



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"

**"PROPAGACIÓN Y TRANSPORTE EN GUÍAS DE
ONDAS DESORDENADAS CON ESQUINAS"**

TESIS

PRESENTADA PARA OBTENER EL GRADO DE

**DOCTOR EN CIENCIAS
(FÍSICA)**

PRESENTA:

ELADIO RIVERA MOCIÑOS

ASESOR:

DR. EMERSON L. SADURNÍ HERNÁNDEZ

ENERO 2017

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas”

Propagación y transporte en guías de ondas desordenadas con esquinas

Tesis presentada por

Eladio Rivera Mociños

para obtener el grado de

**Doctor en Ciencias
(Física)**

Dirigida por

Dr. Emerson Leao Sadurní Hernández

Puebla, México

Enero 2017

©2017 - Eladio Rivera Mociños

Derechos Reservados

Agradecimientos

Al Dr. Emerson L. Sadurní Hernández por su paciencia, guía, apoyo, respaldo y confianza desde el inicio de esta tesis.

Mi agradecimiento especial al comité revisor de esta tesis por su valioso tiempo empleado en la lectura minuciosa del presente trabajo.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología a través de la beca crédito 245104 por haberme apoyado económicamente durante mis actividades académicas del doctorado.

A los amigos y colegas del Instituto de Física de la BUAP en especial a Irving, Ivan, Jaime, Josué, Arturo, Omar, Robert, Arturo, Yael, Pedro, Salvador, Alejandro, Yasser, Martín, Javier por el apoyo y motivación en ciertos momentos de incertidumbre y por las muchas discusiones amenas.

A mis amigas y colegas por compartir sus experiencias y cultivar la perseverancia en las diferentes etapas de esta tesis muy en especial a Julieta, Dany, Vale, Pao, Nora, Adri, Silvia, Shunashi, Maritza, Nohemi y Lily.

A los amigos y colegas de la UAM por su valioso apoyo en especial a Marcel, Filiberto, Roman, Fernando, Lucas y los ahora ya Dres. Víctor, Enrique, Angel que siempre mostraron una actitud positiva de trabajo en equipo.

A los amigos y colegas del ICF-UNAM por su valioso apoyo.

Mi agradecimiento muy especial a la familia Ponce-Medina por su inmenso apoyo a lo largo de esta importante etapa.

A la Mtra. Mercedes y Alejandro Acosta que me abrieron las puertas de su hogar haciendo mi estancia en Puebla más confortable.

*Dedicado a mis padres María y Francisco
a mis hermanos
a Blanca Azucena*

Propagación y transporte en guías de ondas desordenadas con esquinas

Resumen

El principal objetivo de este trabajo, es contribuir al entendimiento de las propiedades de propagación y transporte, en guías de ondas con esquinas. Nuestros estudios se enfocan en la región de bajas energías, específicamente aquellas menores a la del umbral de propagación de una guía recta, donde el modelo de enlace fuerte a primeros vecinos puede aplicarse. El desarrollo de este trabajo se divide en dos partes principales: En la primera parte se realiza una descripción de un arreglo dispersivo en guías de ondas con esquinas; particularmente se explora la conductancia o transmitancia en sistemas de guías de ondas con terminales semi-infinitas acopladas. Nuestros estudios indican que la orientación aleatoria de segmentos que componen al sistema dispersivo, mantienen la estabilidad al imponer desorden en sus fronteras. Ello nos permite construir guías de ondas que son robustas. Sin embargo, los espectros de conductancia como función de la energía, reflejan una asimetría, la cual se sabe, es causada por dos situaciones, que son: El acoplamiento de terminales al sistema y por la cercanía entre esquinas que generan acoplamientos hasta segundos vecinos. En la segunda parte de esta tesis, se exploran sistemas de configuración cerrada; particularmente se desarrolla el método de diseño inverso aplicado a modelos de enlace fuerte a primeros vecinos, a partir del cual se obtiene un sistema de ecuaciones algebraicas que relacionan el espectro de energías con los correspondientes acoplamientos. Esto permite caracterizar todos aquellos Hamiltonianos de sistemas unidimensionales a bajas energías o de longitud de onda larga, que tienen un mismo espectro. Se dan ejemplos del problema inverso, incluyendo una implementación numérica que resuelve el sistema de ecuaciones algebraicas ya mencionadas. Los ejemplos contienen configuraciones generadas aleatoriamente como lo son: La distribución Gaussiana y la distribución coseno para energías, obteniendo con ello las correspondientes distribuciones de acoplamientos, dilucidando así las múltiples soluciones que arroja un mismo espectro de energías. En lo que respecta al diseño espectral de guías de onda se estudiaron sistemas que se caracterizan por poseer espectros discretos y por ser exactamente solubles tales como: El oscilador de Dirac, el oscilador finito y sistemas con isoespectralidad parcial. Finalmente se estudia el operador de posición para un operador ergódico, como ejemplo paradigmático de espectros singulares. Este surge de proponer

un álgebra de oscilador deformada. El espectro del operador de posición que se obtiene, corresponde a la mariposa de Hofstadter, el cual es denso en sí mismo, no numerable y de medida cero. Se encuentra que existe un mapeo entre el operador de posición y el Hamiltoniano de Harper. Además, se muestra que variando los acoplamientos entre sitios, se puede construir el mismo espectro que el de un electrón moviéndose en una malla cuadrada con campo magnético transversal aplicado.

Propagation and transport in disordered waveguides with corners

Abstract

The principal aim of this work, is to contribute to a better understanding of the propagation and transport properties of waveguides with corners. Our studies focus on the region of low energies, specifically those below propagation threshold of a straight waveguide, where the tight-binding model with nearest neighbors can be applied. The development of this work is divided into two principal parts: In the first part, a description of a scattering arrangement in waveguides with corners is made; particularly the conductance or transmittance is explored in a system of waveguides coupled to semi infinite leads. Our studies show that the random orientation of the segments that form a scattering system keeps the stability of the conductance spectrum by imposing a type of disorder in its boundary. This allows us to build waveguides that are robust. However, the spectrum of conductance as a function of the energy shows an asymmetry, which is caused by two situations, that are: The coupling of leads to a central system and the proximity between corners which generate second-neighbor couplings. In the second part of this work a class of systems with closed configurations are explored; particularly the inverse design method is developed and applied to tight-binding models with nearest neighbors, giving rise to a system of algebraic equations, that relate the spectrum of energies with the corresponding couplings. This allows to characterize all those Hamiltonians for one-dimensional systems at low energies or systems with long wavelengths that have the same spectrum. Examples of inverse problems are given, including a numerical implementation which solves the aforementioned algebraic equations. The examples contain configurations that are randomly generated. The Gaussian and Cosine distributions for energies are studied, obtaining their corresponding couplings distributions and elucidating the multiple solutions that produce the same spectrum. Regarding the spectral design of waveguides characterized by discrete spectra, exactly solvable examples are implemented and studied, such as: The Dirac oscillator, finite oscillator and systems with partial isospectrality. Finally, a position operator for an ergodic operator is studied, as a paradigmatic example of a singular spectrum. Such an example comes from a f -deformed algebra. The spectrum thus obtained, corresponds to a Hofstadter's butterfly, which is dense-in-itself and uncountable. It is found that there is a mapping between the

position operator and the Harper Hamiltonian. Moreover, it is shown that changing the couplings between sites, produces the same spectrum as that for an electron moving in a square lattice under a transverse magnetic field.

Publicaciones

- E. Rivera-Mociños, E. Sadurní, “Inverse lattice design and its application to bent waveguides”, *J. Phys. A: Math theor.*, Vol. 49, p.175302, (2016).
- E. Sadurní, E. Rivera-Mociños, “Fractal position spectrum for a class of oscillators”, *J. Phys. A: Math theor.*, Vol. 48, p.405301, (2015).
- E. Sadurní, E. Rivera-Mociños, A. Rosado “Discrete symmetry in graphene: the Dirac equation and beyond”, *Revista Mexicana de Física*, 61 (3), p.170, (2015).
- E. Rivera-Mociños, “Descripción efectiva de estados atrapados en una guía de onda doblada”, *Tópicos especiales en física: Encuentro de estudiantes de posgrado*, Libros UAM, (2016).

Participación en eventos

- Masa efectiva en guías de onda dobladas, E. Rivera-Mociños, 3^{ra} Reunión de ondas y materiales, IFUAP, Puebla, Pue., México (2012).
- Presencia de estados atrapados en una guía de ondas doblada, E. Rivera-Mociños, V Leopoldo García-Colín Mexican Meeting on Mathematical and Experimental Physics, Segundo Encuentro de Estudiantes de Posgrado, El Colegio Nacional, México (2013).
- Distribución de acoplamientos y el problema inverso en cadenas de amarre fuerte, 4^{ta} Reunión de ondas y materiales, Cuernavaca, Mor., México (2014).
- Inverse problems in quantum chains: Coupling distributions, Winter School: Applications of Quantum Mechanics 2015, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, México (2015).
- Emulación de sistemas solubles y singulares con guías de onda dobladas, 5^{ta} Reunión de ondas y materiales, Cuernavaca, Mor., México (2015).
- Diseño inverso de cadenas finitas, E. Rivera-Mociños, E. Sadurní, LVIII Congreso Nacional de Física, Mérida, Yucatán, México (2015).
- Inverse design of 1D finite lattices, E. Rivera-Mociños, Discrete Quantum Models, IFUAP, Puebla, Pue., México (2016).
- Inverse design for finite lattices, E. Rivera-Mociños, E. Sadurní, 2D and Dirac Materials – Workshop, University of North Florida, Jacksonville, Florida, USA (2016).

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Antecedentes	1
1.2. Organización del trabajo	3
2. Estados atrapados	5
2.1. Mecanismo de atrapamiento en una guía de ondas doblada	5
2.1.1. Estados atrapados en redes hexagonales	8
2.2. Masa efectiva e índice de refracción	8
2.2.1. Jacobiano J	9
2.2.2. Masa en función de $J(u, v)$	10
2.2.3. Índice de refracción en función de $J(u, v)$	10
2.2.4. Reducción a un problema ondulatorio 1-D	11
2.2.5. Fuerza clásica	13
2.3. Justificación de amarre fuerte	14
2.4. Modelo de enlace fuerte a primeros vecinos	17
2.4.1. Descripción de la asimetría de la primera banda	19
3. Transporte en guías de onda con esquinas en sistemas abiertos	23
3.1. Descripción del arreglo dispersivo	23
3.2. Arreglos dispersivos con sistemas periódicos	25
3.3. Estabilidad ante desorden orientacional en guías de ondas con esquinas	28
3.4. Efecto de acoplar terminales a sistemas dispersivos	32
3.5. Matriz de dispersión y su relación con la función de Green	35
3.5.1. Matriz de dispersión para terminales multimodales	35
4. Diseño inverso de cadenas finitas	37
4.1. El problema de diseño inverso en modelos de amarre fuerte	38
4.1.1. Las múltiples soluciones del problema inverso con acoplamientos variables	41
4.2. Soluciones exactas para cadenas cortas	48
4.2.1. Dominio de sistemas isoespectrales en cadenas de tres sitios	49
4.2.2. Dominio de sistemas isoespectrales en cadenas de cuatro sitios	49
4.2.3. Dominio de sistemas isoespectrales en cadenas de cinco sitios	50

4.3. Ecuaciones algebraicas de acoplamientos y energías	52
4.4. Distribuciones de acoplamientos de espectros aleatorios: Ejemplos numéricos	57
5. Diseño espectral en guías de ondas dobladas	61
5.1. Problemas con soluciones analíticas	61
5.2. Oscilador de Dirac	62
5.3. Oscilador finito y espectro equiespaciado	65
5.4. Sistemas con isoespectralidad parcial	69
6. Espectro fractal en sistemas singulares	72
6.1. Álgebra deformada	73
6.2. El mapeo entre el operador de posición y el Hamiltoniano de Harper	75
6.3. Espectro de X_ν	77
7. Conclusiones	80
A. Ecuación de Helmholtz en diferencias finitas	82
A.0.1. Condiciones de frontera	84
B. Función de autoenergía	87
B.1. Función de Green para una terminal semi-infinita	88
Bibliografía	90

Capítulo 1

Introducción

1.1. Antecedentes

En los últimos años, la búsqueda de nuevos materiales bidimensionales (2D) ha estado en un continuo crecimiento. Esto se debe al reciente descubrimiento del grafeno [1,2]. Dicho material, se distingue por tener sus átomos arreglados en una malla hexagonal y el espesor de dicha malla es de un átomo, lo que lo hace distinguirse como una estructura bidimensional. Lo anterior ha desencadenado una serie de intensivos estudios, esencialmente enfocados en la búsqueda de nuevas estructuras bidimensionales. Algunos ejemplos de estos nuevos materiales 2D corresponden a nitruro de boro [3], siliceno [4], fosforeno [5] y recientemente el estaneno [6,7], entre otros que aún están siendo desarrollados. Todas estas estructuras se distinguen, por poseer propiedades interesantes de transporte electrónico, la cuales destacan respecto a las de materiales convencionales. Sus características, tanto mecánicas como eléctricas, los hacen atractivos para una amplia variedad de aplicaciones, principalmente en el área tecnológica. Así mismo, se ha mostrado que este tipo de estructuras permiten controlar la propagación de ondas a través de su malla, introduciendo defectos o deformaciones en su geometría [8]. Esto ha atraído mucho la atención, en particular en el estudio del transporte de carga eléctrica. Por otro lado es bien sabido que la teoría de campo medio del grafeno, puede describirse a través de una ecuación efectiva de Dirac, y su correspondiente relación de dispersión en la primera zona de Brillouin exhibe puntos de cruce llamados puntos de Dirac, de tal manera que la relación de dispersión forma conos [9]. Así mismo se ha encontrado que alrededor de dichos puntos de cruce, la pendiente está relacionada con la velocidad de Fermi. Similarmente este fenómeno aparece en cristales

fotónicos hexagonales [10, 11], donde se ha encontrado que las bandas forman conos en los bordes de la primera zona de Brillouin, y que la pendiente de dichos conos está relacionada con la velocidad de propagación de las ondas. En cristales unidimensionales, se ha observado que la relación de dispersión consta de dos curvas que se cruzan [12], formando un punto de cruce, como ocurre en los arreglos hexagonales. Estas analogías han sido implementadas en experimentos de propagación de una sola partícula, v. gr. en arreglos hexagonales con microondas [13] y en cristales fotónicos [14]. En este mismo sentido, es posible dar solución al problema de valores en la frontera, aplicado a arreglos cristalinos, en particular a arreglos periódicos de pozos unidimensionales que soportan un sólo estado, mediante el empleo de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. A este respecto, en la emulación de sólidos como se describe en la fig. 2.11 (malla de obstáculos hexagonales), se establece la existencia de canales entre los intersticios, por los cuales pueden propagarse las ondas. De esta forma puede establecerse una analogía entre los sitios que forman una malla 2D (o una cadena de sitios 1D) y una guía de ondas doblada con esquinas, donde cada esquina puede verse como un sitio de algún arreglo cristalino unidimensional, capaz de soportar un sólo estado localizado por sitio. La existencia de los estados atrapados, fue primero estudiada en guías de ondas con curvatura suave o bien guías de ondas localmente deformadas. Dicho efecto de atrapamiento, ha sido objeto de discusión en los últimos años, en donde se han empleado herramientas matemáticas para su descripción [15–18]. Uno de los primeros intentos por mostrar una descripción de la presencia de estados atrapados, en tales sistemas, se dió al estudiar cables cuánticos de sección transversal constante y curvatura suave [16, 17], donde se muestra que existe una distancia transversal crítica de atrapamiento. En un trabajo posterior de Goldstone y Jaffe [18] (empleando el método variacional) muestran que al menos un estado atrapado aparecerá, siempre y cuando los brazos rectos de las guías curvadas se extiendan al infinito. También existen trabajos relacionados con cables cuánticos cruzados [19] donde se exhibe, aunque sólo de forma numérica, la evidencia de estados atrapados en el interior de una guía de ondas en forma de cruz. Gracias a todos estos antecedentes, relacionados con modos localizados en guías de onda bruscamente dobladas, se sabe que tales estados localizados siempre aparecerán por debajo del primer modo propagante. Sin embargo, la descripción completa, tanto teórica como experimental, del fenómeno de atrapamiento en guías de ondas con esquina, aparece en una implementación de un mapeo conforme [20, 21], que rectifica la geometría de la guía en cuestión y resalta el efecto de localización como un efecto producido por un potencial efectivo en el

doblez. Dicho potencial depende crucialmente de la existencia de una región con suficiente área, tanta como para albergar los modos evanescentes. Experimentalmente estos estados atrapados fueron observados en la realización de una guía de ondas fabricadas con un buen conductor y que operan en el rango de las microondas [22–24]. Así mismo existen sistemas que varían el ángulo de doblez entre 0 y 90 grados, encontrando más de un estado atrapado [21]. Es importante mencionar que el estado localizado tiene diferentes interpretaciones físicas, según su realización: en el caso cuántico representa la densidad de probabilidad, mientras que en el caso electromagnético, representa la intensidad de campo.

