic electron scattering. *Physics Letters B*, 77(3):347–352, 1978. doi:[10.1016/0370-2693\(78\)90722-0](https://doi.org/10.1016/0370-2693(78)90722-0).
- [149] E. N. Fortson and L. Wilets. Parity nonconservation in atoms: Status of theory and experiment. In *Advances in Atomic and Molecular Physics*, pages 319–373. Elsevier, 1980. doi:[10.1016/s0065-2199\(08\)60011-1](https://doi.org/10.1016/s0065-2199(08)60011-1).
- [150] T. Allison *et al.* The Qweak experimental apparatus. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 781:105–133, 2015. doi:[10.1016/j.nima.2015.01.023](https://doi.org/10.1016/j.nima.2015.01.023).
- [151] M. Cadeddu and F. Dordei. Reinterpreting the weak mixing angle from atomic parity violation in view of the Cs neutron rms radius measurement from COHERENT. *Physical Review D*, 99(3):033010, 2019. doi:[10.1103/physrevd.99.033010](https://doi.org/10.1103/physrevd.99.033010).
-

- [152] D. Androić *et al.* (Qweak Collaboration). Parity-violating inelastic electron-proton scattering at low Q^2 above the resonance region. *Physical Review C*, 101(5):055503, 2020. doi:[10.1103/physrevc.101.055503](https://doi.org/10.1103/physrevc.101.055503).
- [153] D. Androić *et al.* (Qweak Collaboration). Determination of the ^{27}Al neutron distribution radius from a parity-violating electron scattering measurement. *Physical Review Letters*, 128(13):132501, 2022. doi:[10.1103/physrevlett.128.132501](https://doi.org/10.1103/physrevlett.128.132501).
- [154] R. L. Workman *et al.* (Particle Data Group). Review of particle physics. *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 2022(8), 2022. doi:[10.1093/ptep/ptac097](https://doi.org/10.1093/ptep/ptac097). URL <https://pdg.lbl.gov/>.
- [155] Lawrence H. Buch and Harry H. Denman. Solution of the Schrödinger equation for some electric field problems. *American Journal of Physics*, 42(4):304–309, 1974. doi:[10.1119/1.1987677](https://doi.org/10.1119/1.1987677).
- [156] Daniel M. Greenberger. A new non-local effect in quantum mechanics. *Physica B+C*, 151(1-2):374–377, 1988. doi:[10.1016/0378-4363\(88\)90198-2](https://doi.org/10.1016/0378-4363(88)90198-2).
- [157] D. N. Pinder. The contracting square quantum well. *American Journal of Physics*, 58(1):54–58, 1990. doi:[10.1119/1.16319](https://doi.org/10.1119/1.16319).
- [158] Sara Di Martino, Fabio Anzà, Paolo Facchi, Andrzej Kossakowski, Giuseppe Marmo, Antonino Messina, Benedetto Militello, and Saverio Pascazio. A quantum particle in a box with moving walls. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 46(36):365301, 2013. doi:[10.1088/1751-8113/46/36/365301](https://doi.org/10.1088/1751-8113/46/36/365301).
- [159] Wolfgang Schleich. Factorization of numbers and gauss sums. In *Conference on Coherence and Quantum*. OSA, 2007. doi:[10.1364/cqo.2007.cmh2](https://doi.org/10.1364/cqo.2007.cmh2).
- [160] Julien Bensa, Stefan Bilbao, Richard Kronland-Martinet, and Julius O. Smith. The simulation of piano string vibration: From physical models to finite difference schemes and digital waveguides. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 114(2):1095–1107, 2003. doi:[10.1121/1.1587146](https://doi.org/10.1121/1.1587146).

Apéndice A

Algunas identidades de sumas infinitas

Las sumas en (3.4a) convergen según:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^2 - p^2} = \frac{\pi}{4p} \tan\left(\frac{\pi p}{2}\right), \quad (\text{A.1a})$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^2 - p^2} = \frac{1}{2p^2} - \frac{\pi}{4p} \cot\left(\frac{\pi p}{2}\right). \quad (\text{A.1b})$$

$$8p \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{(2n)^2 - (2p)^2} = \psi^0(N-p) - \psi^0(N+p) + \psi^0(1+p) - \psi^0(1-p), \quad (\text{A.1c})$$

donde $\psi^0(z)$ es la función digamma (ver por ejemplo § 8.36 de Gradshteyn and Ryzhik [101] o § 2.3 de Prudnikov et al. [102]).

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\delta_{n, \llbracket a/\pi \rrbracket}}{(2n)^2 - p^2} = \frac{1}{4\llbracket a/\pi \rrbracket - p^2}, \quad \llbracket a/\pi \rrbracket \geq 1. \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} \frac{8p}{ie^{-2iy}} \sum_{n=1}^{N-1} \frac{\sin(2ny)}{(2n)^2 - p^2} &= (e^{-2iy})^{N-1} \left(\Phi\left(e^{-2iy}, 1, N + \frac{p}{2}\right) - \Phi\left(e^{-2iy}, 1, N - \frac{p}{2}\right) \right) \\ &+ (e^{2iy})^{N+1} \left(\Phi\left(e^{2iy}, 1, N - \frac{p}{2}\right) - \Phi\left(e^{2iy}, 1, N + \frac{p}{2}\right) \right) \\ &- \Phi\left(e^{-2iy}, 1, \frac{p}{2} + 1\right) + \Phi\left(e^{-2iy}, 1, 1 - \frac{p}{2}\right) \\ &+ e^{4iy} \left(\Phi\left(e^{2iy}, 1, \frac{p}{2} + 1\right) - \Phi\left(e^{2iy}, 1, 1 - \frac{p}{2}\right) \right), \end{aligned} \quad (\text{A.3a})$$

donde $\Phi(z, s, a)$ es la función trascendental de Lerch (ver por ejemplo § 9.55 de Gradshteyn and Ryzhik [101]).

$$\begin{aligned} \frac{8p}{ie^{-2iy}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(2ny)}{(2n)^2 - p^2} &= \Phi\left(e^{-2iy}, 1, \frac{2-p}{2}\right) - \Phi\left(e^{-2iy}, 1, \frac{p+2}{2}\right) \\ &\quad - e^{4iy} \Phi\left(e^{2iy}, 1, \frac{2-p}{2}\right) + e^{4iy} \Phi\left(e^{2iy}, 1, \frac{p+2}{2}\right). \end{aligned} \quad (\text{A.3b})$$

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Theta(\llbracket a/\pi \rrbracket - n) - \Theta(n - \llbracket a/\pi \rrbracket)}{b(2n)^2 - E} &= \frac{\psi^0(-\sqrt{E/4b} + \llbracket a/\pi \rrbracket) - \psi^0(\sqrt{E/4b} + \llbracket a/\pi \rrbracket)}{4\sqrt{bE}} \\ &\quad + \frac{-H_{\llbracket a/\pi \rrbracket + \frac{\sqrt{E}}{2\sqrt{b}}} + H_{\llbracket a/\pi \rrbracket - \frac{\sqrt{E}}{2\sqrt{b}}} + \frac{2\sqrt{b}}{\sqrt{E}} - \pi \cot\left(\frac{\pi\sqrt{E}}{2\sqrt{b}}\right)}{4\sqrt{b}\sqrt{E}}, \quad \llbracket a/\pi \rrbracket > 1, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$$(\text{A.5})$$

donde $\psi^0(z)$ es la función digamma y H_n el número armónico.

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\left(\Theta(\llbracket a/\pi \rrbracket - n) - \Theta(n - \llbracket a/\pi \rrbracket)\right)^2}{b(2n)^2 - E} = \frac{1}{2E} - \frac{\pi \cot\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{E}{b}}\right)}{4\sqrt{bE}} + \frac{1}{E - 4b\llbracket a/\pi \rrbracket^2}, \quad \llbracket a/\pi \rrbracket > 1. \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} \frac{8p}{e^{-iy}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos((2n-1)y)}{(2n-1)^2 - p^2} &= \Phi\left(e^{-2iy}, 1, \frac{1-p}{2}\right) - \Phi\left(e^{-2iy}, 1, \frac{p+1}{2}\right) \\ &\quad + e^{2iy} \Phi\left(e^{2iy}, 1, \frac{1-p}{2}\right) - e^{2iy} \Phi\left(e^{2iy}, 1, \frac{p+1}{2}\right). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Apéndice B

Ejemplo de aplicación de un haz matricial a una ecuación diferencial parcial

Es instructivo analizar la metodología del haz matricial aplicado a la ecuación diferencial parcial (EDP) del tipo

$$\left(\partial_t^2 + 2\alpha\partial_t - 2\beta\partial_t\partial_x^2 - c_T^2\partial_x^2 + c_R^2\partial_x^4\right)u(x, t) = 0, \quad \text{con } u(0, t) = u(L, t) = 0. \quad (\text{B.1})$$

que corresponde al modelo de una cuerda rígida con amortiguamiento [160]. El término con α es el amortiguamiento típico por el aire (depende de la velocidad), mientras que el término con β es un amortiguamiento termoelástico y genera dispersión.¹ Tomando la transformada de Fourier en t de la EDP se obtiene

$$\left(-\omega^2 + 2\alpha(-i\omega) - 2\beta(-i\omega)\partial_x^2 - c_T^2\partial_x^2 + c_R^2\partial_x^4\right)u(x, t) = 0. \quad (\text{B.2})$$