La analogía de considerar un punto de localización (la esquina) como un sitio de una red, abre la posibilidad de emplear a una sola esquina como bloque constructor para generar diversos arreglos flexibles emulando así cadenas con sitios idénticos. Estos ayudarán a diseñar sistemas que permitan la propagación o transporte de ondas evanescentes, implementando así el anhelado modelo de enlace fuerte. Por otro lado también es de gran interés desarrollar un método tanto analítico, como numérico de diseño inverso de arreglos de sitios idénticos, a partir de un espectro de energías conocido. La descripción se hará partiendo de la implementación de modelos de enlace fuerte con acoplamientos a primeros vecinos. Lo anterior permitirá dar soluciones a diversos problemas, e incluso proponer el diseño de nuevas estructuras. Como hemos visto, la flexibilidad que ofrece la construcción de guías de ondas con esquinas, para emular el transporte evanescente, nos inducen al estudio de modelos que pueden incluir desorden, tanto en orientación de los segmentos, como en acoplamientos de distinta magnitud. Algunos de estos sistemas desordenados se pueden estudiar a través de matrices aleatorias que codifican tanto potenciales locales como interacciones entre vecinos en un cristal [25]. Estudios similares se pueden encontrar en [26]. Estos importantes antecedentes establecen la relevancia de nuestros sistemas, pero no agotan las posibilidades en las que deformaciones, dobleces y orientaciones de guías acopladas pueden obtenerse con el fin de encontrar propiedades peculiares. Además los estudios que explotan el acoplamiento evanescente de los estados localizados constituyen una idea novedosa.

1.2. Organización del trabajo

En el capítulo 2, se estudia el mecanismo del estado atrapado en una guía de ondas con esquina, mediante la aplicación de un mapeo conforme apropiado, que rectifica la guía de ondas. Surge de la ecuación de Schrödinger una masa dependiente de la posición o bien

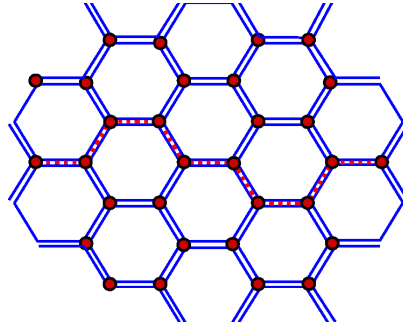


Figura 1.1: Trayectoria que sigue un electrón a través de la red hexagonal emulando una guía de ondas con esquinas idénticas

un índice de refracción si es el caso de la ecuación de Helmholtz. Se verá de la reducción del problema ondulatorio a una dimensión que emerge un potencial efectivo de atrapamiento. Mediante la implementación de un sencillo sistema de dos esquinas se justifican los modelos de enlace fuerte a primeros vecinos, encontrando los acoplamientos en función del desdoblamiento de niveles de energía o frecuencia. En el capítulo 3, se exploran distintas configuraciones de arreglos dispersivos en guías de onda con esquinas, a las cuales se acoplan terminales, estudiando en ellos la conductancia y los efectos que derivan de él. Cabe mencionar que algunos de estos sistemas incluyen desorden orientacional de vecinos, encontrando los acoplamientos en función del desdoblamiento de niveles de energía o frecuencia. En el capítulo 4, se muestra el esquema de diseño inverso de cadenas unidimensionales, obteniendo un sistema de ecuaciones algebraicas, provenientes de matrices tridiagonales que relacionan los elementos de algún espectro conocido con los acoplamientos del sistema. Mediante una técnica numérica se resuelve el sistema de ecuaciones para dos distribuciones aleatorias de energías con características relevantes como localización del espectro en banda gaussiana y la relación tipo cosenoidal típica de un cristal. La solución del problema inverso permite clasificar la familia de Hamiltonianos que comparten una misma distribución espectral. En el capítulo 5, se aborda el diseño de sistemas que analíticamente son exactamente solubles, así como la realización de tales sistemas concretamente se realizan: El oscilador de Dirac, el oscilador finito y algunos sistemas con isoespectralidad parcial. En el capítulo 6, se estudia el operador de posición proveniente de un álgebra de oscilador deformada y cuyo espectro es singular, encontrando que dicho operador se puede mapear a un Hamiltoniano de Harper.

Capítulo 2

Estados atrapados

Una importante herramienta empleada en el estudio de las propiedades del transporte es la guía de ondas ¹ con geometría variada. Estas también pueden ser contruidas con la finalidad de entender las propiedades de estructuras cristalinas cuando se trata de estructuras tubulares periódicas. Las guías de onda pueden ser clasificadas en dos casos: de acuerdo a su aplicación: cables cuánticos y guías electromagnéticas. Como ejemplos del primer caso tenemos el transporte de electrones por un tubo de pequeñas dimensiones [27, 28] o, en estado sólido, transporte de partículas por nanotubos [29, 30]. Ejemplos del segundo caso incluyen fibras ópticas y guías de microondas [22, 31], notando que en esta realización, las escalas de dichas construcciones obedecen exclusivamente a la longitud de onda de la señal a propagar. Motivados por estas geometrías, estudiaremos su bloque constructor a continuación.

2.1. Mecanismo de atrapamiento en una guía de ondas doblada

Trabajos relacionados con estados atrapados tienen su origen en la descripción del estado acotado de una partícula cuántica [32], en cables cuánticos [19, 33, 34] y recientemente la realización teórica y experimental [21], muestran que una guía de ondas bruscamente doblada es capaz de albergar un número finito de estados atrapados. En esta sección mostraremos como a partir de implementar una guía de ondas doblada surge el fenómeno de

¹Típicamente una guía de ondas en un tubo hueco por donde las ondas electromagnéticas pueden propagarse. Idealmente una guía de ondas es un conductor perfecto.

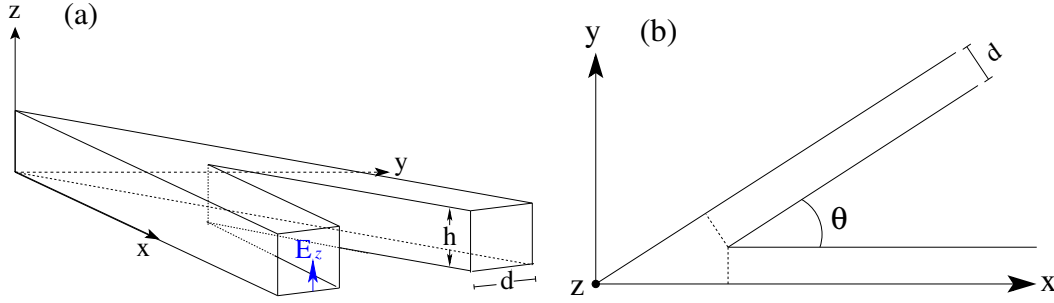


Figura 2.1: (a) Se muestra el esbozo de una cavidad electromagnética o billar cuántico con altura h y ancho d . (b) Guía de ondas electromagnéticas o alambre cuántico con ángulo de doblez θ con ancho d en los brazos.

atrapamiento. Una de las formas más sencillas de observar estados atrapados, es por medio de la implementación de una guía de ondas doblada como se muestra en el esquema de la fig. 2.1. Para llevar a cabo la explicación de estados atrapados en una guía de ondas con una esquina, debemos notar que la estructura matemática de la ecuación de Helmholtz que describe una guía de ondas es equivalente a la ecuación estacionaria de Schrödinger que describe a un billar cuántico, siempre y cuando fijemos las unidades $\hbar^2/(2m) = 1$ y donde la energía corresponde al cuadrado de la frecuencia, $E = \omega^2/c^2$. Esta analogía ha sido empleada para obtener experimentalmente estados atrapados en guías de onda por John P. Carini y colaboradores [22–24] y en alambres cuánticos [34–36].

En los trabajos mencionados arriba, han logrado mostrar que la región que se encuentra por debajo de la energía de umbral de propagación o también llamada energía del primer modo propagante, corresponde a la región que permite encontrar estados atrapados en guías de onda. Dichos estados (funciones de onda) se caracterizan por ser ondas que evanescen a lo largo de los brazos de la guía. En nuestro estudio nos auxiliamos de la ecuación de Helmholtz definida en un sistema coordenado de dos dimensiones,

$$[\nabla_{x,y}^2 + k^2] \phi(x, y) = 0, \quad \phi|_{\partial\Omega} = 0, \quad (2.1)$$

donde Ω es la región de interés, el origen está situado en el ángulo exterior como se muestra en la fig. 2.1 (b) y el Laplaciano en componentes (x, y) es

$$\nabla_{x,y}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \quad (2.2)$$

Cabe señalar que en el caso electromagnético, la función $\phi(x, y)$ representa un factor de la solución completa de E_z del campo vectorial eléctrico y que corresponde al modo transversal

eléctrico TE_0^2 en la dirección de z , ver fig. 2.1(a). Es conveniente resaltar que las soluciones a lo largo de los brazos son una superposición de modos del tipo

$$\phi(x, y) = \sum_{m=1}^{\infty} \text{sen} \left(\frac{m\pi y}{d} \right) \exp(ik_x x), \quad (2.3)$$

donde se debe satisfacer la relación

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad (2.4)$$

con la cuantización transversal

$$k_y = \frac{m\pi}{d}, \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (2.5)$$

donde d corresponde a el ancho de la guía de ondas. Recordando la relación de dispersión se tiene

$$ck_x = \sqrt{\omega^2 - \left(\frac{cm\pi}{d} \right)^2}, \quad (2.6)$$

cuando $m = 1$ y $k_x = 0$ en (2.6) obtenemos la frecuencia de corte ω_c asociada al sistema

$$\omega_c = \frac{c\pi}{d}. \quad (2.7)$$

El método de diferencias finitas³ aplicado a la ecuación de Helmholtz (2.1) permite obtener una solución numérica del sistema, obteniendo las correspondientes energías propias y funciones de onda de una guía de ondas con esquina o bien las frecuencias propias y campos eléctricos en una guía de ondas en regiones con suficiente área, tanta como para albergar modos evanescentes. En la figura 2.2 se observa cómo la densidad de probabilidad (en el caso cuántico) o intensidad de campo (caso electromagnético o acústico) se acumula en las esquinas. Numéricamente también se encontró que la energía del estado atrapado en una esquina aislada E_0 se encuentra por debajo de la energía de umbral de propagación $E_t = \omega_c^2/c^2$, siendo $E_0 = 0.934E_t$ como se esperaba. Este valor encontrado para la energía de estado atrapado en una esquina aislada, está en buen acuerdo con lo reportado en otros trabajos previos [19, 22]. Los resultados anteriores nos proveen de herramientas para el bloque constructor y a partir de esto diseñar estructuras más elaboradas.

²La frecuencia de corte o energía de umbral de propagación ocurre cuando el modo transversal eléctrico es $TE_{1,0}$ usualmente el primer índice indica la dimensión más grande en la guía de ondas, dicho modo transversal es análogo al modo excitado TM_0 usado en billares de microondas 2D [37]

³Ver apéndice A

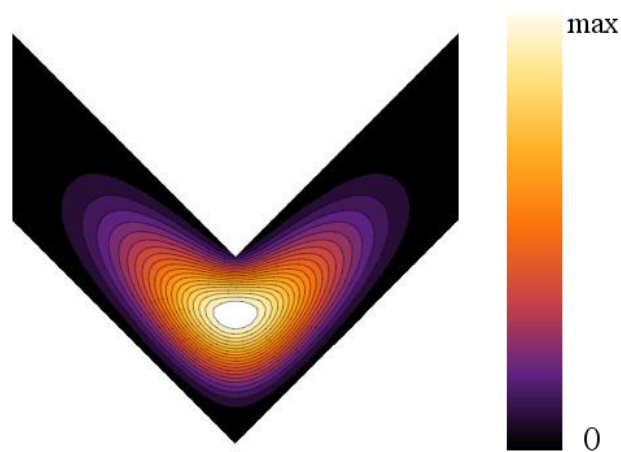


Figura 2.2: Gráfica de densidad para la función de onda. Solución numérica por el método de diferencias finitas de una guía de ondas doblada cuyo ángulo de doblez corresponde a $\theta = 90^\circ$.

2.1.1. Estados atrapados en redes hexagonales

El surgimiento de nuevas estructuras bidimensionales, tales como el grafeno [1,2] y el nitruro de boro [3] y todos aquellos que poseen una estructura de red hexagonal sirven como motivación para estudiar las propiedades de transporte en cables cuánticos. Gracias a la existencia de un estado atrapado en la juntura de tres brazos de una guía de ondas (ver fig. 2.3), que emula un sitio de la red hexagonal, permite la aplicabilidad de modelos de enlace fuerte, más aún es posible aplicar esto a ciertos arreglos irregulares variando la distancia de sus segmentos y cambiando así sus acoplamientos [38].

2.2. Masa efectiva e índice de refracción

Una manera de entender el atrapamiento, consiste en aplicar un mapa conforme a una guía de ondas con una esquina, transformándola en una guía de ondas rectificadas. Para ello se transforman las coordenadas $x, y \in \Omega$ que representan el interior de la guía y estas son llevadas a las nuevas coordenadas $0 \leq u \leq 1, -\infty < v < \infty$. La aplicación de la transformación conforme a la ecuación de Helmholtz, arroja un operador de Laplace acompañado por una función que depende de las coordenadas; el factor puede ser interpretado como una masa dependiente de la posición si se compara con la ecuación de Schrödinger,

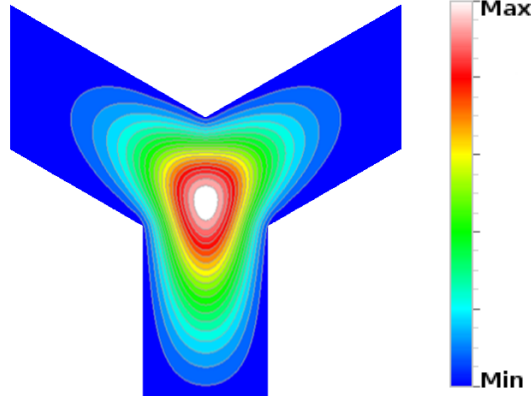


Figura 2.3: Estado atrapado o densidad de probabilidad (en el caso cuántico) o intensidad de campo (caso electromagnético o acústico) en una guía de ondas cuya geometría representa el bloque constructor para el diseño de redes hexagonales (ver fig. 1.1).

mientras que si se considera la ecuación de Helmholtz para campo electromagnético, este factor se puede interpretar como un índice de refracción efectivo. Para nuestros objetivos, se hace uso de la llamada transformación de Schwarz-Christoffel [39] y se encuentra que una función apropiada, para realizar una transformación conforme de una guía de ángulo recto a una guía plana, es $F(z)$ (ver fig. 2.2) tal que, $u = \text{Re}[F(x + iy)]$, $v = \text{Im}[F(x + iy)]$,

$$F(z) = u + iv = \frac{2}{\pi} \arcsin \left[\sqrt{I^{-1} \left(z \sin \left(\frac{3\pi}{8}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4} \right) \right)} \right], \quad (2.8)$$

donde I^{-1} es la inversa de la función Beta regularizada [40]. La elección de esta función $F(z)$ arroja como resultado una red coordenada que se ilustra en la fig. 2.4. Para una explicación más detallada ver [21].

2.2.1. Jacobiano J

El Laplaciano $\nabla_{x,y}^2$ en la ecuación de Helmholtz (2.1) es transformado debido a las nuevas coordenadas $\nabla_{u,v}^2$ como sigue

$$\nabla_{x,y}^2 = \frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)} \nabla_{u,v}^2, \quad (2.9)$$

donde el factor que aparece en (2.9) es el Jacobiano,

$$J(u,v) = \frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)} \equiv \left| \frac{dF(z)}{dz} \right|_{u,v}^2. \quad (2.10)$$

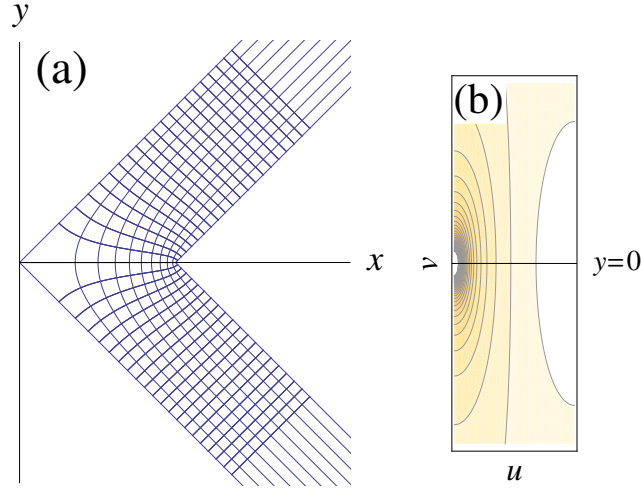


Figura 2.4: (a) Coordenadas conformes y las curvas que describen dentro del arreglo. (b) Curvas de nivel del Jacobiano como una masa dependiente de la posición.

Notamos que al aplicar una transformación conforme en (2.1) el operador $\nabla_{x,y}^2$ se ve modificado por un factor $\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}$ al que denominamos Jacobiano.

2.2.2. Masa en función de $J(u, v)$

Recordando que la ecuación de Schrödinger estacionaria puede escribirse como una ecuación de Helmholtz, la transformación conforme tiene el siguiente efecto

$$\left[\frac{1}{\mu(u, v)} \nabla_{u,v}^2 + E \right] \psi(u, v) = 0, \quad (2.11)$$

con $\psi(u, v) \equiv \phi[x(u, v), y(u, v)]$ y $\psi(0, v) = \psi(1, v) = 0$, donde el término $\mu(u, v) = \frac{\partial(x,y)}{\partial(u,v)}$ representa una masa efectiva, ver fig. 2.4, de donde se puede apreciar una mayor densidad de las curvas de nivel en la esquina externa de la guía como consecuencia de la disponibilidad de área que se tiene en dicha región.

2.2.3. Índice de refracción en función de $J(u, v)$

De la misma forma la ecuación de Helmholtz (2.1) puede escribirse en términos de la transformación conforme,

$$[\nabla_{u,v}^2 + \eta^2(u, v)k^2] \psi(u, v) = 0, \quad \psi(0, v) = \psi(1, v) = 0, \quad (2.12)$$

con $\psi(u, v) \equiv \phi[x(u, v), y(u, v)]$ y $\psi(0, v) = \psi(1, v) = 0$, donde el término $\eta(u, v) = \sqrt{\frac{\partial(x, y)}{\partial(u, v)}}$ representa un índice de refracción efectivo. Con η índice de refracción variable [41].

2.2.4. Reducción a un problema ondulatorio 1-D

El efecto de atrapamiento en guías de onda dobladas, se puede entender mejor si se considera la reducción del problema de valores a la frontera, a una dimensión. En cables cuánticos curvados, se ha estudiado el atrapamiento de un estado con energía por debajo del umbral del primer modo propagante, gracias al surgimiento de un potencial unidimensional que depende tanto de la curvatura como de una distancia crítica de atrapamiento [16]. Todo pozo de potencial unidimensional aislado, soporta estados ligados; la reducción unidimensional constituye una importante herramienta para demostrar la existencia de este fenómeno de localización. Recientemente mediante la aplicación de una transformación conforme sobre una guía de ondas doblada, se mostró que al reducir la ecuación de Schrödinger a una dimensión, aparece el término de potencial efectivo en un sistema con fronteras abiertas [21], dando así una interpretación del atrapamiento en términos de dicho potencial. Los detalles se muestran abajo.

En las secciones anteriores, se ha encontrado que una función analítica $F(z)$, ecuación (2.8), es adecuada. El resultado de realizar la transformación, nos permite reescribir una ecuación de Schrödinger que contiene un potencial efectivo que atrapa. Partimos de lo siguiente ($\hbar^2/2m = 1$)

$$[\nabla_{xy}^2 + E] \psi(x, y) = 0, \quad (2.13)$$

el mapeo de coordenadas $(x, y) = (x(u, v), y(u, v))$ implica una transformación en la ecuación de Schrödinger de la siguiente manera,

$$-\frac{\partial(u, v)}{\partial(x, y)} \nabla_{u, v}^2 \psi(u, v) = E\psi(u, v). \quad (2.14)$$

Reescribiendo (2.14),

$$\{-\nabla_{u, v}^2 + [1 - J(u, v)]E\} \psi(u, v) = E\psi(u, v), \quad (2.15)$$

de donde el factor $J(u, v) = \frac{\partial(x, y)}{\partial(u, v)}$ se identifica como el Jacobiano, además $\psi(u, v) \equiv \phi(x(u, v), y(u, v))$ y debe satisfacer que,

$$\psi(0, v) = \psi(1, v) = 0, \quad (2.16)$$

donde hemos logrado fijar las condiciones de frontera de una guía de ondas rectificadas, notemos que en (2.15) aparece un término relacionado con el potencial efectivo que depende de la densidad de área $J(u, v)$. Ahora se escribirá el término de potencial efectivo a lo largo de la coordenada v (coordenada longitudinal), para lo cual se toman en cuenta las condiciones de frontera impuestas sobre $\psi(u, v)$. Además de que se escoge una base ortonormal apropiada en la coordenada u (coordenada transversal),

$$\psi(u, v) = \sqrt{2} \sum_{n=1}^{\infty} f_n(v) \text{sen}(n\pi u), \quad (2.17)$$

de donde,

$$f_n = \sqrt{2} \int_0^1 du \psi(u, v) \text{sen}(n\pi u). \quad (2.18)$$

Se sabe también que el producto de las funciones de la forma $\text{sen}(m\pi u)\text{sen}(n\pi u)J(u, v)$ son funciones regulares dentro del dominio de la guía de ondas, por lo que está plenamente justificado desarrollar $\psi(u, v)$ en la (2.15) en términos de las funciones ortonormales $\sqrt{2}\text{sen}(n\pi u)$, $n = 1, 2, \dots$ de manera que se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones,

$$\sum_{m=1}^{\infty} [-\delta_{nm}\partial_v^2 + E\tilde{V}_{nm}]f_m(v) = E_n f_n(v), \quad (2.19)$$

con

$$E_n = E - (n\pi)^2, \quad \tilde{V}_{nm}(v) = \delta_{nm} - V_{nm}(v), \quad (2.20)$$

de donde

$$V_{nm}(v) = 2 \int_0^1 du \text{sen}(n\pi u)\text{sen}(m\pi u)J(u, v), \quad (2.21)$$

que son los elementos de matriz de los acoplamientos. La evaluación numérica de (2.21) arroja que

- (i) Los elementos $V_{nm}(v)$ decrecen cuando se alejan de la diagonal.
- (ii) Los elementos de $V_{nm}(v)$ tienden a una constante cuando n incrementa, es decir $V_{nm}(v) \leq \int_0^1 du J(u, v)$.
- (iii) Para $v \rightarrow \infty$ la matriz se aproxima a la matriz identidad, $V_{nm}(v) \rightarrow \delta_{nm}$.

Con la ayuda de la propiedad (i) donde los elementos de matriz $V_{nn}(v)$ corresponden a los elementos de matriz en la diagonal, permiten escribir a (2.19) en la siguiente forma,

$$[-\partial_v^2 + E\tilde{V}_n(v)]f_n(v) = E_n f_n(v), \quad (2.22)$$

donde,

$$V_n(v) = V_{nn}(v). \quad (2.23)$$

Gracias a la estructura de la expresión (2.22), podemos reescribirla en términos de un Hamiltoniano $H(v)$,

$$[H(v) - E_n]f_n(v) = 0, \quad (2.24)$$

de donde los eigenvalores E_n están relacionados con (2.20). En la fig. 2.5, podemos observar

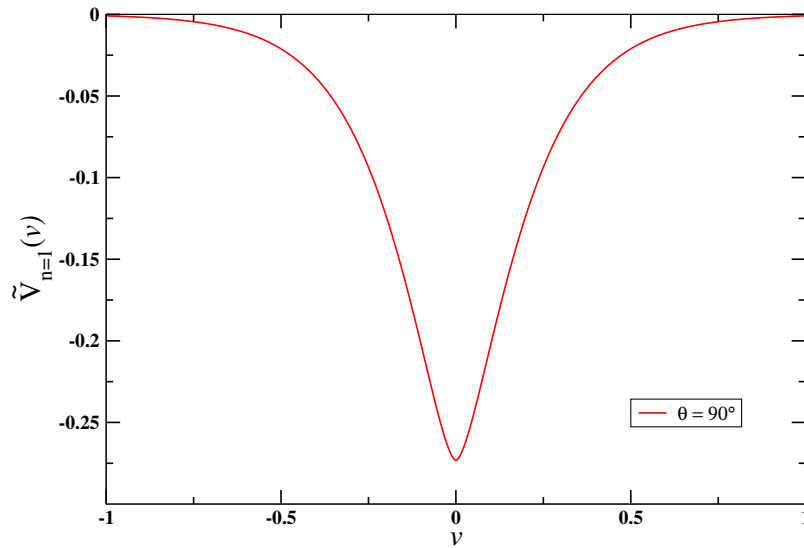


Figura 2.5: Se muestra el potencial efectivo $\tilde{V}_{n=1}(v) = 1 - V_{n=1}(v)$, para una guía de ondas doblada en ángulo recto es decir $\theta = 90^\circ$.

que el potencial efectivo $\tilde{V}_{n=1}(v) = 1 - V_{n=1}(v)$ es simétrico alrededor de $v = 0$. Es importante notar que la forma de este potencial nos describe el atrapamiento de una partícula que se mueve a lo largo de la coordenada v , pero no u . Ver [20].

2.2.5. Fuerza clásica

Aunque el efecto del atrapamiento es puramente cuántico, en el límite clásico es posible hallar una descripción del campo de fuerza efectivo dentro de una guía de ondas rectificadas.

En esta sección abordamos el problema clásico con el objetivo de determinar dicho campo de fuerza originado por la masa efectiva $\mu(u, v)$ (2.11) que encontramos con anterioridad.

Para ello partimos de las ecuaciones de Hamilton [42]

$$\frac{\partial H}{\partial p_j} = \dot{q}_j, \quad j = 1, 2 \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_j} = -\dot{p}_j, \quad j = 1, 2 \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0. \quad (2.27)$$

El Hamiltoniano para una partícula libre y cuya masa depende de las coordenadas (u, v) es

$$H = \frac{p^2}{2\mu(u, v)}, \quad (2.28)$$

de manera que las componentes de fuerza pueden derivarse de (2.26) para cada coordenada u y v . Estas son

$$\dot{p}_u = \left\{ \frac{p_u^2 + p_v^2}{2\mu(u, v)} \right\} \frac{1}{\mu(u, v)} \frac{\partial \mu(u, v)}{\partial u}, \quad (2.29)$$

$$\dot{p}_v = \left\{ \frac{p_u^2 + p_v^2}{2\mu(u, v)} \right\} \frac{1}{\mu(u, v)} \frac{\partial \mu(u, v)}{\partial v}. \quad (2.30)$$

Así, el campo de fuerza está dado por

$$\vec{F}(u, v) = \frac{E}{\mu(u, v)} \vec{\nabla}_{u,v} [\mu(u, v)], \quad (2.31)$$

donde $E = (p_u^2 + p_v^2)/2\mu(u, v)$. En la fig. 2.6 se muestra el campo de fuerzas asociado que exhibe el carácter repulsivo de geometrías convexas y atractivo en geometrías cóncavas. Es interesante estudiar casos modelo para funciones de masas localizadas en alguna región. En dichos casos se ha encontrado un fenómeno de atracción y órbitas clásicas cerradas, cuya forma matemática se da con lujo de detalle en un trabajo reciente [43].

2.3. Justificación de amarre fuerte

Volvemos a nuestra ecuación tipo Helmholtz [41], la cual se resuelve para una partícula cuántica en una cavidad [37], o modos TE en un buen conductor [41]:

$$[\nabla^2 - k^2] \phi(x, y) = 0, \quad \phi(x, y) = 0 \quad \text{si} \quad \phi(x, y) \in \partial\Omega. \quad (2.32)$$

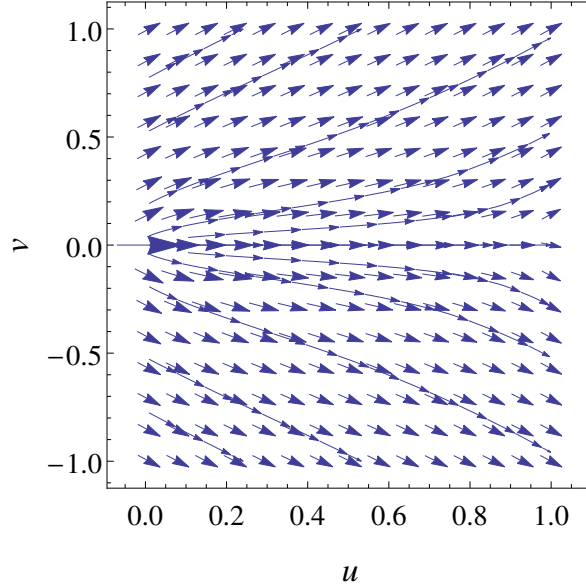


Figura 2.6: Campo de fuerzas debido a la masa dependiente de las coordenadas para la guía de ondas en la figura 2.2. La dirección de las flechas indica que la esquina cóncava ($u = 1$) es un atractor y la convexa ($u = 0$) es un repulsor.

El Hamiltoniano se puede identificar de la ecuación anterior como,

$$H = -\nabla^2. \quad (2.33)$$

El acoplamiento F entre dos esquinas 1 y 2 puede verse como el traslape de dos modos atrapados como sigue,

$$F = \int \int_{\Omega} \phi_1(x, y) H \phi_2(x, y) dx dy, \quad (2.34)$$

en un sistema con dos niveles de energía esto da lugar a la siguiente representación para un sistema con dos esquinas acopladas a bajas energías:

$$H_{E\text{-baja}} = \begin{pmatrix} E_b & F \\ F & E_b \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Aquí $k^2 = E_b$ se puede identificar con la energía del estado atrapado en una esquina aislada. Los cálculos numéricos nos muestran que el estado atrapado en una esquina es $E_b = 0.934E_t$ [19]. Eso representa una fracción de la energía de umbral de propagación $E_t = \pi^2/d^2$, donde d es la distancia transversal del segmento recto en una guía de ondas. En recientes trabajos se ha mostrado teóricamente y experimentalmente [21] que el modo

tiene colas que evanescen como función de la distancia L desde la esquina y medida a lo largo del segmento recto. Esto se puede escribir como,

$$\phi(x, y) \sim \Delta(0) \exp(L/2\lambda), \quad (2.36)$$

de donde la longitud de evanescencia λ se puede relacionar con la energía del estado de la siguiente manera, $\lambda \sim 1/\sqrt{E_b}$. Por lo tanto, la función F puede escribirse en una buena aproximación como,

$$F = \Delta(0) \exp\left(-\frac{L}{\lambda}\right). \quad (2.37)$$

Esta ley de decaimiento del acoplamiento respecto de la distancia entre dos esquinas fue obtenida a partir de dos distintas configuraciones y es un resultado que está en acuerdo con lo reportado en la literatura por Carini y colaboradores en [24].