Utilizando una base

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\kappa_n x) \quad \text{con } \kappa_n = \frac{n\pi}{L} \quad \& \quad n \in \mathbb{N}, \quad (\text{B.3})$$

se calculan los elementos de matriz del operador a la izquierda como

$$\int_0^L \phi_m(x) \left(-\omega^2 - 2i\omega\alpha + 2i\omega\beta\partial_x^2 - c_T^2\partial_x^2 + c_R^2\partial_x^4\right) \phi_n(x) = 0. \quad (\text{B.4})$$

Al realizar la integral y reorganizar según la potencia de ω para crear el haz matricial, la expresión anterior es

$$\mathcal{M}_0 + \omega\mathcal{M}_1 = \omega^2\mathcal{M}_2 \quad (\text{B.5a})$$

donde se ha pasado el término de mayor grado en ω al otro lado, y las matrices

$$\mathcal{M}_0 = \left(c_T^2 + c_R^2\kappa_n^2\right)\kappa_n^2\delta_{m,n}, \quad \mathcal{M}_1 = -2i\left(\alpha + \beta\kappa_n^2\right)\delta_{m,n}, \quad \& \quad \mathcal{M}_2 = \delta_{m,n}. \quad (\text{B.5b})$$

¹ Otro tipo de amortiguamiento que se puede usar es del tipo $-\gamma\partial_t^3 u(x, t)$.

La expresión anterior se reorganiza es una dimensión superior como

$$\begin{pmatrix} \mathcal{M}_0 & \mathcal{M}_1 \\ 0 & \mathbb{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}_1 \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{M}_2 \\ \mathbb{I} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}_1 \end{pmatrix}, \quad \text{donde} \quad \mathbf{x}_n = \omega^n \mathbf{x}, \quad (\text{B.6a})$$

o bien

$$\begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ \mathcal{M}_2^{-1} \mathcal{M}_0 & \mathcal{M}_2^{-1} \mathcal{M}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}_1 \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}_1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.6b})$$

En una configuración acotada de modos N , la matriz del lado izquierdo es

$$\begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 & & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \ddots & \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & & 1 \\ (c_T^2 + c_R^2 \kappa_1^2) \kappa_1^2 & & 0 & -2i(\alpha + \beta \kappa_1^2) & & 0 \\ & \ddots & & & \ddots & \\ 0 & & (c_T^2 + c_R^2 \kappa_N^2) \kappa_N^2 & 0 & & -2i(\alpha + \beta \kappa_N^2) \end{pmatrix} \quad (\text{B.7a})$$

cuyos eigenvalores son

$$\omega_n = -i(\alpha + \beta \kappa_n^2) \mp c_T \kappa_n \sqrt{1 + \frac{c_R^2}{c_T^2} \kappa_n^2 - \left(\frac{\alpha + \beta \kappa_n^2}{c_T \kappa_n} \right)^2} \quad \text{con} \quad 1 \leq n \leq N, \quad (\text{B.7b})$$

y eigenvectores

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}_0 & \mathbf{x}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_{1,n} & \delta_{2,n} & \cdots & \delta_{N,n} & \omega_1 \delta_{1,n} & \omega_2 \delta_{2,n} & \cdots & \omega_N \delta_{N,n} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.7c})$$

Nótese que se tienen $2N$ eigenvalores ω_n por haber duplicado la dimensión del problema original, que sin embargo son de esperar por tener un polinomio de segundo grado en ω . Así mismo, la función de onda (4.29a) para este sistema queda simplemente como

$$\Psi(x, t) = \sum_n \sum_m c_n \delta_{mn} \phi_m(x) e^{-i\omega_n t} = \sum_n c_n \phi_n(x) e^{-i\omega_n t} \in \mathbb{R}, \quad (\text{B.8})$$

mientras que las condiciones iniciales c_n se obtienen según (4.32b), o bien (4.32a) si $\alpha = \beta = 0$.

Apéndice C

Galería de gráficos de densidad en la cavidad EM

Las siguientes figuras son un complemento a las discutidas en § 4.3.3, donde se usan los valores en (4.37) en una cavidad de $L = 10$ [cm].

- I) En las figuras C.1 se modifica ligeramente el valor del grosor de la bicapa, mostrando cambios notables en la dinámica de la onda.
- II) En las figuras C.2 se modifica el n.º de modos usados, modificando correspondientemente el grosor de la bicapa tal que el tiempo de retención lateral sea ~ 80 [cm].

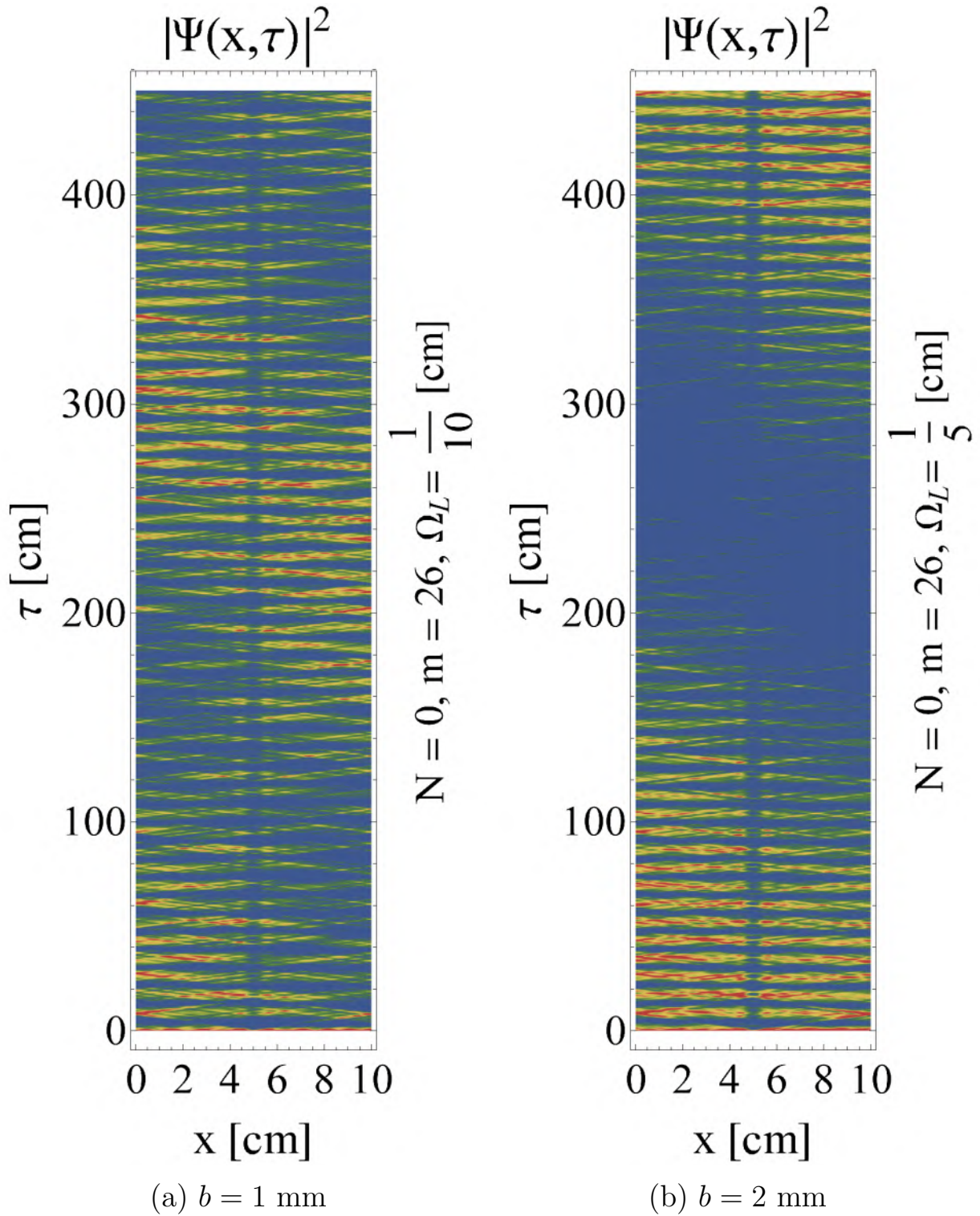


Figura C.1: Gráficos de densidad en $0 < \tau < 450$, usando los valores en (4.37) y variando el valor del grosor b .

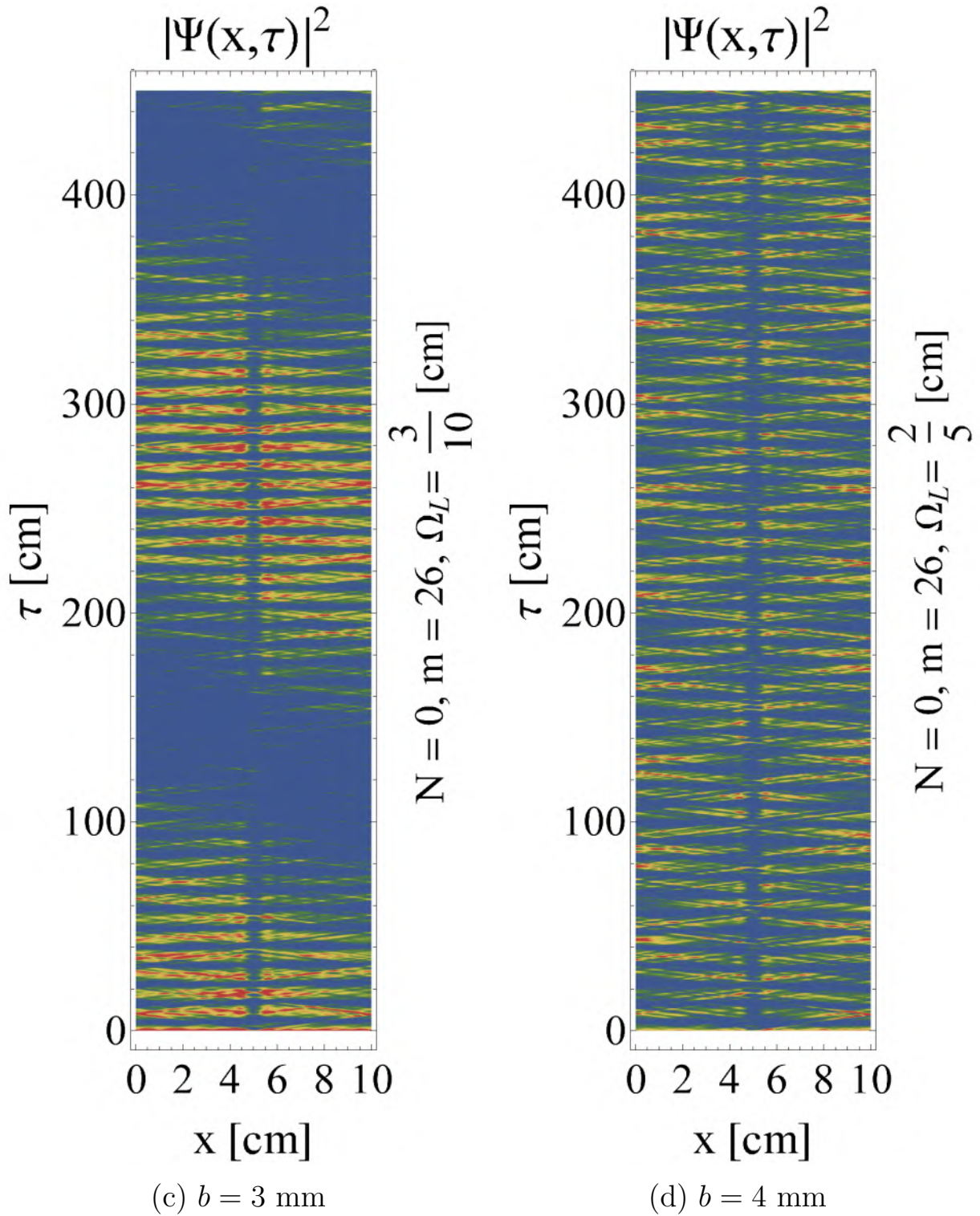


Figura C.1: Gráficos de densidad en $0 < \tau < 450$, usando los valores en (4.37) y variando el valor del grosor b .

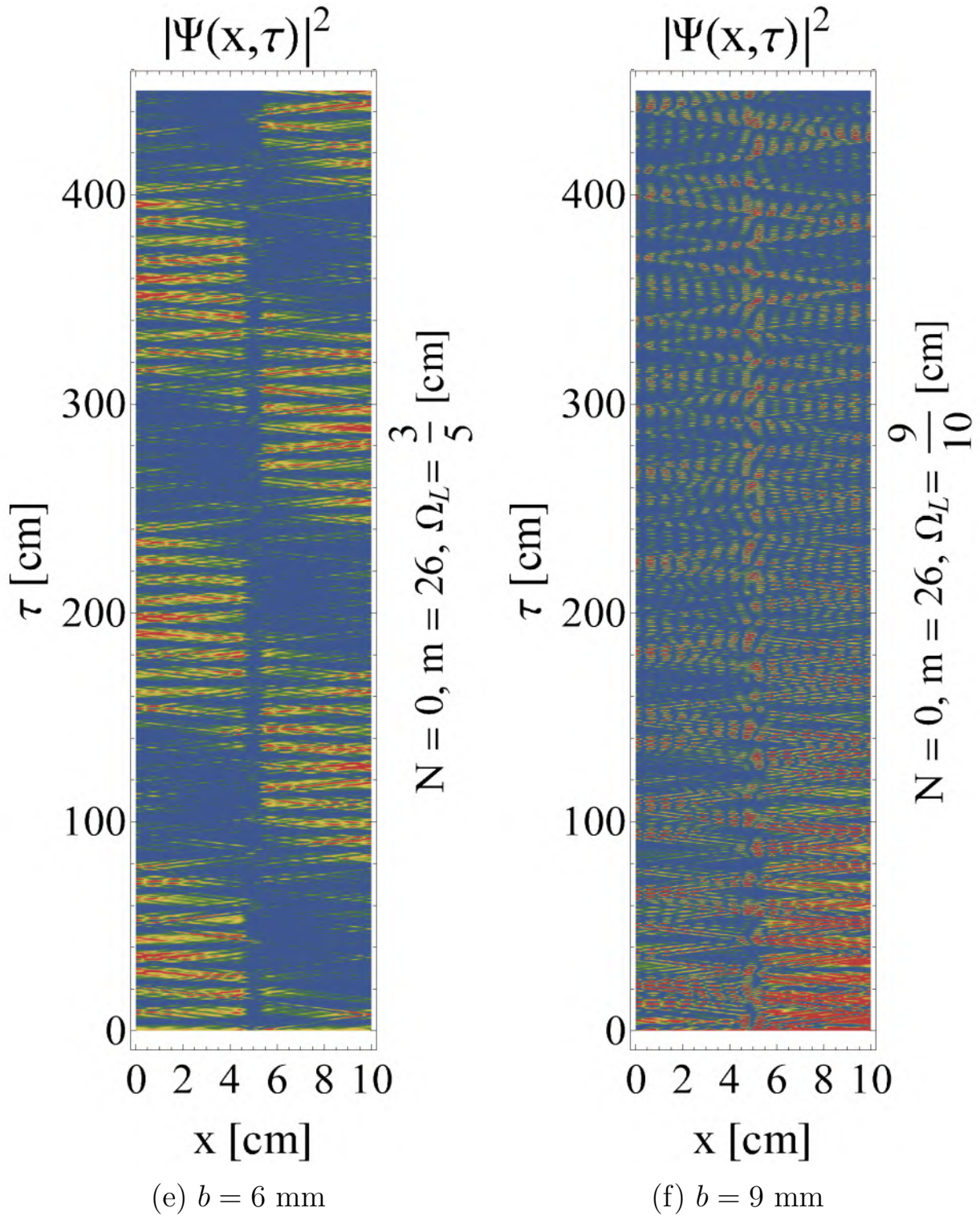
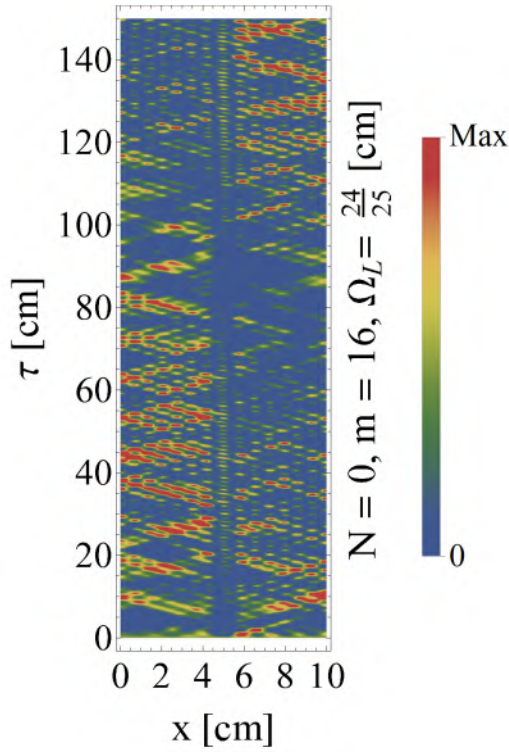
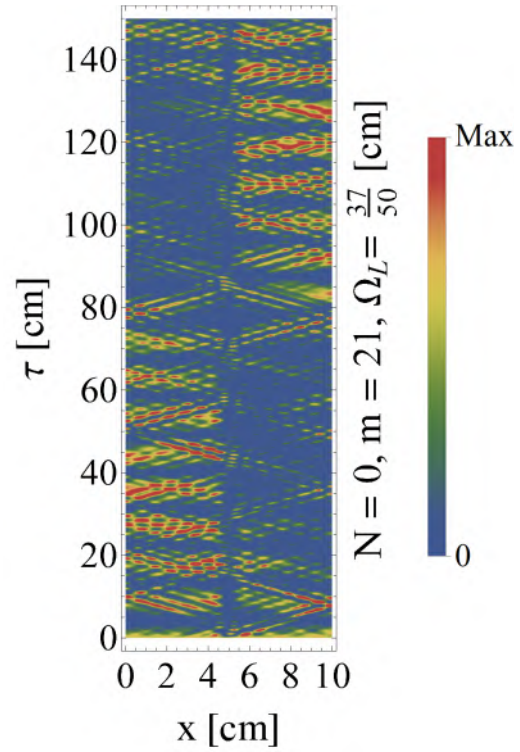