Tomando en cuenta estas consideraciones, la aplicación de modelos de enlace fuerte, está justificada para sistemas con dos o más sitios suficientemente alejados. Hemos llevado a cabo cálculos numéricos de sistemas de guías de onda en 2 dimensiones para poder dar una comparación con nuestras predicciones matriciales. En la fig. 2.7 se puede observar que el

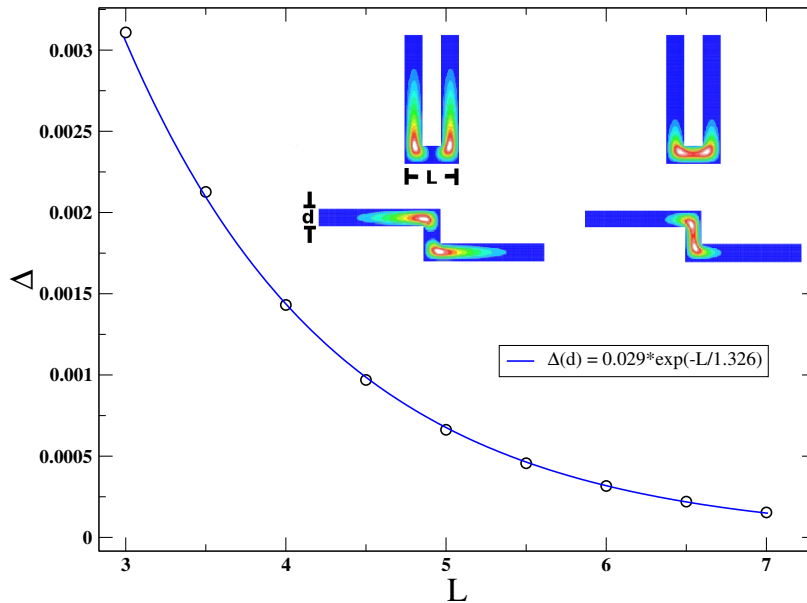


Figura 2.7: Ley de decaimiento del acoplamiento (separación de los niveles de energía) $F \sim \Delta$ como función de la distancia L entre dos esquinas.

acoplamiento disminuye cuando dos esquinas son separadas gradualmente. La curva en azul es el ajuste realizado a cada punto, obteniendo así los siguientes parámetros de dicho ajuste,

$\lambda = 1.3d$, $\Delta(0) = 0.43E_b$, o bien,

$$F = 0.43E_b \exp\left(\frac{-L}{1.3d}\right). \quad (2.38)$$

Esto ha sido calculado para las configuraciones en U y S. En recuadro fig. 2.7, se muestran las funciones de onda simétricas y anti-simétricas de guías de onda correspondientes a configuraciones tipo U y S en guías con esquinas.

2.4. Modelo de enlace fuerte a primeros vecinos

Los modelos de enlace fuerte son ampliamente utilizados para describir la propagación de un electrón en redes periódicas [44]. En el diseño y construcción de cadenas periódicas unidimensionales, se ha encontrado que la relación de dispersión de tales sistemas, sufre una asimetría cuando los arreglos son muy densos (distancia pequeña entre sitios) lo anterior es debido a que el traslape de las funciones de onda localizadas, tienen influencia más allá de primeros vecinos. En una dimensión puede emplearse en el caso de

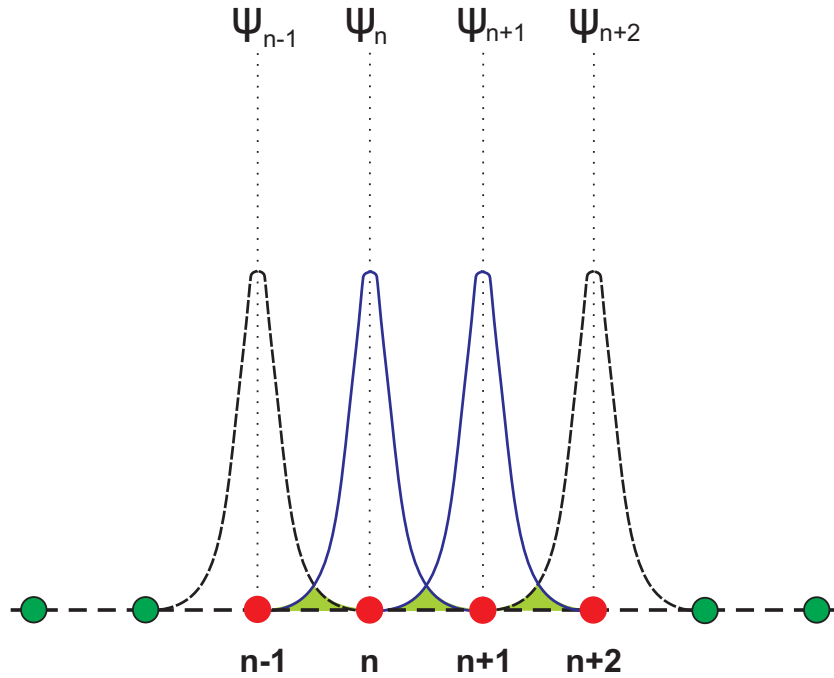


Figura 2.8: Esquema de un cristal unidimensional, donde cada sitio de la red está en la posición $x = na$, así mismo se observa que el traslape de la función de onda Ψ_n tiene contribuciones sólo en los acoplamientos a primeros vecinos.

arreglos diluidos (distancias largas entre esquinas). Dicho Hamiltoniano con interacción a primeros vecinos es,

$$H = E_n |n\rangle \langle n| + \Delta \sum_{n=1}^{N-1} \{ |n\rangle \langle n+1| + hc. \}, \quad (2.39)$$

donde E_n corresponde a la energías en sitio del estado $|n\rangle$ y Δ corresponde a los acoplamientos o traslapes de las funciones de onda localizadas, ver (2.34). De aquí en adelante consideraremos Δ 's positivos. Notemos que H se ha escrito en términos de la base de sitios atómicos $\{|n\rangle\}$, la base de sitios es un conjunto ortogonal completo en el espacio de Hilbert. De esta manera el Hamiltoniano de enlace fuerte puede verse como una matriz tridiagonal con elementos de matriz [44],

$$H_{mn} = \langle m|H|n\rangle = E_n \delta_{m,n} + \Delta(\delta_{m,n+1} + \delta_{m,n-1}), \quad (2.40)$$

Los eigenestados de H pueden escribirse como,

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle. \quad (2.41)$$

De manera que la ecuación de Schrödinger estacionaria para las funciones de onda $\psi_n \equiv \langle n|\psi\rangle$ toma la siguiente forma,

$$\sum_n H_{mn} \psi_m = E_n \psi_n + \Delta \psi_{n+1} + \Delta \psi_{n-1} = E \psi_n, \quad (2.42)$$

donde los sitios de la red están localizados en $x = na$, n es un entero y a es la distancia entre los sitios de la red. En un cristal perfecto la energía en sitio se mantiene constante $E_n \rightarrow E_0 = cte$, y la correspondiente relación de dispersión se puede escribir como ⁴,

$$E(k) = E_0 + 2\Delta \cos(ka), \quad -\pi/a \leq k \leq \pi/a. \quad (2.43)$$

Para una cadena con un número finito de sitios $n = 1, \dots, N$, se consideran condiciones de frontera $\psi_0 = \psi_{N+1} = 0$ en los extremos de las cadenas, por lo tanto la relación de dispersión toma la forma,

$$E(n) = E_0 + 2\Delta \cos\left(\frac{\pi n}{N+1}\right), \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (2.44)$$

Para efectos de modelado de espectros, haremos uso de Hamiltonianos de enlace fuerte con interacción a primeros vecinos, en vista de lo comentado anteriormente en relación con las distancias entre sitios. Sin embargo, veremos a continuación lo que ocurre con las asimetrías espectrales para acoplamientos de más alcance.

⁴En física del estado sólido esto corresponde a la primera zona de Brillouin

2.4.1. Descripción de la asimetría de la primera banda

Ahora mostramos el efecto que sufre la relación de dispersión (2.43) de un arreglo periódico de esquinas, cuando la distancia $L(d)$ entre los sitios es pequeña en comparación con la distancia transversal d .

En la fig. 2.10 se muestra una guía de ondas con 20 esquinas, la cual representa un sistema

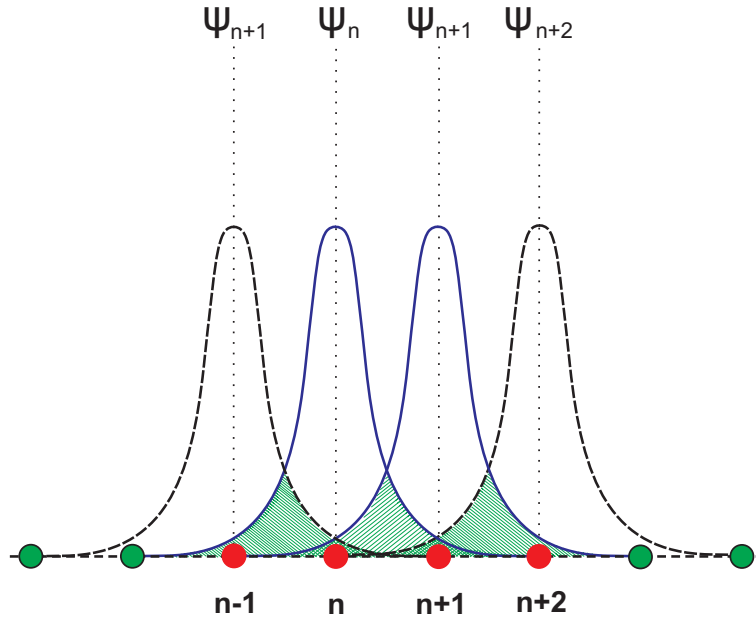


Figura 2.9: Esquema de cristal unidimensional que muestra la posición de cada sitio en $x = na$, así mismo se observa que el traslape de la función de onda Ψ_n tiene contribuciones en los acoplamientos a primeros y segundos vecinos.

periódico, y cuyas esquinas tienen una distancia de separación ($L = 4d$). Como resultado, se ha obtenido el espectro $E(k)$ de la primera banda fig. 2.12(a) de donde se puede observar, que existen efectos notables de asimetría en los niveles y se concluye que tales efectos son producidos por la distancia entre esquinas, dando lugar a funciones de onda localizadas que se extienden hasta segundos vecinos, de manera que el traslape de las funciones de onda, contribuye con acoplamientos Δ tanto a los primeros como a los segundos vecinos.

Al igual como se escribió el modelo de enlace fuerte a primeros vecinos (2.39), planteamos un Hamiltoniano con ket-bras hasta segundos vecinos,

$$H = E_0|n\rangle\langle n| + \Delta_1 \sum_{n=1}^{N-1} \{|n\rangle\langle n+1| + hc.\} + \Delta_2 \sum_{n=1}^{N-2} \{|n\rangle\langle n+2| + hc.\}, \quad (2.45)$$

y su correspondiente relación de dispersión toma la forma,

$$E(k) = E_0 + \Delta_1 \cos(ka) + \Delta_2 \cos(2ka), \quad -\pi/a \leq k \leq \pi/a. \quad (2.46)$$

En la fig. 2.11 se muestra el arreglo periódico, correspondiente a una guía de ondas con 20 esquinas, y una distancia entre esquinas $L = 7d$. Se muestra que la asimetría del espectro $E(k)$ fig. 2.12(b), disminuye debido a la distancia de separación que existe entre sitios (es decir las esquinas están más alejadas), lo que hace que las funciones de onda se localicen más, y por tanto contribuyan menos a los traslapes a segundos vecinos.

La razón de Δ_1/Δ_2 fue calculada para sistemas con distancias; $L = 4d, 5d, 6d$ y $7d$, ver



Figura 2.10: Arreglo periódico de 20 esquinas acopladas y separadas por $L = 4d$, donde d es la distancia transversal.



Figura 2.11: Arreglo periódico de 20 esquinas acopladas y separadas por $L = 7d$, donde d es la distancia transversal.

fig. 2.13, de donde Δ_1 y Δ_2 fueron obtenidas de los ajustes numéricos realizados a cada banda como se muestran en la fig. 2.12. Se puede observar que a medida que las esquinas se alejan, la influencia de los acoplamientos a segundos vecinos es cada vez más pequeña hasta obtener una banda de energías simétrica.

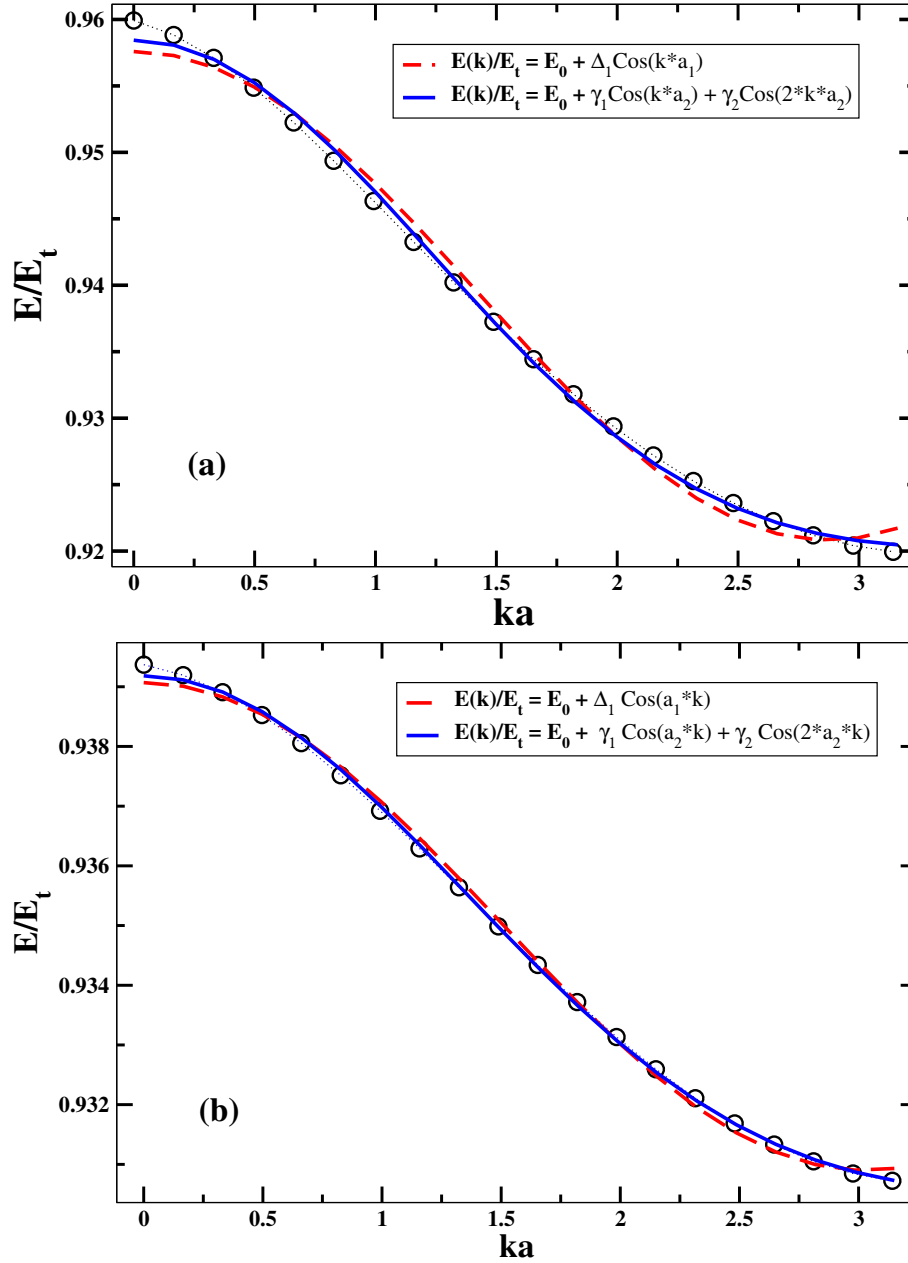


Figura 2.12: (a) Espectro de energías correspondiente a un sistema periódico de 20 esquinas con una distancia de separación entre esquinas de $L = 5d$. En línea discontinua se muestra el ajuste a primeros vecinos, donde $E_0 = 0.93920$, $\Delta_1 = 0.01838$ y $a_1 = 1.09410$. En línea continua se muestra el ajuste a segundos vecinos, donde $E_0 = 0.93670$, $\gamma_1 = 0.019033$, $\gamma_2 = 0.00270$ y $a_2 = 0.94459$. (b) Espectro de energías correspondiente a un sistema periódico de 20 esquinas con una distancia de separación entre esquinas de $L = 7d$. En línea discontinua se muestra el ajuste a primeros vecinos, donde $E_0 = 0.93498$, $\Delta_1 = 0.00408$ y $a_1 = 1.03710$. En línea continua se muestra el ajuste a segundos vecinos, donde $E_0 = 0.93437$, $\gamma_1 = 0.00429$, $\gamma_2 = 0.00051$ y $a_2 = 0.88955$.