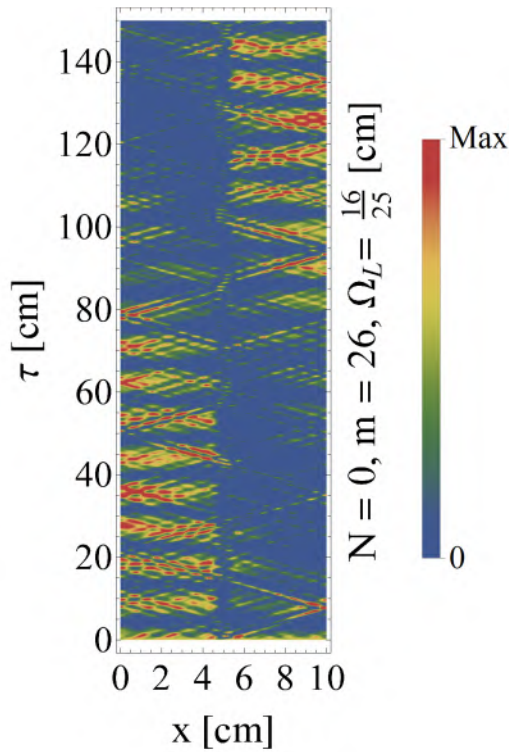
Figura C.1: Gráficos de densidad en $0 < \tau < 450$, usando los valores en (4.37) y variando el valor del grosor b .



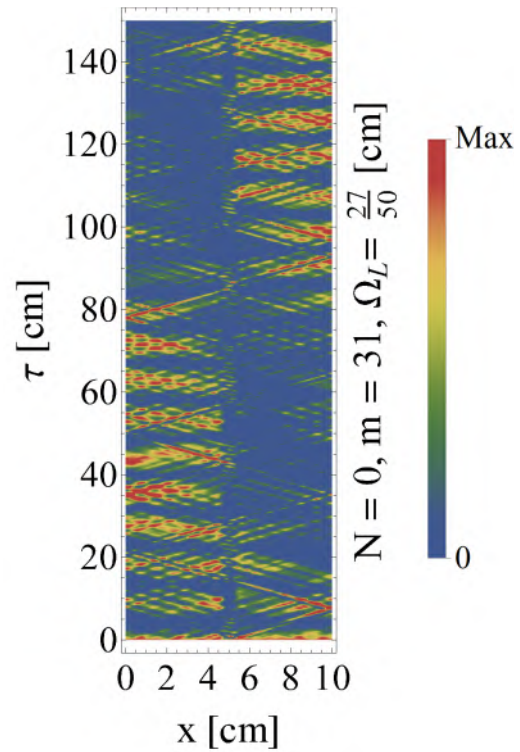
(a) 16 modos, $b = 9.6$ mm



(b) 21 modos, $b = 7.4$ mm

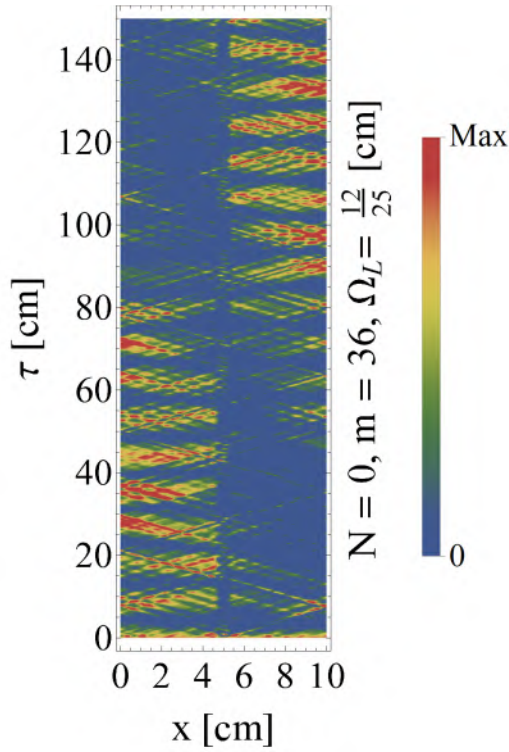


(c) 26 modos, $b = 6.4$ mm

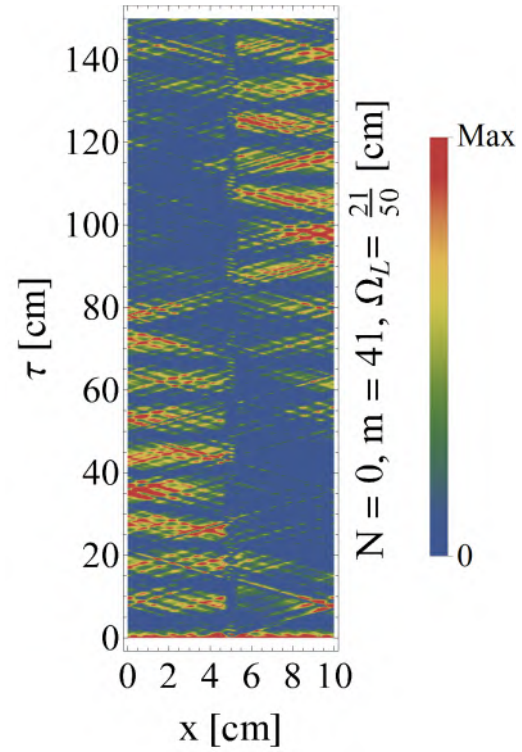


(d) 31 modos, $b = 5.4$ mm

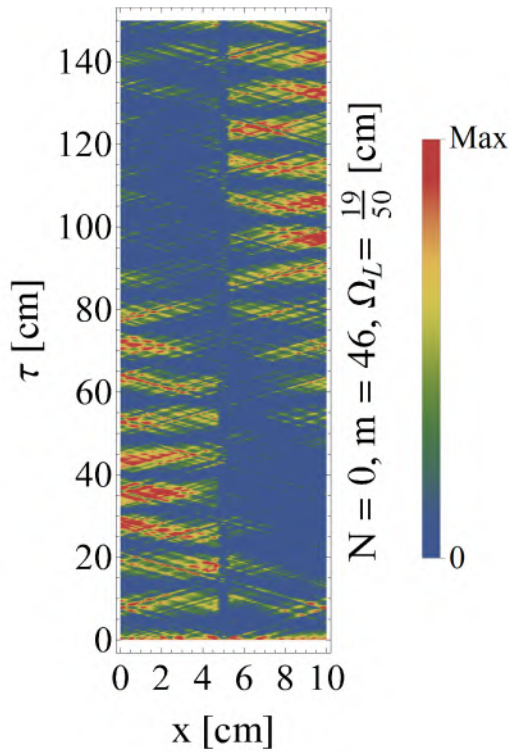
Figura C.2: Gráficos de densidad en $0 < \tau < 150$ usando los valores en (4.37), variando n.º de modos y grosor.



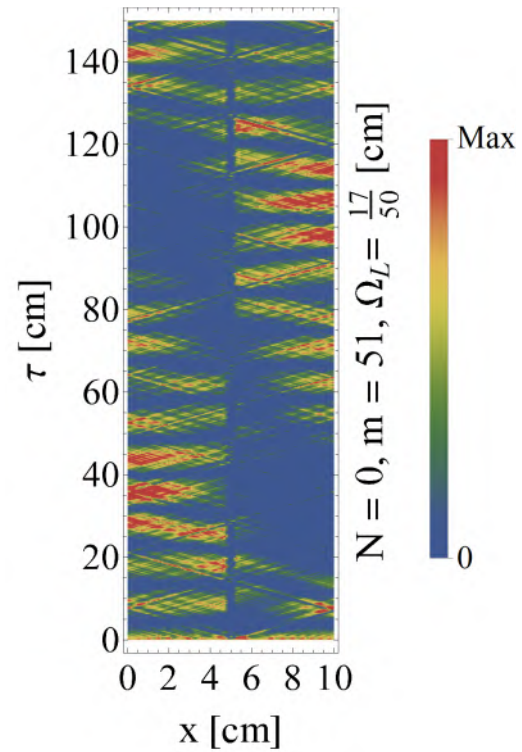
(e) 36 modos, $b = 4.8$ mm



(f) 42 modos, $b = 4.2$ mm

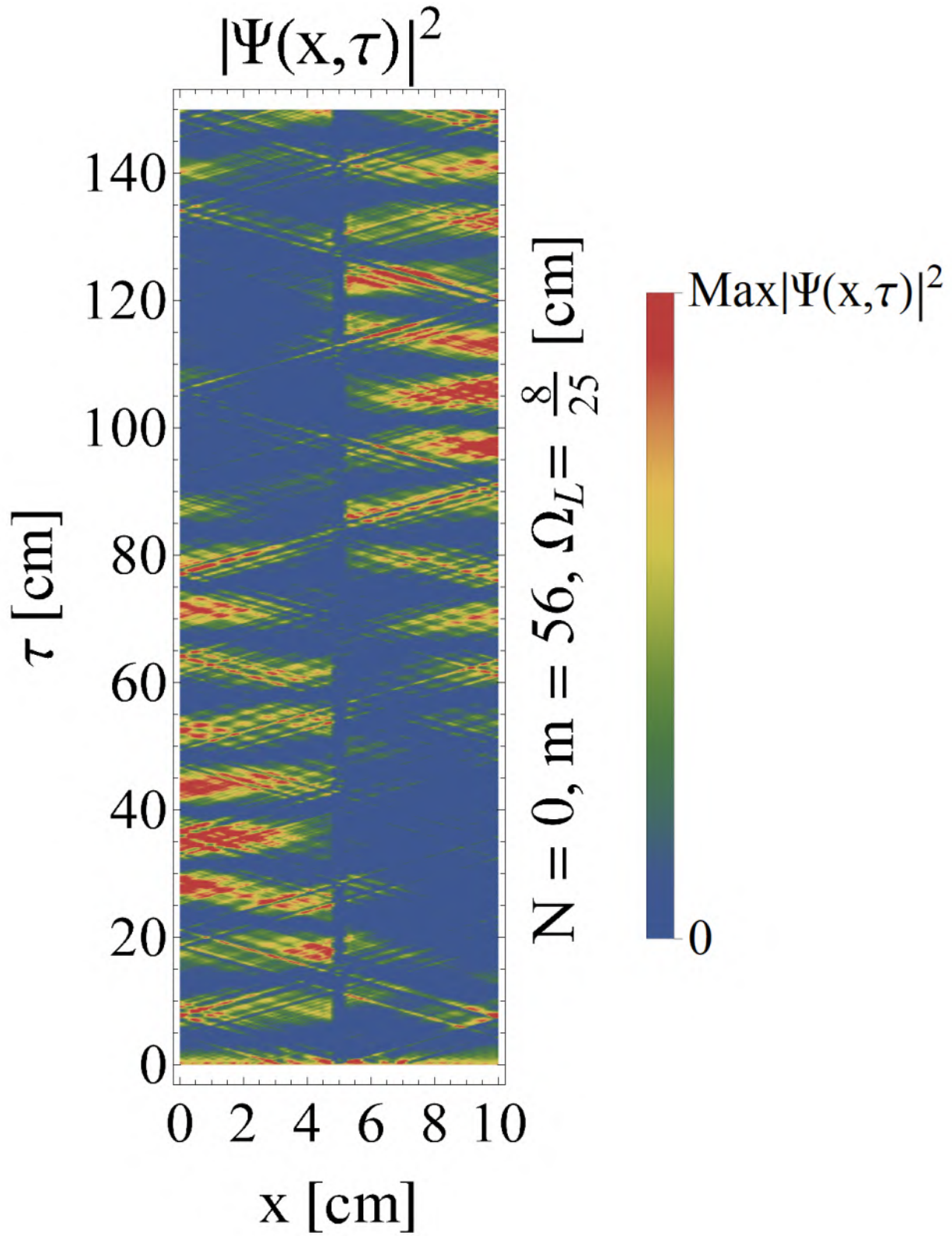


(g) 46 modos, $b = 3.8$ mm



(h) 51 modos, $b = 3.4$ mm

Figura C.2: Gráficos de densidad en $0 < \tau < 150$ usando los valores en (4.37), variando n.º de modos y grosor.



(i) 56 modos, $b = 3.2$ mm

Figura C.2: Gráficos de densidad en $0 < \tau < 150$ usando los valores en (4.37), variando n.º de modos y grosor.

Apéndice D

Galería de gráficos de reflexión y transmisión

Las figuras a continuación corresponden a las probabilidades de reflexión y transmisión (R & T) en las siguientes configuraciones:

I) Potenciales reversibles:

a) Delta de potencial $-V(x) = V_0\delta(x)$ — donde la razón entre los canales R^δ & T^δ es

$$\frac{R^\delta}{T^\delta} = \frac{E_0}{E}, \quad \text{donde} \quad E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} = \frac{mV_0^2}{2\hbar^2}. \quad (\text{D.1})$$

Nótese que las funciones son monótonas (fig. D.1a).

b) Escalón de potencial $-V(x) = V_0\Theta(x)$ — (fig. D.1b) tal que

$$T^E = \frac{4\kappa_E k_0}{(\kappa_E + k_0)^2} \quad \text{si} \quad E > V_0, \quad \& \quad R^E = \frac{1 - 2\Re[\kappa_E/k_0] + |\kappa_E/k_0|^2}{1 + 2\Re[\kappa_E/k_0] + |\kappa_E/k_0|^2}, \quad (\text{D.2a})$$

donde

$$\frac{\kappa_E^2}{k_0^2} = 1 - \frac{V_0}{E} \quad \Bigg| \quad \kappa_E \in \begin{cases} \mathbb{R} & \text{si} \quad V_0 < E \quad (\text{ondas trigonométricas}), \\ i\mathbb{R} & \text{si} \quad \text{mín}(V(x)) < E < V_0 \quad (\text{ondas hiperbólicas}). \end{cases} \quad (\text{D.2b})$$

Asímismo, $T^E = 0$ para $E < V_0$, no obstante hay probabilidad de tunelamiento — $|\Psi_{II}^E|^2 \propto e^{-2\kappa_E x}/(\kappa_E^2/k_0^2 + 1)$ —.

c) Barrera o pozo de potencial $-V(x) = V_0\Theta(L - |x|)$ — (fig. D.1c). Se grafica en E/V_0 usando $2\kappa_C L = 2L|\eta|\sqrt{\text{sgn} V_0}\sqrt{E/V_0 - 1}$ con distintos casos de $2L|\eta|$. La razón entre los canales R^C & T^C es

$$\frac{R^C}{T^C} = \frac{(\kappa_C^2 - k_0^2)^2 \sin(2\kappa_C L)^2}{4\kappa_C^2 k_0^2}, \quad \text{donde} \quad \frac{\kappa_C^2}{k_0^2} = 1 - \frac{V_0}{E} \quad (\text{D.3a})$$

tal que

- Para una barrera de potencial

$$\kappa_C \in \begin{cases} \mathbb{R} & \text{si } 0 \leq V_0 < E \quad (\text{ondas trigonométricas}), \\ i\mathbb{R} & \text{si } 0 \leq E < V_0 \quad (\text{ondas hiperbólicas}). \end{cases} \quad (\text{D.3b})$$

- Para un pozo de potencial

$$\kappa_C \in \mathbb{R} \quad \forall \quad V_0 < 0 \quad | \quad E > \text{mín}(V(x)) \quad (\text{ondas trigonométricas}). \quad (\text{D.3c})$$

- II)** Barrera 1D irreversible γ con $V_0 = 0$ —ec. (5.39)— (fig. D.2). Se grafica en k_0/γ usando $2\kappa L = 2L\gamma\sqrt{k_0^2/\gamma^2 + 1}$ con distintos casos de $2L\gamma$. Para valores $k_0 > \gamma$ —la zona de interés en vista de que γ representa la interacción débil— siempre se cumple que $NT + R = 1$. Así mismo, la conservación de probabilidad se cumple para todo k_0/γ si $2L\gamma \leq \pi/4$, lo cual no es impedimento ya que el radio de interacción del protón puede ser tan pequeño como del orden de femtómetros. Cabe recordar que el efecto crucial de γ es cambiar la longitud efectiva del radio de interacción conforme la dirección de incidencia ($L \mapsto L \pm \gamma/k_0$, ver fig. 5.4).
- III)** Barrera 1D irreversible γ con barrera ($V_0 > 0$) o pozo ($V_0 < 0$) de potencial reversible con el valor particular $V_0/E = \pm 1/10$, según corresponda (fig. D.3). Se grafica en k_0/γ usando la transmisión normalizada $NT = 1 - R$ y

$$\frac{1}{R} = \frac{V_0/E - 2\gamma/k_0}{V_0/E + 2\gamma/k_0} + \frac{1 - V_0/E + \gamma^2/k_0^2}{(V_0/2E + \gamma/k_0)^2} \csc^2 \left(2L\gamma \sqrt{1 + \frac{k_0^2}{\gamma^2} \left(1 - \frac{V_0}{E}\right)} \right) \quad (\text{5.33})$$

en distintos casos de $2L\gamma$. El lado izquierdo y derecho de las gráficas representan los casos para un pozo ($V_0 < 0$) y una barrera ($V_0 > 0$), respectivamente, en conjunción con la barrera irreversible γ , donde se aprecia la ruptura de la simetría entre los casos $V_0 < 0$ & $V_0 > 0$. Además, el área sombreada gris (asimétrica) representa el intervalo donde no se puede asegurar que $NT + R = 1$ para todo valor de $2\kappa L$ —comparar con (5.41c)—, a saber