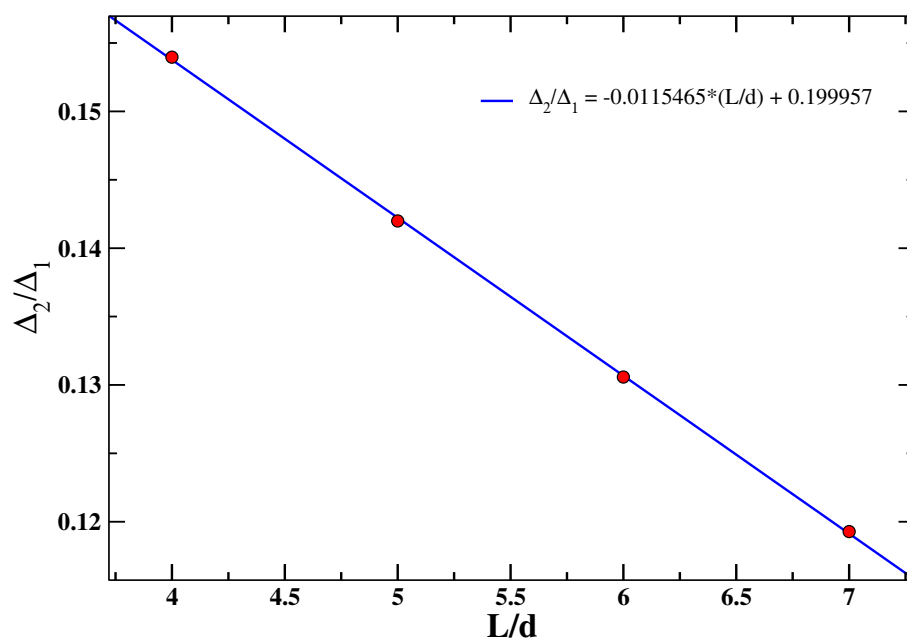


Figura 2.13: Δ_1/Δ_2 como función de la distancia entre esquinas L .

Capítulo 3

Transporte en guías de onda con esquinas en sistemas abiertos

El estudio de las propiedades de transporte en sistemas dispersivos es de gran interés, en particular cuando se trata de transporte evanescente a bajas energías o bien transporte de ondas de longitud de onda larga [45]. La gran flexibilidad que ofrecen los sistemas de guías de ondas, permiten realizar el estudio de la propagación y transporte evanescente a través de diferentes sistemas abiertos con esquinas y terminales semi-infinitas acopladas. Para ello se consideran arreglos dispersivos, donde la escala de energía de los espectros, se encuentra por debajo de la energía de umbral de propagación E_t . El sistema dispersivo que se estudia está compuesto por dos regiones importantes que son; la región de dispersión, el cual corresponde al sistema central compuesto de una guía de ondas con esquinas y la región de las terminales semi-infinitas por las cuales entran y salen las ondas. Específicamente se estudia la conductancia adimensional como función de la energía, para dos tipos de sistemas; el primero que se considera localmente periódico y el segundo, un sistema con desorden de orientación de segmentos. El diseño y construcción de estos arreglos nos permiten estudiar la propagación y transporte de electrones en nanoalambres o bien ondas electromagnéticas en configuraciones que podrían considerarse como antenas.

3.1. Descripción del arreglo dispersivo

En algunos sistemas complejos la región de interacción se considera desconocida, como lo es el caso de la descripción de núcleos pesados, de donde se obtienen experimen-

talmente los espectros de energía asociados y tratados estadísticamente, ver [46–48]. En nuestro caso se considera la región de dispersión a la parte de la guía de ondas con esquinas, la cual representa a un sistema que es localmente periódico, mientras que la segunda parte está representada por una región asintótica que se supone conocida, y que corresponde a las terminales que se acoplan al sistema. Ver fig. 3.1.

Se consideran como ejemplos de estudio algunos arreglos periódicos, donde las distancia entre esquinas L se mantiene invariante y está dada en términos de la distancia transversal d (ancho de la guía). Adicionalmente la orientación de los segmentos se alterna aleatoriamente, con el objetivo de estudiar los efectos producidos por el desorden en este tipo de configuraciones. La terminal cuasi-unidimensional puede contener M modos abiertos, lo que equivale a acoplar M terminales unimodales. En este trabajo nos restringimos a terminales que sólo soportan un modo transversal, también conocidas como terminales unimodales, por lo que a través de nuestros sistemas dispersivos o centrales, sólo se propagan modos evanescentes.

La manera tradicional de calcular las propiedades de transporte en arreglos dispersivos

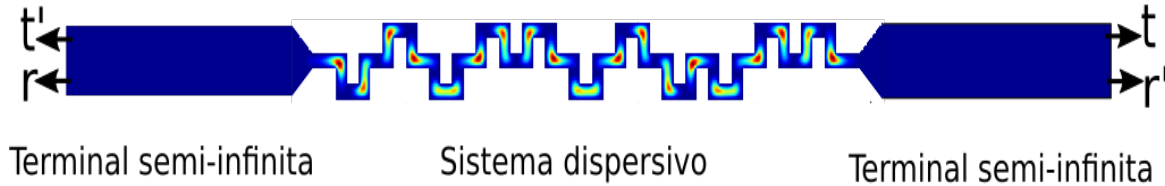


Figura 3.1: Arreglo dispersivo que muestra la relación de los elementos de la matriz de dispersión S de donde $(t$ y $t')$ son amplitudes de transmisión y $(r$ y $r')$ amplitudes reflexión.

es a través de la matriz de dispersión, también conocida como matriz S . La matriz S es una herramienta fundamental que permite el análisis de los fenómenos de dispersión tanto cuánticos como electromagnéticos. Físicamente la matriz de dispersión relaciona ondas que entran con ondas que salen, de una cierta región de interacción, de la siguiente manera:

$$A_{\text{salen}} = SB_{\text{entran}} , \quad (3.1)$$

donde A_{salen} y B_{entran} representan vectores en términos de amplitudes de las ondas que entran y ondas que salen de la región de interacción, respectivamente. Consideramos $2M$

terminales semi-infinitas¹ acopladas a la región de interacción.

Empleando métodos estandarizados [49] la matriz de dispersión se puede escribir en la forma [50, 51]

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

los símbolos t , t' , r y r' en la matriz S (3.2), son matrices de tamaño $M \times M$. Los elementos de las matrices de transmisión (t y t') y reflexión (r y r') son las amplitudes de transmisión y reflexión, respectivamente. Una vez que se conoce la matriz S se pueden calcular cantidades de transporte, por ejemplo la transmisión total,

$$G = \frac{1}{2M} \sum_m \sum_n |t_{mn}|^2 = \text{Tr}(tt^\dagger), \quad (3.3)$$

donde $G + R = 1$ y R es la reflexión total. También podemos obtener la conductancia, por medio de la fórmula de Landauer-Buttiker [52, 53]

$$T = \frac{4e}{\hbar^2} MG, \quad (3.4)$$

de donde e es la carga del electrón y \hbar la constante de Planck. Otras cantidades que pueden obtenerse a partir de la matriz de dispersión (3.2) son: la distribución de la conductancia $w(T)$, su promedio $\langle T \rangle$ y su varianza $\text{var}(T)$, el ruido cuántico². Para estudios en sistemas mesoscópicos, ver [54].

3.2. Arreglos dispersivos con sistemas periódicos

En esta sección se explora la conductancia adimensional (3.3) en sistemas que son localmente periódicos, donde la región del sistema que representa la parte dispersiva es el sistema interno. En particular, nos centramos en el estudio de la banda de energía más baja. Los parámetros que se emplean para el diseño y construcción de los diferentes sistemas son los siguientes; d representa la distancia transversal de la guía de ondas interna, L es la longitud entre dos esquinas en unidades de d , N es el número de esquinas que constituyen a una guía de ondas, p es la probabilidad de encontrar celdas compuestas de dos esquinas

¹Se escogen $2M$ terminales de esta manera la matriz S se puede dividir en cuatro bloques que representan reflexión y transmisión. Si el número de terminales no es un número par la estructura de la matriz es más complicada y no podemos escribirla en bloques.

²Al ruido cuántico se le conoce en inglés como *shot noise*.

orientadas hacia arriba, D es la distancia transversal de las terminales semi-infinitas, izquierda y derecha que acoplan al sistema dispersivo.

Para el estudio de la banda más baja, en el caso de los sistemas que son localmente periódicos, se diseñaron diferentes configuraciones en las que se acoplan varias esquinas hasta formar una guía tipo escalera. Específicamente se construyeron dos distintos sistemas con $L = 2.5d$ y $L = 5d$ ver fig. 3.2, ambos con $N = 20$ esquinas, en donde la distancia transversal de las terminales semi-infinitas (izquierda y derecha) en ambos sistemas fue fijada a $D = 5d$. En la fig. 3.2 se muestran dos sistemas dispersivos, en donde se observa cómo los estados

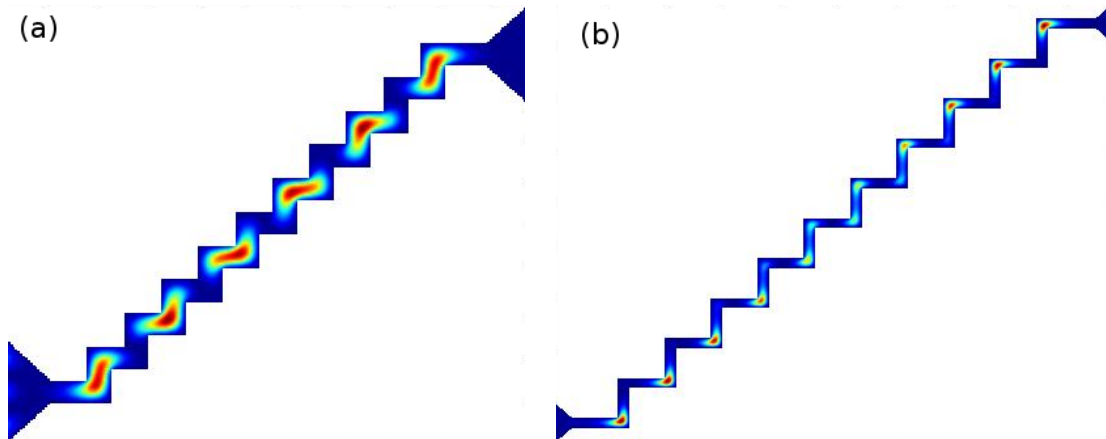


Figura 3.2: (a) Sistema dispersivo donde el parámetro $L = 2.5d$. (b) Sistema dispersivo donde el parámetro $L = 5d$.

localizados (funciones de onda) producen transmisión a lo largo del arreglo. Como ya se ha visto en el capítulo anterior al igual que en sistemas cerrados, se puede hacer uso de modelos de enlace fuerte, para estudiar sistemas a los cuales se acoplan terminales semi-infinitas, por lo tanto se puede considerar un Hamiltoniano de *enlace fuerte*, con acoplamientos $\Delta \sim F$ a primeros vecinos. Este Hamiltoniano (3.5) describe al sistema interno. También es importante mencionar, que este modelo considera a la parte dispersiva como un sistema periódico

finito (también conocido como localmente periódico)

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & 0 & \dots & 0 \\ \ddots & E_0 & \Delta & \ddots & \vdots \\ 0 & \Delta & E_0 & \Delta & 0 \\ \vdots & \ddots & \Delta & E_0 & \ddots \\ 0 & \dots & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

En un arreglo periódico con amarre fuerte a primeros vecinos, es bien sabido que la relación de dispersión puede obtenerse al resolver el problema de eigenvalores esto es,

$$E_k = E_0 + 2t \cos(k),$$

donde t es el ancho de banda. Nótese que para un sistema interno de dos niveles, en lugar de tener un ancho de banda, se tiene simplemente el espaciado entre los dos niveles dado por $t = |(E_2 - E_1)/2|$.

Estudiamos ahora los espectros del sistema completo a través de la conductancia adimensional (3.4) en el régimen por debajo del umbral de propagación. Se puede apreciar que el

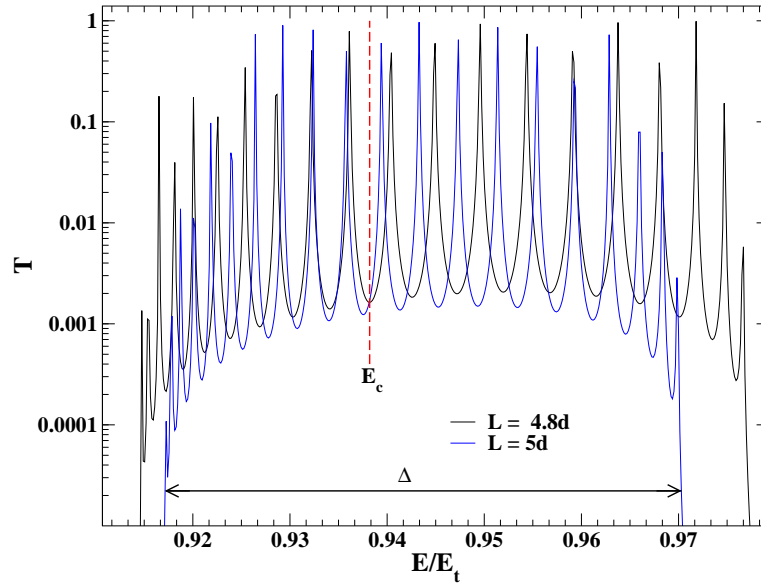


Figura 3.3: Bandas de conductancia adimensional para una guía tipo escalera con 20 esquinas y $L = 4.8d$ y $L = 5d$

ancho de banda se reduce cuando se aumenta la distancia de separación entre esquinas y también se observa que el número de picos corresponde a el número de esquinas, es decir, la dimensión del espacio de Hilbert ver fig. 3.3.

3.3. Estabilidad ante desorden orientacional en guías de ondas con esquinas

En la sección anterior se ha estudiado la conductancia adimensional en un sistema abierto, pero que es localmente periódico; sin embargo, es de gran interés construir configuraciones más flexibles. Por ejemplo se propone la construcción de arreglos en guías de onda, con desorden en la orientación de segmentos cuando cada segmento está conectado con dos esquinas que yacen sobre la misma línea vertical. Tales guías de ondas, fueron diseñadas tomando en cuenta los siguientes parámetros; $N = 20$ esquinas, una distancia entre esquinas $L = 3.0d$ y $L = 4.4d$, la distancia transversal D en las terminales semi-infinitas tanto izquierda como derecha, fueron fijadas a $D = 5d$.

Los resultados obtenidos de la conductancia T como función de la energía E/E_t con $N = 20$ son similares a los obtenidos en los sistemas que son localmente periódicos.

Numéricamente se ha obtenido el espectro de la banda más baja de conducción, dicho espectro muestra picos resonantes que formalmente son $T = 1$, de igual modo se observa que el número de picos resonantes coincide con el número de esquinas del arreglo ver fig. 3.4. El espectro obtenido en fig. 3.4 (a) corresponde al sistema con $L = 3.0d$ de donde se observa que dicho espectro rebasa el umbral de propagación, además se puede ver una asimetría, a pesar de que el sistema es localmente periódico. En la fig. 3.4 (b) se muestra el espectro de la conductancia T como función de E/E_t para $L = 4.4d$ muestran que este se encuentra por debajo del umbral de propagación y la asimetría tiende a desaparecer. En ambos sistemas se observan pequeñas desviaciones a medida que es variado el parámetro de desorden orientacional definido por p como la probabilidad de tener segmentos que conectan dos esquinas dos esquinas orientados hacia arriba o hacia abajo, dicho parámetro puede tomar valores $p = 0.0, \dots, 0.5$. Esto se ilustra en el recuadro de la fig. 3.4 (a) y (b). Es importante notar que a estas escalas de energía y con tal distancia de separación entre esquinas, los efectos de desorden no son muy notorios.