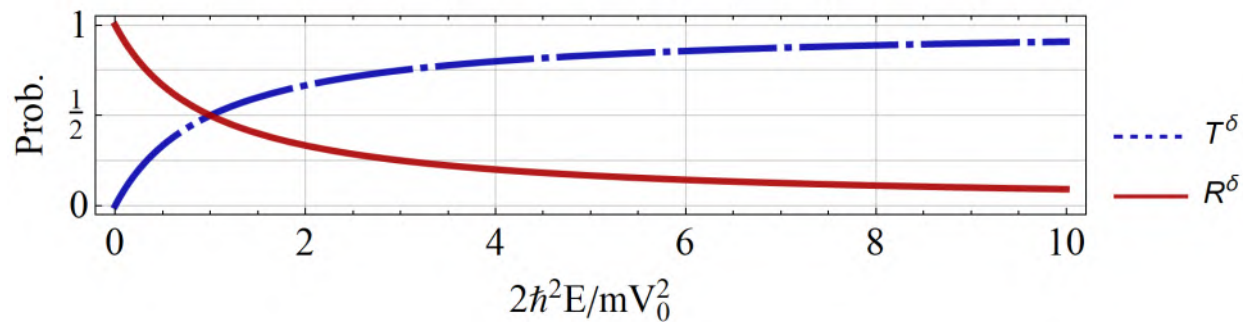
$$\frac{k_0}{\gamma} \left(1 - \frac{V_0}{E}\right) < 1. \quad (\text{D.4})$$

- IV)** Barrera y pozo de potencial reversibles con barrera 1D irreversible con valores particulares a) $\gamma/|\eta| = 3/2$ & b) $\gamma/|\eta| = 5/2$ (fig. D.4). En analogía con el caso Ic & III, se usa

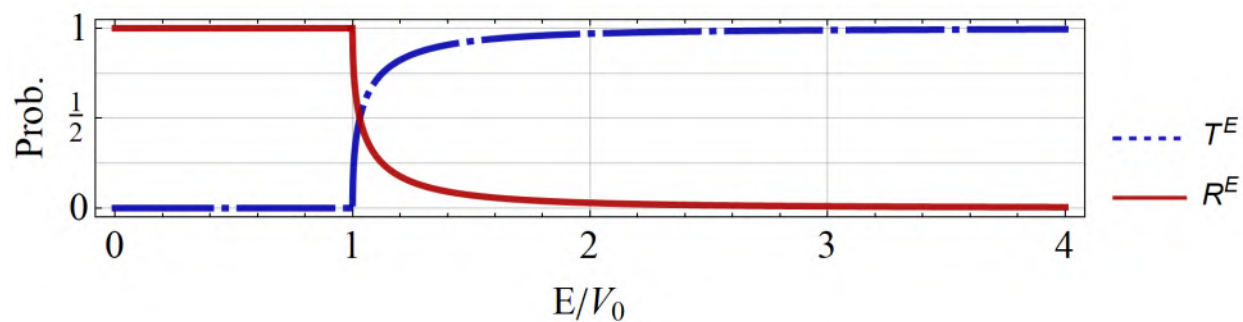
$$\frac{1}{R} = \frac{\sqrt{V_0/E} - 2\gamma/\eta}{\sqrt{V_0/E} + 2\gamma/\eta} + \frac{E/V_0 + \gamma^2/\eta^2 - 1}{(\sqrt{V_0/E}/2 + \gamma/\eta)^2} \csc^2 \left(2L|\eta| \sqrt{\text{sgn } V_0} \sqrt{\frac{E}{V_0} + \frac{\gamma^2}{\eta^2} - 1} \right). \quad (\text{5.33})$$

Similarmente, el área gris corresponde a valores donde no necesariamente se cumple que $NT + R = 1$ para todo valor de $2L|\eta|$, a saber

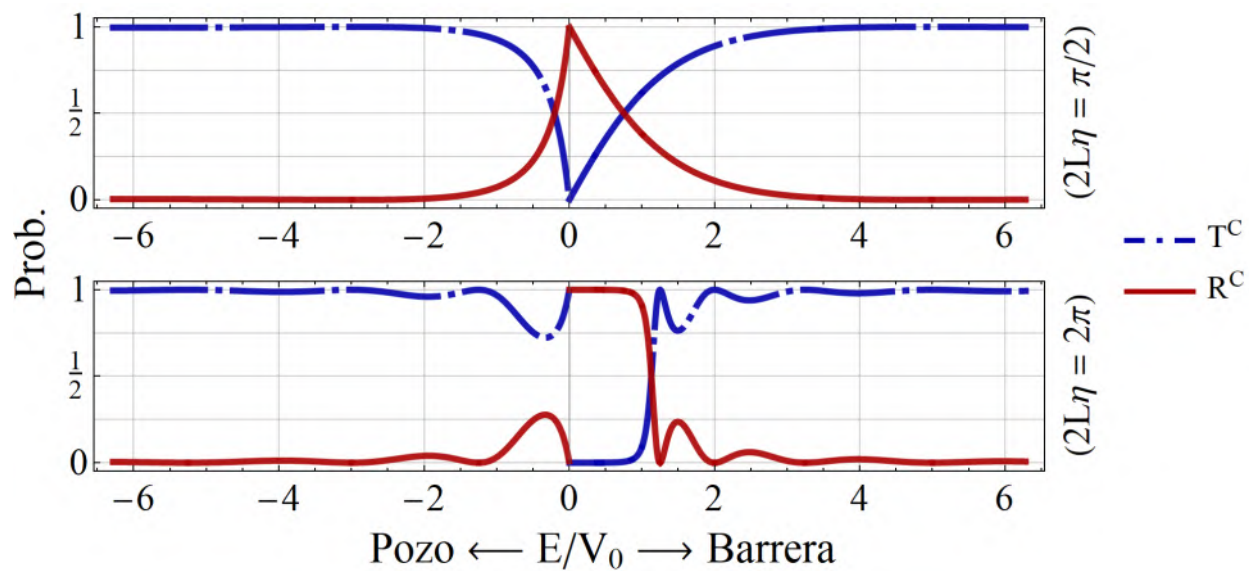
$$1 - \frac{V_0}{E} \leq \frac{\gamma}{|\eta|} \sqrt{\frac{|V_0|}{E}}, \quad \text{o bien} \quad \frac{E}{|V_0|} \leq \frac{\gamma^2}{2|\eta|^2} \left(1 + \sqrt{\frac{\gamma^2}{|\eta|^2} + 4 \text{sgn } V_0} \right) + \text{sgn } V_0. \quad (\text{D.5})$$



(a) $V(x) = V_0\delta(x)$



(b) $V(x) = V_0\Theta(x)$



(c) $V(x) = V_0\Theta(L - |x|)$

Figura D.1: Reflexión y transmisión para potenciales reversibles: a) Delta de potencial, b) escalón de potencial, c) barrera ($V_0 > 0$) o pozo ($V_0 < 0$) de potencial para dos valores de $2L|\eta|$.

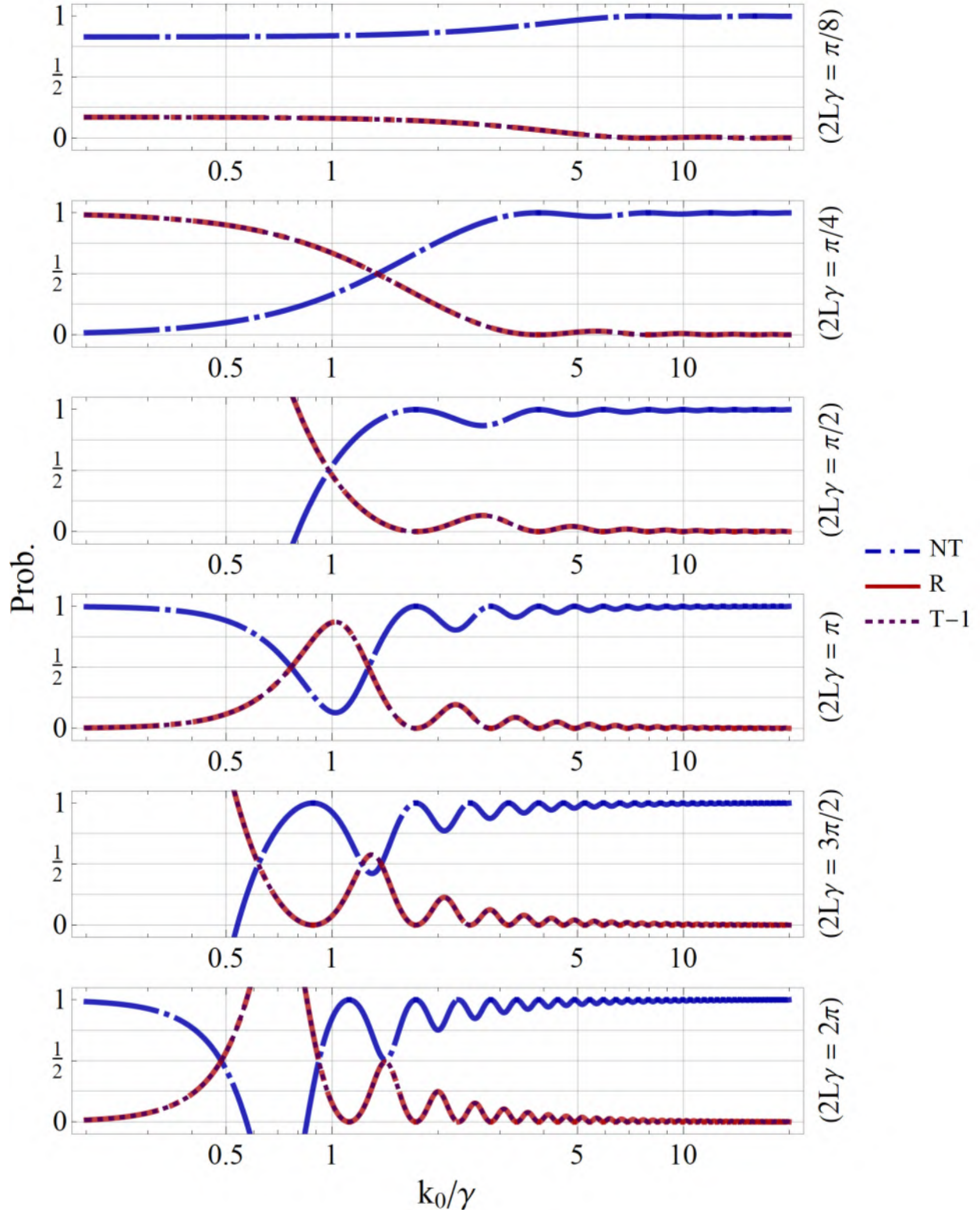


Figura D.2: Reflexión y transmisión (5.39) para la barrera 1D irreversible variando el valor de $2L\gamma$ —recordar que la longitud del potencial cambia conforme la dirección de incidencia, ver fig. 5.4—. En el régimen $k_0 < \gamma$ no necesariamente se cumple que $NT + R = 1$; en particular, si $2L\gamma \simeq n\pi/2$ hay divergencias conforme $k_0/\gamma \rightarrow 0$, mientras que si $2L\gamma \simeq n\pi$ la función tiene oscilaciones que pueden sobrepasar los límites típicos en $0 < k_0/\gamma < 1$. Así mismo, si $2L\gamma \leq \pi/4$ la conservación de probabilidad se cumple para todo k_0/γ .

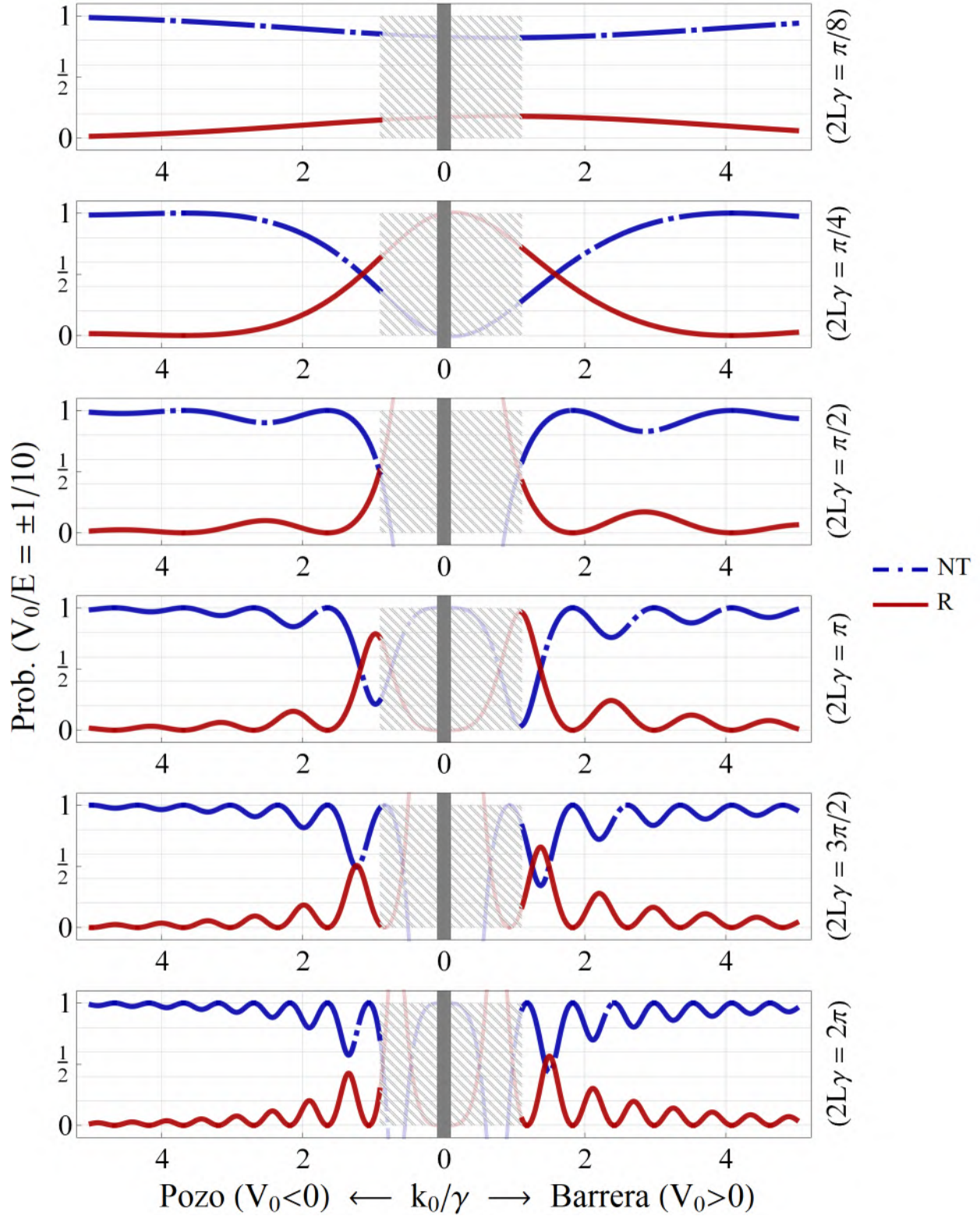


Figura D.3: Reflexión y transmisión para la barrera 1D irreversible γ con barrera ($V_0 > 0$) o pozo ($V_0 < 0$) de potencial reversibles —ec. (5.39)— variando el valor de $2L\gamma$ con $V_0/E = \pm 1/10$, según corresponda. Nótese la ruptura de la simetría entre los casos $V_0 < 0$ & $V_0 > 0$. En el área gris no se puede asegurar que $NT + R = 1$ para todo valor de $2\kappa L$ —ec. (D.4)—.