En las figs. 3.5 y 3.6 se pueden observar las funciones de onda, $|\psi(x, y)|^2$ para sistemas con

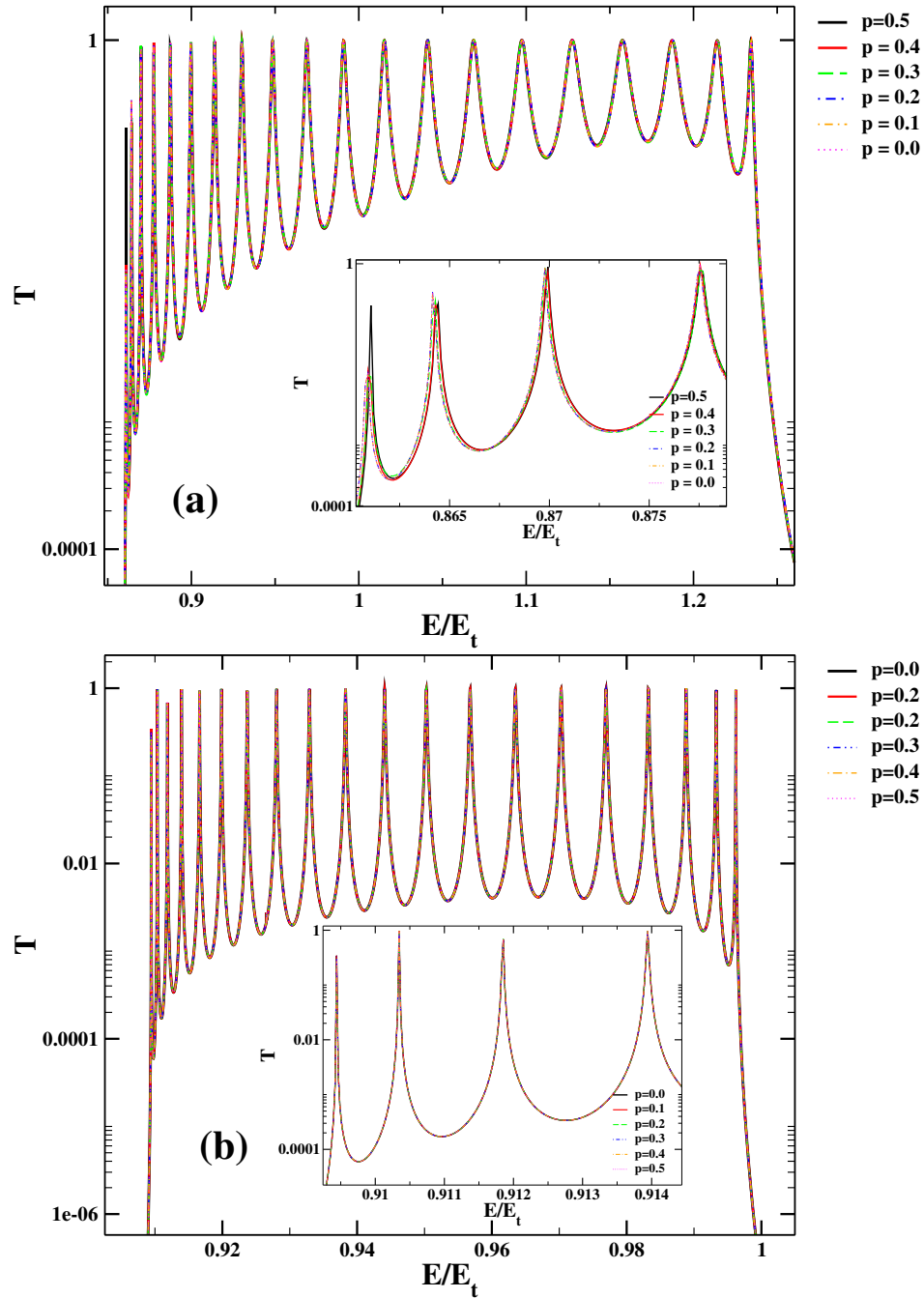


Figura 3.4: (a) Espectro de conductancia T como función de la energía E/E_t para un sistema dispersivo con $L = 3.0d$. Cada curva representa a un sistema distinto, con $L = 3.0d$ y $p = 0.0, \dots, 0.5$. (b) Espectro de conductancia T como función de la energía E/E_t para un sistema dispersivo con $L = 4.4d$. Cada curva representa a un sistema distinto $p = 0.0, \dots, 0.5$.

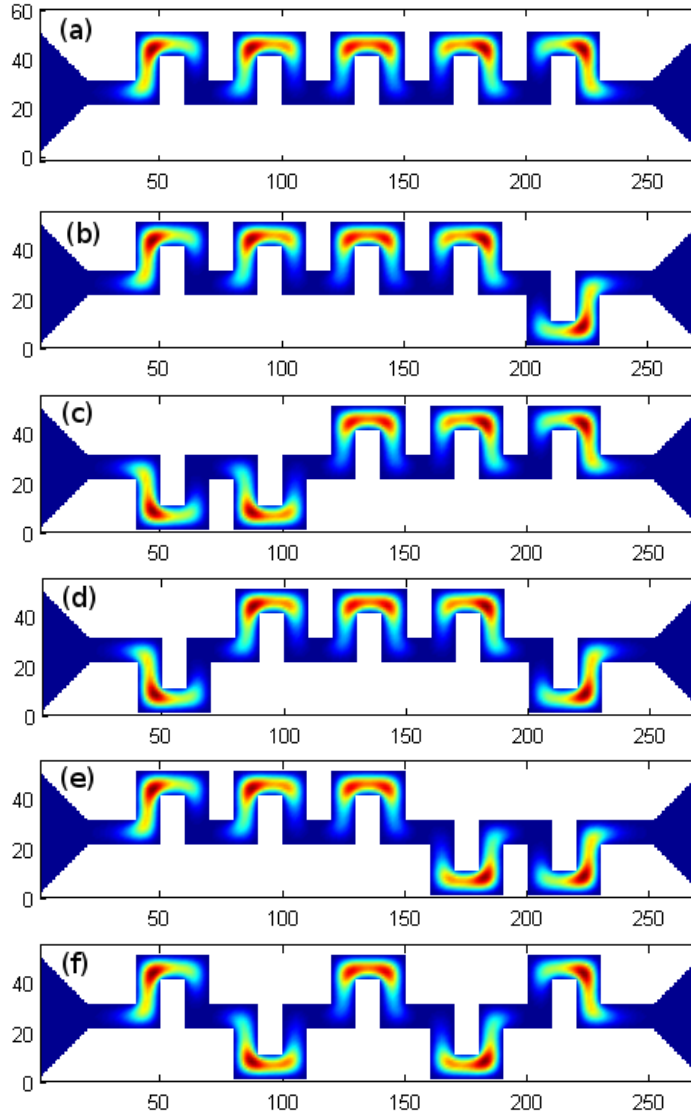


Figura 3.5: Amplitudes de las funciones de onda, $|\psi(x, y)|^2$ correspondientes a la energía $E = 0.8874E_t$ de un sistema dispersivo con 20 esquinas $N = 20$ y con una ancho de terminal semi-infinita de $D = 5d$, así mismo la distancia entre esquinas fue tomada como, $L = 3d$ en unidades de la distancia transversal d del sistema interno. En cada sistema fue variado el parámetro de desorden orientacional p , es decir; (a) $p = 0.0$, (b) $p = 0.1$, (c) $p = 0.2$, (d) $p = 0.3$, (e) $p = 0.4$, (f) $p = 0.5$,

$L = 3.0d$ y $L = 4.4d$. En cada sistema fue variado el parámetro de desorden orientacional p generando distintas configuraciones de guías de ondas, ilustrando la robustez ante el desorden orientacional mediante variaciones de los niveles de energía en el orden de milésimas

en E/E_t .

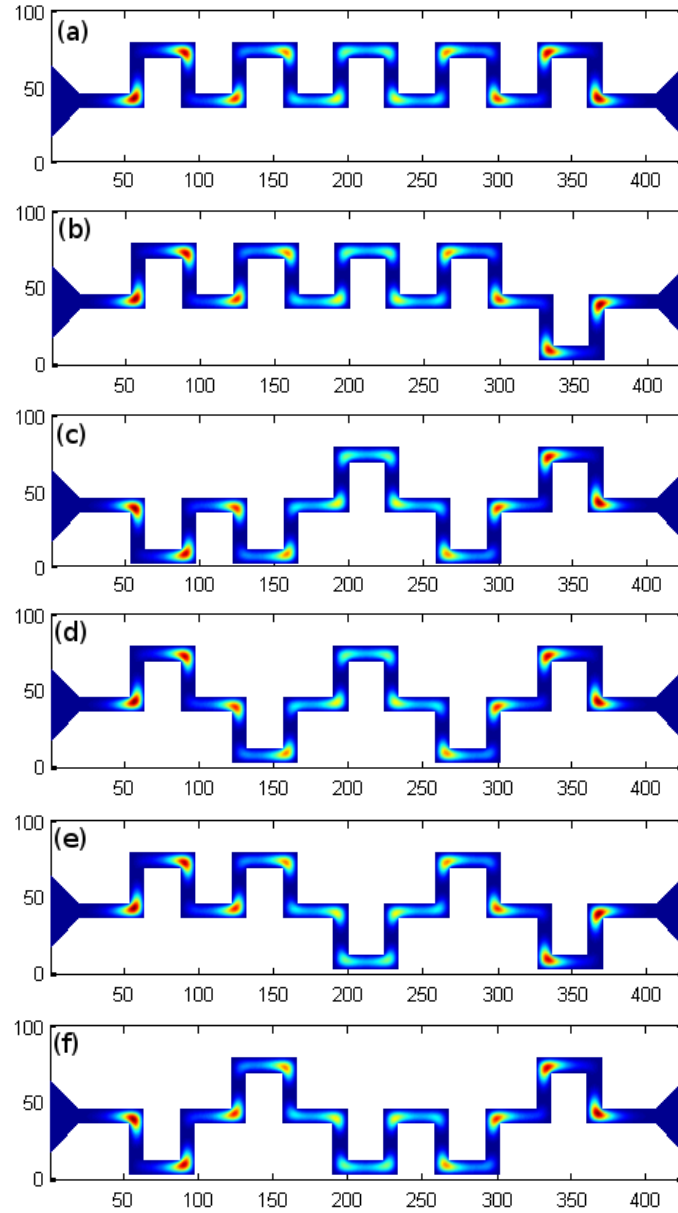


Figura 3.6: Amplitudes de las funciones de onda, $|\psi(x, y)|^2$ correspondientes a la energía $E = 0.9440E_t$ de un sistema dispersivo con 20 esquinas $N = 20$ y con una ancho de terminal semi-infinita de $D = 5d$, así mismo la distancia entre esquinas fue tomada como, $L = 4.4d$ en unidades de la distancia transversal d . En cada sistema fue variado el parámetro de desorden orientacional p , es decir; (a) $p = 0.0$, (b) $p = 0.1$, (c) $p = 0.2$, (d) $p = 0.3$, (e) $p = 0.4$, (f) $p = 0.5$.

3.4. Efecto de acoplar terminales a sistemas dispersivos

Los resultados obtenidos en la sección anterior, donde el sistema dispersivo está representado por un sistema que es localmente periódico, muestran que la conductancia adimensional se ve afectada por la distancia entre esquinas, provocando una asimetría en la banda de niveles, así como anchuras finitas en cada pico de transmitancia. Una interpretación, física de este fenómeno es debido al acoplamiento de terminales al sistema. Como se puede observar en la fig. 3.3 el espectro obtenido del sistema interno con terminales acopladas no es simétrico como se esperaba, pues es bien sabido que en sistemas periódicos se obtiene un espectro de energías tipo coseno (relación de dispersión) que es simétrica. Existen estudios de transporte en sistemas mesoscópicos que abordan este tipo de situación, los cuales se apoyan en la definición de una función de Green. Esta función permite entender las diferencias producidas al acoplar terminales a un sistema interno.

El concepto de la función de Green aparece en muchas áreas de la física, tales como la teoría de circuitos, teoría electromagnética y sistemas mecánico cuánticos. A continuación vamos a resumir brevemente algunas de las propiedades de esta función. Se trata de un kernel integral que nos da la respuesta en cualquier punto dentro de un conductor debida a la excitación en cualquier otro punto. Si la respuesta denotada por un vector R , está relacionada con la excitación X a través del operador diferencial D_{op} . representado de la siguiente manera

$$D_{\text{op}}R = X. \quad (3.6)$$

Así, la respuesta se puede expresar como

$$R = D_{\text{op}}^{-1}X = GX \quad \text{donde} \quad G = D_{\text{op}}^{-1}. \quad (3.7)$$

Para ilustrar la manera de obtener una función de Green se empleará la ecuación unidimensional de Schrödinger (2.13) (estacionaria),

$$H\psi = E\psi, \quad H = -\nabla^2, \quad (3.8)$$

esto es

$$(E - H)\psi(x) = 0, \quad (3.9)$$

reescribiendo (3.9) en términos de la función de Green se tiene lo siguiente,

$$\left(E + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)G(x, x') = \delta(x - x'), \quad (3.10)$$

que es justamente la ecuación de Schrödinger excepto por el término $\delta(x - x')$ en la derecha que representa la fuente. Físicamente, se espera que para una excitación en algún punto, se generen ondas viajando hacia afuera del punto de excitación,

$$G(x, x') = A^+ \exp[ik(x - x')], \quad x > x', \quad (3.11)$$

$$G(x, x') = A^- \exp[-ik(x - x')], \quad x < x', \quad (3.12)$$

estas dos soluciones se pueden reescribir de la siguiente forma

$$G^R(x, x') = -\frac{i}{\nu} \exp[ik(x - x')], \quad x > x', \quad (3.13)$$

$$G^A(x, x') = \frac{i}{\nu} \exp[-ik(x - x')], \quad x < x', \quad (3.14)$$

donde G^R y G^A representan funciones de Green retardada (ondas saliendo de x') y avanzada (ondas entrando a x'), $k = \sqrt{E}$ y $\nu = 2\sqrt{E}$. En general la función de Green (retardada) se representa por,

$$G^R(x, x') = [E - H_s + i\eta]^{-1}. \quad (3.15)$$

Se ha introducido el parámetro η para evitar singularidades en la función de Green.

Como ya hemos notado la función de Green se puede escribir de la siguiente manera

$$G^R = [(E + i\eta) - H_s]^{-1}. \quad (3.16)$$

En nuestro caso este formalismo se empleará en la descripción de un sistema conectado a una terminal a la izquierda de tal forma que el sistema esté abierto. Reescribiendo la función de Green se tiene

$$G^R = \begin{pmatrix} G_t & G_{ts} \\ G_{st} & G_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (E + i\eta)I - H_t & \tau_t \\ \tau_t^+ & EI - H_s \end{pmatrix}^{-1}. \quad (3.17)$$

Las matrices τ_t representan los acoplamientos entre el sistema y la terminal. Ahora vamos a derivar una expresión explícita para la submatriz G_s ya que es la parte en la que estamos interesados

$$\begin{pmatrix} (E + i\eta)I - H_t & \tau_t \\ \tau_t^+ & EI - H_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_t & G_{ts} \\ G_{st} & G_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

obteniendo las siguientes dos ecuaciones

$$[(E + i\eta)I - H_t] G_{ts} + [\tau_t] G_s = 0, \quad (3.19)$$

y

$$[(EI + H_s]G_s + [\tau_t^+]G_{ts} = I, \quad (3.20)$$

de (3.19) se obtiene

$$G_{ts} = -g_t^R \tau_t G_s \quad (3.21)$$

donde

$$g_t^R = [(E + i\eta)I - H_t]^{-1}, \quad (3.22)$$

que corresponde a una función de Green para una terminal semi-infinita, de esta manera se tiene

$$G_s = [EI - H_s - \tau_t^+ g_t^R \tau_t]^{-1}, \quad (3.23)$$

reescribiendo

$$G_s = [EI - H_s - \Sigma^R]^{-1}, \quad (3.24)$$

con

$$\Sigma^R = \tau_t^+ g_t^R \tau_t = \Delta + i\gamma. \quad (3.25)$$

Para el caso de una terminal multimodal semi-infinita la función de Green toma la forma

$$\Sigma^R = \tau_t^+ \tau_t \sum_{m \in t} \chi_m(t_i) \exp[+ik_m(x - x')] \chi_m(t_j), \quad (3.26)$$

donde χ_m es un vector que representa las componentes de la función de onda en las terminales que conectan al sistema interno. La variable k_m indica el vector de onda, m es un índice de modo y t_j, t_i son las terminales donde i y j corresponde a índices que indican si la terminal es izquierda o derecha.

$$\Sigma^R = \Delta + i\gamma. \quad (3.27)$$

De manera que la función de autoenergía Σ^R es una función compleja³, donde la parte real de Σ^R describe correcciones al espectro de energías y la parte imaginaria describe las anchuras. Para la parte real se tiene,

$$E_k = E_0 + 2t \cos k + \text{Re}(\Sigma^R). \quad (3.28)$$

Se verifica que las anchuras dependen de la energía con una formula semi-circular. Hasta ahora no conocemos la matriz de acoplamientos τ_t , falta hacer un ajuste para tener una aproximación correcta del espectro.

³Ver apéndice B

3.5. Matriz de dispersión y su relación con la función de Green

En esta sección se presenta una forma de expresar los elementos de matriz S en términos de la función de Green [55]. Considerando un sistema dispersivo que conecta con dos terminales, por una de las cuales se envía una onda incidente generada en la terminal izquierda (terminal I) la cual se transmite parcialmente hacia la terminal derecha (terminal D) y definiendo $x_I = 0$ como la posición donde se acopla la terminal izquierda con el sistema dispersor, tendremos una función de Green G_{DI}^R definida entre la interface $x_I = 0$ y $x_D = 0$ esto es:

$$G_{DI}^R(y_D; y_I) = G^R(x_D = 0, y_D; x_I = 0, y_I). \quad (3.29)$$

Una manera sencilla de escribir la matriz S considera únicamente el sistema de dos terminales acopladas, suponiendo que es posible desprestigiar la coordenada y (dimensión transversal) de manera que el sistema se considera unidimensional. Un pulso generado en $x_I = 0$ produce una onda cuya amplitud denotamos por A_I^- lejos del conductor y otra amplitud de onda A_I^+ viajando hacia el sistema interno donde es dispersada hacia las diferentes terminales,

$$G_{DI}^R = \delta_{DI} A_I^- + s'_{DI} A_I^+, \quad (3.30)$$

de donde s'_{DI} es la matriz de dispersión y amplitudes están relacionadas por

$$A_I^+ = A_I^- = \frac{-i}{\hbar \nu_D}, \quad (3.31)$$

y la matriz de dispersión del sistema S_{DI} queda relacionada con la anterior como

$$s'_{DI} = S_{DI} \sqrt{\nu_D / \nu_I}, \quad (3.32)$$

y resolviendo para S_{DI} de (3.30) se tiene,

$$S_{DI} = -\delta_{DI} + i\hbar \sqrt{\nu_D \nu_I} G_{DI}^R. \quad (3.33)$$

Esta última expresión denota la matriz de dispersión en términos de la función de Green.

3.5.1. Matriz de dispersión para terminales multimodales

Si se consideran terminales multimodales, los detalles respecto a los de las terminales unimodales (3.30) cambian ligeramente,

$$G_{DI}^R(y_D; y_I) = \sum_{m \in I} \sum_{n \in D} \left[\delta_{mn} A_m^- + s'_{nm} A_m^+ \right] \Xi_n(y_D), \quad (3.34)$$

de (3.31) se tiene que la amplitud toma la siguiente forma,

$$A_m^+ = A_m^- = \frac{-i}{\hbar\nu_m} \Xi_m(y_D), \quad (3.35)$$

también

$$S'_{nm} = S_{nm} \sqrt{\nu_m/\nu_n}, \quad (3.36)$$

sustituyendo en la función de Green (3.34),

$$G_{DI}^R(y_D; y_I) = \sum_{m \in I} \sum_{n \in D} \left[\delta_{mn} \left(\frac{-i}{\hbar\nu_m} \Xi_m(y_D) \right) + S'_{nm} \left(\frac{-i}{\hbar\nu_m} \Xi_m(y_D) \right) \right] \Xi_n(y_D), \quad (3.37)$$

arreglando esta última ecuación se tiene,

$$G_{DI}^R(y_D; y_I) = \sum_{m \in I} \sum_{n \in D} \frac{-i}{\hbar\sqrt{\nu_n\nu_m}} \chi_n(y_D) \left[\delta_{mn} \sqrt{\frac{\nu_n}{\nu_m}} + S_{nm} \right] \chi_m(y_I), \quad (3.38)$$

así los elementos de la matriz de dispersión S , para terminales multimodales pueden escribirse en términos de la función de Green de la siguiente manera,

$$S_{mn} = -\sqrt{\nu_n/\nu_m} \delta_{nm} + i\hbar\sqrt{\nu_n\nu_m} \int \int \chi_m(y_I) G_{DI}^R(y_D; y_I) \chi_n(y_D) dy_D dy_I. \quad (3.39)$$

Así se ha introducido la matriz de dispersión en términos de una función de Green tanto para sistemas 1D como para sistemas 2D donde la función real $\chi_n(y_D)$ describe los modos transversales. También se ha calculado la función de Green retardada G^R la cual es usada para describir los efectos, que surgen al acoplar terminales semi-infinitas a un sistema dispersivo, es decir, estos efectos son incorporados a través de la función de autoenergías Σ^R , por lo tanto se tiene que $G^R = [EI - H_s - \Sigma^R]$.

En este capítulo, se han explorado algunas configuraciones de sistemas abiertos es decir, sistemas de guías de ondas, en los que se han acoplado terminales semi-infinitas. Diferentes arreglos arrojan que la simetría de los espectros de conductancia como función de la energía se ven afectados, se ha encontrado que tales efectos son causados por dos factores, (i) la distancia entre esquinas o sitios que conforman la guía de ondas y (ii) el acoplamiento de terminales semi-infinitas. Habiendo estudiado los efectos de acoplar terminales a nuestro dispositivo central, el resto de este trabajo podrá enfocarse en diseñar exclusivamente sistemas centrales cerrados. Este diseño inverso arrojará arreglos correspondientes a un espectro deseado. Posteriormente se podrán incorporar los efectos que hemos descrito en este capítulo.

Capítulo 4

Diseño inverso de cadenas finitas

Los problemas inversos pueden tener grandes aplicaciones en diversas áreas de la Física. Aquí nos interesa estudiar el diseño inverso en problemas pertenecientes al estado sólido, cristales fotónicos [56, 57] y redes ópticas [58, 59]. Estos ejemplos cubren rangos de escalas que van desde los sistemas mesoscópicos a sistemas nanoscópicos. En particular es de gran interés el diseño inverso de redes unidimensionales con sitios idénticos, así como caracterizar el espacio de todos aquellos Hamiltonianos de enlace fuerte que producen un espectro finito determinado. Sin embargo, es importante mencionar que existen trabajos relacionados con gráficas cuánticas que tratan problemas similares, pero a pesar de las marcadas similitudes existen marcadas diferencias. Entre ellas encontramos las gráficas cuánticas que son sistemas 1D y son descritas por un operador Laplaciano definido sobre los vértices de la gráfica, por lo que el transporte evanescente no es posible, en contraste con los sistemas 2D que ya hemos estudiado. En trabajos previos, se ha revisado el mecanismo de atrapamiento en geometrías abiertas [21] y que han dado lugar a la aplicabilidad de modelos de enlace. Es preciso mencionar que el problema inverso se puede abordar de dos maneras: la primera por la vía analítica y la segunda por la vía de los métodos numéricos, esto arroja que la dimensionalidad del espacio de soluciones, corresponde a una familia de sistemas que son isoespectrales, permitiendo tener una visión general del espacio de acoplamientos. Dicho método generará relaciones de recurrencias que involucran el tamaño del sistema, las energías correspondientes y los acoplamientos. Esto nos permitirá escribir sus soluciones en forma de acoplamientos determinados por un espectro preescrito.

4.1. El problema de diseño inverso en modelos de amarre fuerte

En esta sección se abordará el problema de isoespectralidad como una clase de equivalencia continua. Dado un Hamiltoniano se encontrará una familia isoespectral a través de un conjunto de parámetros continuos. La estrategia es escribir un operador que dependa de los acoplamientos del sistema y operar sobre este con transformaciones de similitud para finalmente reconstruir el Hamiltoniano generado. Por otro lado se presenta la solución del problema inverso de sistemas de cadenas lineales de sitios con acoplamiento a primeros vecinos. Trabajaremos con sistemas de sitios idénticos. Es importante mencionar, que este tipo de modelos se caracterizan, por ser matrices tridiagonales que pertenecen a una clase más amplia, es decir a las llamadas matrices de Jacobi. Existen trabajos relacionados con este tipo de matrices que implementan la solución del problema inverso [60]; sin embargo, la solución propuesta en la literatura existente está basada en la suposición de dos espectros conocidos y dos Hamiltonianos de tamaño diferente que pertenecen a una misma secuencia. La combinación del teorema de entrelazamiento de niveles y la forma de la función espectral, permite determinar los elementos ya sea de uno u otro Hamiltoniano. Lo anterior muestra una diferencia en la forma de abordar el problema inverso, en nuestro caso el problema se acota al conocimiento de un solo espectro, que recae en la existencia de infinitas soluciones. Por lo tanto la determinación del espacio de soluciones se suma como una nueva contribución a lo existente en la literatura.

A continuación se desarrolla una metodología, con el propósito de clasificar todos aquellos sistemas isoespectrales en el espacio de acoplamientos de cualquier dimensión. Comenzando con la notación matemática, aquí se emplean unidades $\hbar = 1$, y se denota por $N + 1$ al número de sitios o bien el tamaño de los arreglos, se supone que cualquier estado $|\phi\rangle$ se puede escribir como una superposición de un conjunto completo de estados localizados (átomos) $|n\rangle$,

$$|\phi\rangle = \sum_{n=1}^{N+1} \phi_n |n\rangle. \quad (4.1)$$

Cada sitio de la red permite un estado localizado o función de onda evanescente $\langle x|n\rangle$ el cual puede ser descrito por las funciones conocidas como de Wannier [61, 62]. Los estados atómicos $|n\rangle$ pueden trasladarse a través del operador unitario de traslación T ,

$$T|n\rangle = |n - 1\rangle, \quad T^\dagger|n\rangle = |n + 1\rangle. \quad (4.2)$$

Notemos que los elementos de matriz del operador de traslación T se pueden obtener en términos de la base de sitios $\{|n\rangle\}$, esto es $\langle n|T|m\rangle = \delta_{n,m-1}$. También se define la observable \hat{N} asociada con la etiqueta del sitio n en la base discreta,

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \langle n|\hat{N}|m\rangle = n\delta_{n,m}. \quad (4.3)$$

Para una función F del operador \hat{N} y tomando en cuenta las anteriores definiciones se tiene,

$$F(\hat{N})|n\rangle = F(n)|n\rangle \equiv F_n|n\rangle, \quad F(\hat{N})T|n\rangle = F(\hat{N})|n-1\rangle. \quad (4.4)$$

En cadenas de sitios idénticos, con acoplamientos variables a primeros vecinos siempre se puede reescribir su correspondiente ecuación de Schrödinger independiente del tiempo como,

$$H|\phi\rangle_k = E_k|\phi_k\rangle = \left[F(\hat{N})T + T^\dagger F^\dagger(\hat{N}) \right] |\phi_k\rangle, \quad 1 \leq k \leq N+1, \quad (4.5)$$

de (A.2) se puede identificar que H es un Hamiltoniano de enlace fuerte con acoplamientos primeros vecinos, donde $F(\hat{N})$ representa el acoplamiento,

$$H = F(\hat{N})T + T^\dagger F^\dagger(\hat{N}). \quad (4.6)$$

Se debe tomar en cuenta que $F(\hat{N})$ contiene información de la variable de los acoplamientos, y por lo tanto $F(\hat{N})$ representan funciones reales, o bien acoplamientos que son exclusivamente reales y positivos, dependiendo de su ubicación en el arreglo. Se puede reescribir la ecuación de Schrödinger (A.2) en términos de la expansión $|\phi_k\rangle = \sum_{n=1}^{N+1} \phi_n^k |n\rangle$, obteniendo la siguiente ecuación de recurrencias,

$$\begin{aligned} H|\phi_k\rangle &= \sum_{n=1}^{N+1} \phi_n^k \left[F(\hat{N})T + T^\dagger F^\dagger(\hat{N}) \right] |n\rangle \\ &= \sum_{n=1}^{N+1} \phi_n^k [F(n-1)|n-1\rangle + F^*(n)|n+1\rangle] \\ &= \sum_{n=1}^{N+1} \left[\phi_{n+1}^k F(n) + \phi_{n-1}^k F^*(n-1) \right] |n\rangle \\ &= \sum_{n=1}^{N+1} \phi_n^k E^k |n\rangle, \end{aligned} \quad (4.7)$$

de esta manera, la ecuación de Schrödinger es equivalente a

$$E_k \phi_n^k = \phi_{n+1}^k F_n + \phi_{n-1}^k F_{n-1}^k, \quad 1 \leq k \leq N+1, \quad 1 \leq n \leq N+1, \quad (4.8)$$

aquí n y k son índices de sitio y de eigenvalor. Debido al hecho de que nuestros sistemas son finitos, se deben agregar algunas condiciones de frontera ficticias (condiciones de Dirichlet) en las relaciones anteriores,

$$\phi_0 = \phi_{N+2} = 0. \quad (4.9)$$

De la misma manera en los extremos de las cadenas, se agregan las condiciones de acoplamiento, es decir estos deberán desaparecer,

$$F_0 = F_{N+1} = 0. \quad (4.10)$$

Las anteriores restricciones, permiten establecer las condiciones que deberá satisfacer una cadena de sitios idénticos; de esta manera el bloque físico del sistema queda conformado por acoplamientos distintos de cero del operador $F(\hat{N})$. El interés se centra únicamente en cadenas completamente conectadas, por lo que se exige que $F_n \neq 0$ para $1 \leq n \leq N$, de otra manera se tendrían situaciones en las que dichas cadenas estarían segmentadas. Adicionalmente se debe mencionar que N puede ser arbitrariamente grande. De las consideraciones anteriores, emergen dos importantes proposiciones que son mencionadas a continuación. La primera de ellas,

Proposición 4.1.1. *Si $E_k \in \sigma(H)$, entonces $-E_k \in \sigma(H)$, es decir $\sigma(H)$ es simétrico alrededor del origen.*

Prueba. Para probar esto multiplicamos por $(-1)^{n+1}$ en ambos lados de (4.8) y definiendo $\psi_n^k = (-1)^n \phi_n^k$, se obtiene

$$-E_k \psi_n^k = \psi_{n+1}^k F_n + \psi_{n-1}^k F_{n-1}^k, \quad 1 \leq k \leq N+1, \quad 1 \leq n \leq N+1. \quad (4.11)$$

Lo que implica que $|\psi_k\rangle = \sum_n \psi_n^k |n\rangle$ es un eigenestado de H con eigenvalor $-E_k$. \square

Como un simple corolario se tiene,

Corolario 4.1.1.1. *Para N par, $0 \in \sigma(H)$.*

Es decir, que al menos una E_k debería desaparecer $E_k = 0$. Otro resultado interesante aquí deriva de la naturaleza de las funciones de onda en conexión con los acoplamientos. Sea \tilde{H} otro Hamiltoniano de amarre fuerte definido como,

Proposición 4.1.2. *Sea $\tilde{H} = \tilde{F}(\hat{N})T + T^\dagger \tilde{F}^\dagger(\hat{N}) = |F(\hat{N})|T + T^\dagger |F^\dagger(\hat{N})|$, con $|F(\hat{N})||n\rangle \equiv |F_n||n\rangle$. Entonces $\sigma(H) = \sigma(\tilde{H})$.*

Prueba. La prueba está dada a través de una simple transformación de norma, es decir F_n se permite que sea complejo. Esto es,

$$F_n = e^{i\delta} |F_n|, \quad \Delta_n \equiv \sum_{j=1}^{n-1} \delta_j, \quad (4.12)$$

multiplicamos a ambos lados de (4.8) por $e^{i\Delta_n}$

$$E_k(e^{i\Delta_n} \phi_n^k) = F_n(e^{i\Delta_{n+1}} \phi_{n+1}^k) + F_{n-1}^*(e^{i\Delta_{n-1}} \phi_{n-1}^k), \quad (4.13)$$

de esta relación notamos que el nuevo estado

$$|\psi_k\rangle \equiv \sum_{n=1}^{N+1} e^{i\Delta_n} \phi_n^k |n\rangle, \quad (4.14)$$

para un Hamiltoniano \tilde{H} con energía E_k . \square

Las anteriores proposiciones, nos permiten trabajar con acoplamientos F_n reales y positivos. Sin embargo, siempre es necesario evitar que en los sistemas se formen lazos o *loops*, para evitar la aparición de fases no deseadas, producidas por los campos magnéticos que se generarían (corrientes persistentes en lazos). En resumen, el problema inverso que se afronta, deberá de cumplir con los siguientes puntos:

- Tener un espectro $\sigma(H)$ arbitrario pero simétrico.
- Un conjunto de acoplamientos F_n reales.
- Un arreglo arbitrario, pero finito $(N + 1)$.