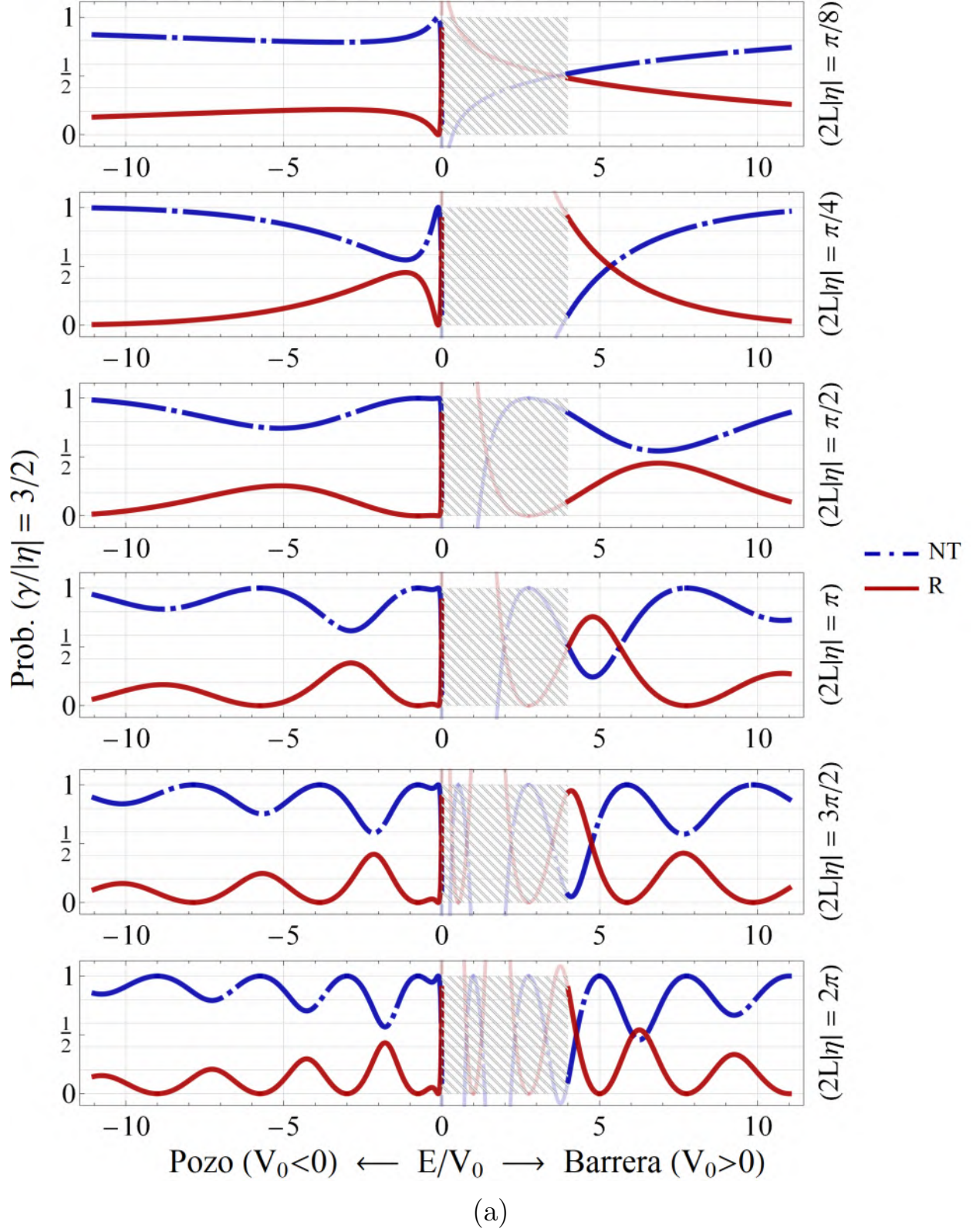


Figura D.4: Reflexión y transmisión para barrera ($V_0 > 0$) y pozo ($V_0 < 0$) de potencial reversibles con barrera 1D irreversible con valores a) $\gamma/|\eta| = 3/2$ & b) $\gamma/|\eta| = 5/2$, variando el valor de $2L|\eta|$. En el área gris no se puede asegurar que $NT + R = 1$ para todo valor de $2\kappa L$ —ec. (D.5)—.

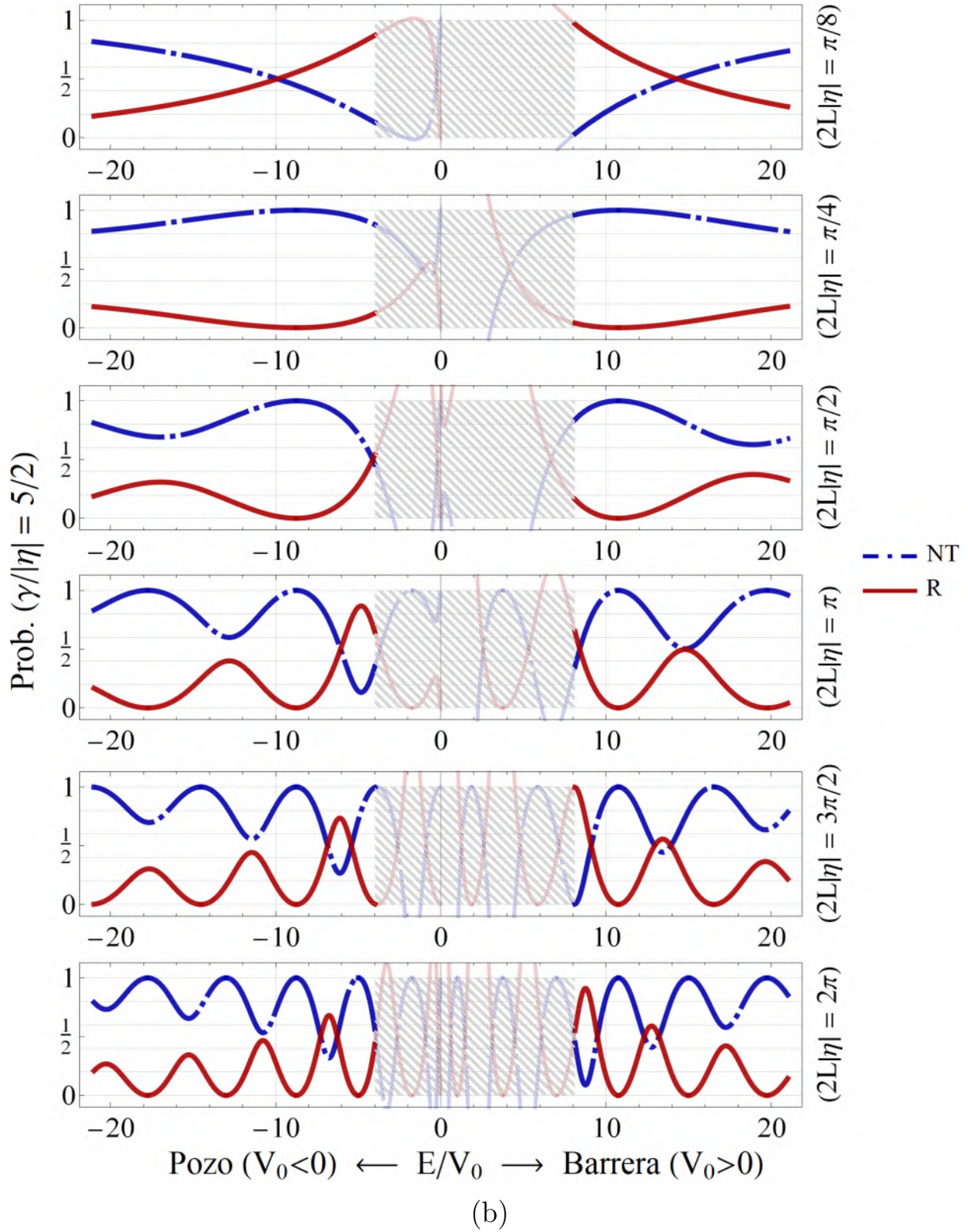


Figura D.4: Reflexión y transmisión para barrera ($V_0 > 0$) y pozo ($V_0 < 0$) de potencial reversibles con barrera 1D irreversible con valores a) $\gamma/|\eta| = 3/2$ & b) $\gamma/|\eta| = 5/2$, variando el valor de $2L|\eta|$. En el área gris no se puede asegurar que $NT + R = 1$ para todo valor de $2\kappa L$ —ec. (D.5)—.



Oficio No. IF-SACAD160/2023

Asunto: Oficio de modalidad de titulación.

MTRO. RICARDO VALDERRAMA VALDEZ

Director de Administración Escolar
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Presente

El que suscribe, Director del Instituto de Física "Ing. Luis Rivera Terrazas", le informo **JORGE ISRAEL CASTRO ALATORRE**, matrícula: **219570223**, presentará y defenderá su examen de grado de **DOCTORADO EN CIENCIAS (FÍSICA)** en la **MODALIDAD DE PRESENTACIÓN DE TESIS**, cuyo título es: **"IRREVERSIBILIDAD DE MAXWELL EN FENÓMENOS ONDULATORIOS"**, el próximo día **lunes 18 de septiembre de 2023 a las 10:00 horas**, en el **auditorio de este Instituto**. El Jurado Examinador está integrado por:

Dr. Peter Otto Hess Bechstedt	Presidente -en línea-
Dr. Gerardo Francisco Torres del Castillo	Secretario
Dr. César Márquez Beltrán	Vocal
Dr. Juan Mauricio Torres González	Vocal
Dr. Emerson Leao Sadurní Hernández	Vocal

Sin otro asunto que el particular, aprovecho la ocasión para enviarle un cordial saludo.

ATENTAMENTE

"Pensar Bien, Para Vivir Mejor"

Puebla, Pue., a 01 de septiembre de 2023

DR. FELIPE PÉREZ RODRÍGUEZ
DIRECTOR





Oficio No. IF-SACAD161/2023

Asunto: Carta Aval

MTRO. ALFREDO AVENDAÑO ARENAZA
DIRECTOR GENERAL DE BIBLIOTECAS
BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA
A QUIEN CORRESPONDA

El que suscribe, Director del Instituto de Física "Ing. Luis Rivera Terrazas" de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, **AVALA** con base en los archivos que se encuentran en este Instituto, que la tesis de **JORGE ISRAEL CASTRO ALATORRE**, matrícula: **219570223**, cuyo título es: "**IRREVERSIBILIDAD DE MAXWELL EN FENÓMENOS ONDULATORIOS**", fue *revisada y aprobada* por el comité revisor para presentar su examen de grado de **DOCTORADO EN CIENCIAS (FÍSICA)**. Dicho examen está programado para el día **lunes 18 de septiembre de 2023 a las 10:00 horas**, en el **auditorio del IFUAP**. Dicho Comité está integrado por los siguientes profesores:

Dr. Peter Otto Hess Bechstedt	Presidente -en línea-
Dr. Gerardo Francisco Torres del Castillo	Secretario
Dr. César Márquez Beltrán	Vocal
Dr. Juan Mauricio Torres González	Vocal
Dr. Emerson Leao Sadurní Hernández	Vocal

Se informa también que la tesis correspondiente, se encuentra lista para su impresión.

Sin otro asunto que el particular, reciba mi más alto reconocimiento.

ATENTAMENTE

"Pensar Bien, Para Vivir Mejor"

H. Puebla de Z., a 01 de septiembre de 2023

DR. FELIPE PÉREZ RODRÍGUEZ
DIRECTOR



C.c.p. Expediente
DR*FPR/DRA*MECR/LAE*mhr

Instituto de Física
"Luis Rivera Terrazas"

Av. San Claudio esq. 18 Sur, Edif. IFI,
Ciudad Universitaria, Col. San Manuel
Puebla, Pue. C.P. 72570
01 (222) 229 55 00 Ext. 5610, 5611, 2008