4.1.1. Las múltiples soluciones del problema inverso con acoplamientos variables

En la solución del problema inverso, aplicado a cadenas lineales de sitios idénticos, es necesario obtener una clasificación de todos aquellos Hamiltonianos que poseen un mismo espectro. En esta sección se determinará el espacio \mathcal{S} para todos los posibles Hamiltonianos de enlace fuerte, y que siguen los requerimientos de las secciones previas. Observaremos que esos espacios se caracterizan por órbitas generadas por operadores lineales, que además no cubren el espacio completo de matrices unitarias $(N + 1) \times (N + 1)$, $\mathcal{U}(N + 1)$ debido a la restricción de vecinos cercanos. Veremos que la transformación de norma definida en

(4.14) no son más que una parte trivial de \mathcal{S} . Para un entero positivo n , $\mathcal{U}(n)$ es el grupo de matrices unitarias $n \times n$, definiendo así la clase de equivalencia de H bajo operaciones unitarias como $U_H = \{UHU^\dagger | U \in \mathcal{U}(n)\}$. Por otro lado, para un espectro fijo se tiene la clase de equivalencia de H dentro de los modelos de primeros vecinos denotada por \mathcal{S}_H que satisface

$$[U_H(1)]^{N+1} \subset \mathcal{S}_H \subset U_H(N+1), \quad (4.15)$$

de donde las contenciones son propias, excepto para $N = 0$ o acoplamientos nulos.

Para hacer la clasificación de todos los Hamiltonianos \tilde{H} que son isoespectrales a H se introducen dos operadores auxiliares $A(\hat{N})$ y X de donde $A(\hat{N})$ contiene la información de los acoplamientos F y X conecta con todos los Hamiltonianos isoespectrales de una cadena homogénea, ver el diagrama fig. 4.1, por lo tanto se requiere conocer el Hamiltoniano de enlace fuerte H en términos de los operadores lineales $A(\hat{N})$. Aquí el operador $A(\hat{N})$ representa una matriz con elementos únicamente en la diagonal,

$$A(\hat{N}) \doteq \begin{pmatrix} A_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & A_{N+1} \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

los Hamiltonianos H y \tilde{H} se pueden escribir en términos de los operadores $A(\hat{N})$ y $\tilde{A}(\hat{N})$ como sigue,

$$H = A(\hat{N})H_0A^\dagger(\hat{N}), \quad \tilde{H} = \tilde{A}(\hat{N})H_0\tilde{A}^\dagger(\hat{N}), \quad H_0 = T + T^\dagger, \quad (4.17)$$

donde H_0^1 representa el Hamiltoniano de una cadena localmente periódica.

Ahora se determinarán las condiciones para el conjunto de acoplamientos pertenecientes a un mismo espectro de energías $\sigma(H)$ y para un cierto H , es decir todas las funciones $F(\hat{N})$ y para ello reescribimos H definido en (4.17) como sigue,

$$A(\hat{N})H_0A^\dagger(\hat{N}) = A(\hat{N})A^\dagger(\hat{N}+1)T + T^\dagger A(\hat{N}+1)A^\dagger(\hat{N}), \quad (4.18)$$

notemos que

$$TA^\dagger(\hat{N}) = A^\dagger(\hat{N}+1)T, \quad (4.19)$$

¹Nos referimos a cadenas finitas de estructura homogénea como cadenas localmente periódicas

se puede identificar de (4.18) los acoplamientos en términos del operador $A(\hat{N})$,

$$F(\hat{N}) = A(\hat{N})A^\dagger(\hat{N} + 1), \quad F^\dagger(\hat{N}) = A(\hat{N} + 1)A^\dagger(\hat{N}), \quad (4.20)$$

de manera que los acoplamientos pueden ser obtenidos por transformaciones laterales actuando sobre un Hamiltoniano de cadena homogénea H_0 . Por otro lado de la expresión (4.20) es posible obtener los elementos de $A(\hat{N})$ en términos de los acoplamientos a través de la siguiente relación recurrencia,

$$F_n = A_n A_{n+1}^*, \quad (4.21)$$

donde $A(\hat{N})|n\rangle = A_n|n\rangle$. En forma polar se pueden expresar en la manera $A_n \equiv |A_n|e^{ia_n}$, $F_n \equiv |F_n|e^{if_n}$

$$|F_n| = |A_n||A_{n+1}|, \quad f_n = a_n - a_{n+1}. \quad (4.22)$$

Las soluciones son

$$a_n = \sum_{j=0}^{n-1} f_j, \quad f_0 \in \mathfrak{R}. \quad (4.23)$$

Debido a que los acoplamientos de H son siempre reales y positivos la recurrencia se puede escribir en términos de F_n como sigue,

$$A_{n+1} = \frac{F_n F_{n-2} F_{n-4} \dots}{F_{n-1} F_{n-3} \dots}, \quad (4.24)$$

o bien,

$$A_{n+1} = \begin{cases} \frac{\prod_{k=0} F_{n-2k-1} A_1}{\prod_{k=0} F_{n-2k}}, & \text{si } n \text{ par, con } 1 \leq n \leq N, \quad A_1 \in \mathfrak{R} \setminus \{0\} \\ \frac{\prod_{k=0} F_{n-2k}}{\prod_{k=0} F_{n-2k-1} A_1}, & \text{si } n \text{ impar.} \end{cases}$$

De esta forma siempre podemos construir operadores $A(\hat{N})$ conociendo los acoplamientos de H de enlace fuerte. Una vez que se ha determinado el operador $A(\hat{N})$ para una F dada, también se puede obtener su inversa, tomando en cuenta la restricción en el bloque físico, es decir la condición de invertibilidad de $A(\hat{N})$ en el subespacio de la cadena,

$$A^{-1}(\hat{N})A(\hat{N}) = A(\hat{N})A^{-1}(\hat{N}) = \mathbf{1}_{N+1}, \quad (4.25)$$

donde $\mathbf{1}_{N+1}$ es la matriz identidad $(N+1) \times (N+1)$.

Ahora se encontrará una forma de generar de manera continua la clase de equivalencia de un Hamiltoniano dado. Supongamos que para cierto \tilde{H} tenemos $\sigma(H) = \sigma(\tilde{H})$, entonces deberá existir una matriz unitaria U que conecta H y \tilde{H} . Debemos determinar U tal que

$$H = A(\hat{N})H_0A(\hat{N}) = U\tilde{H}U^\dagger = U\tilde{A}(\hat{N})H_0\tilde{A}(\hat{N})U^\dagger, \quad (4.26)$$

para arreglos finitos se puede usar el proyector $\mathbf{1}_{(N+1)\times(N+1)}$ y 0 fuera del espacio de la cadena entonces:

$$A(\hat{N}) = PA(\hat{N}) = A(\hat{N})P, \quad \text{con } P = P^\dagger = P^2, \quad (4.27)$$

similarmente para $\tilde{A}(\hat{N})$, por lo tanto,

$$A(\hat{N})H_0A(\hat{N}) = A(\hat{N})PH_0PA(\hat{N}), \quad (4.28)$$

despejando se obtiene,

$$PH_0P = A^{-1}(\hat{N})U\tilde{A}(\hat{N})(PH_0P)\tilde{A}(\hat{N})U^\dagger A^{-1}(\hat{N}), \quad (4.29)$$

la expresión anterior se puede escribir en la siguiente manera,

$$PH_0P = X(PH_0P)X^\dagger, \quad X \equiv A^{-1}(\hat{N})U\tilde{A}(\hat{N}), \quad X^\dagger = A(\hat{N})U^\dagger(A^\dagger(\hat{N}))^{-1}, \quad (4.30)$$

de esta manera X deja invariante el Hamiltoniano localmente periódico PH_0P . Debemos notar que la matriz X podría ser no unitaria, ya que el espacio de soluciones esta más allá del conjunto de todas las simetrías de cadenas periódicas por lo que la validez de (4.30) esta limitada al bloque físico de dimensiones $N + 1$. En lo siguiente se determinarán todas las matrices sujetas a (4.30), será suficiente con analizar cadenas localmente periódicas.

La matriz X

Para hallar la matriz X , vamos a calcular los elementos de matriz a partir de nuestros operadores en las eigenbases de $P(T + T^\dagger)P$, empleando estados $|k\rangle$, es decir se emplea la base $\{|k\rangle\}$ de cadena finita homogénea,

$$|k\rangle = \sum_n e^{ikn}|n\rangle = \sum_n \langle n|k\rangle|n\rangle, \quad k = 1, \dots, N + 1, \quad (4.31)$$

donde $|k\rangle$ son eigenestados de H_0 con funciones de onda $\langle n|k\rangle$ y eigenvalores E_k de H_0 conocidas (de hecho $\langle n|k\rangle$ está relacionado con el kernel de Dirichlet), de donde k es el

vector de onda. Es importante mencionar que en cadenas infinitas, estos estados representan ondas de Bloch $|k\rangle$ lo cuales están definidos, como la suma dos ondas de paridad opuesta

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (|k\rangle \pm i|k+1\rangle) = |\kappa^\pm\rangle, \quad (4.32)$$

de modo que el dominio de κ es

$$\kappa = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{(k - \frac{N+1}{2})\pi}{N}, \quad \kappa \in [-\pi, \pi], \quad (4.33)$$

de donde

$$\langle n|\kappa\rangle = \mathcal{N}e^{\pm i\kappa n}, \quad -\infty < n < \infty, \quad (4.34)$$

aquí \mathcal{N} es el factor de normalización.

Por otro lado los eigenestados $|k\rangle$ están determinados hasta por una fase que puede depender del número cuántico $\alpha(k)$. Por ello, la matriz X debe ser diagonal en la base $\{|k\rangle\}$ ver (4.30) y contener fases dependientes de k . Se tiene la siguiente expansión

$$X = \sum_k |k\rangle\langle k| e^{i\alpha(k)}. \quad (4.35)$$

Los elementos de matriz de X en la base combinada son

$$\langle n|X|k\rangle = \langle n|k\rangle e^{i\alpha(k)}, \quad (4.36)$$

donde $\alpha(k)$ representa el parámetro libre² que genera todos los posibles \tilde{H} que son isoenergéticos a H . Ahora se expresa el Hamiltoniano libre H_0 en una base combinada de $|k\rangle$ como sigue,

$$\langle k|X(H_0)X^\dagger|k'\rangle = \sum_{n,m} \langle k|X|m\rangle \langle m|P(H_0)P|n\rangle \langle n|X^\dagger|k'\rangle = E_k \delta_{k,k'}. \quad (4.37)$$

De la expresión (4.37) se puede ver que la matriz X se puede escribir en términos de la base combinada $X_{k;m} = \langle k|X|m\rangle$ lo que constituye una matriz que diagonaliza H_0 . Esto deja la posibilidad de que X sea unitaria, pero algo más general a escoger son $[X, P(T + T^\dagger)P] = 0$ y $(XX^\dagger - 1)P(T + T^\dagger)P = 0$, obteniendo

$$XX^\dagger = 1 + P_0, \quad P_0(T + T^\dagger) = (T + T^\dagger)P_0 = 0, \quad (4.38)$$

²En el límite $N \rightarrow \infty$ esas fases están conectadas a problemas donde las funciones de Wannier son más localizadas. En arreglos lineales este problema ha sido resuelto.

que es más general que una condición de unitariedad. Notemos que el proyector P_0 actuando sobre el espacio nulo H_0 existe cuando N es par, dejando $N + 1$ impar y al menos un eigenvalor debería desaparecer³. Para el propósito que se busca (N general), escoger (4.36) es razonable, puesto que contiene el número suficiente de parámetros $\alpha(1), \dots, \alpha(N + 1)$. Por otro lado de (4.30) se tiene la condición $U = \tilde{A}(\hat{N})XA^{-1}(\hat{N})$ con U unitaria. Esto implica las siguientes reestricciones

$$(A^{-1})^\dagger X^\dagger \tilde{A}^\dagger \tilde{A} X A^{-1} = U^\dagger U = \mathbf{1}_{N+1}, \quad X X^\dagger = \mathbf{1}_{N+1}, \quad (4.39)$$

además,

$$A^\dagger A = X^\dagger \tilde{A}^\dagger \tilde{A} X. \quad (4.40)$$

Podemos notar que dada la matriz $A^\dagger(\hat{N})A(\hat{N})$, es posible construir todas las posibles $\tilde{A}^\dagger(\hat{N})\tilde{A}(\hat{N})$ escogiendo una matriz específica X que a su vez equivale a escoger las fases $\alpha(k)$. Sin embargo, (4.40) se restringe sólo a posibles operadores X que pueden ser seleccionados como se mostrará en lo siguiente. Es importante notar que si H y \tilde{H} son isoespectrales en efecto $A(\hat{N})$ y $\tilde{A}(\hat{N})$ satisface (4.40). Por otra parte no es verdad que para otro par $A(\hat{N})$ y $\tilde{A}(\hat{N})$ escogidas arbitrariamente tengan que estar relacionadas por dicha ecuación, es decir no existe una matriz X que las relacione como en la forma (4.40) por esta razón deben existir ciertas restricciones que la matriz X puede tomar, lo cual se reduce a una restricción de sus fases α 's.

Cuando calculamos los elementos de matriz en ambos lados de (4.40) con la base combinada se tiene,

$$\begin{aligned} |A_n|^2 \delta_{n,n'} &= \sum_{m,m',k,k'} \langle n|X|k\rangle \langle k|m\rangle \langle m|\tilde{A}^\dagger \tilde{A}|m'\rangle \langle m'|k'\rangle \langle k'|X^\dagger|n'\rangle \\ &= \sum_{m,k,k'} e^{i[\alpha(k) - \alpha(k')]} \langle n|k\rangle \langle k|m\rangle \langle m|k'\rangle \langle k'|n'\rangle |\tilde{A}_m|^2. \end{aligned} \quad (4.41)$$

La diagonal de (4.41) representa las órbitas de un vector con componentes $|\tilde{A}_m|^2$, $m = 1, \dots, N + 1$ bajo la acción de un operador que depende de los parámetros $\alpha(k)$. Por otro lado, los elementos fuera de la diagonal restringen las posibles α 's como función de $\tilde{A}(\hat{N})$ de manera que sólo algunos pares de $A(\hat{N})$, $\tilde{A}(\hat{N})$ pueden estar relacionados de acuerdo a la restricción

$$\sum_{k,k',m} \text{sen}(\alpha(k') - \alpha(k)) \langle n|k\rangle \langle k|m\rangle \langle m|k'\rangle \langle k'|n'\rangle |\tilde{A}_m|^2 = 0, \quad (4.42)$$

³ P_0 deberá ser un ket bra con eigenvalor cero de T y T^\dagger del estado de cero energía en una cadena periódica.

que, debido a la condición de acoplamiento reales representa la parte imaginaria de (4.41) la cual se anula. Aislado los factores de fase en (4.41) y expresándolos en términos de $A(\hat{N})$ y $\tilde{A}(\hat{N})$, se tiene

$$e^{i[\alpha(k)-\alpha(k')]} = \frac{\sum_n |A_n|^2 \langle k|n\rangle \langle n|k'\rangle}{\sum_m |\tilde{A}_m|^2 \langle k|m\rangle \langle m|k'\rangle}. \quad (4.43)$$

que establece otra restricción sobre $A(\hat{N})$ y $\tilde{A}(\hat{N})$ en la forma

$$\left| \sum_n |A_n|^2 \langle k|n\rangle \langle n|k'\rangle \right|^2 = \left| \sum_m |\tilde{A}_m|^2 \langle k|m\rangle \langle m|k'\rangle \right|^2. \quad (4.44)$$

También ocurre que, de acuerdo con (4.43), la parte imaginaria debe desaparecer porque su lado derecho es real. Por tanto para cada $\alpha(k)$ debe existir k' tal que $\alpha(k) = -\alpha(k')$ reduciendo el número de parámetros a la mitad $(N+1)/2$. Además de estas restricciones es posible extraer otras partiendo directamente de $X = \tilde{A}^{-1}UA$. En particular $|\det(X)|^2 = 1$ es decir $|\det(A)| = |\det(\tilde{A})|$ ver diagrama fig. 4.1. Se obtiene

$$\prod_{n=1}^{N+1} |\tilde{A}_n|^2 = \prod_{n=1}^{N+1} |A_n|^2. \quad (4.45)$$

Un gran número de restricciones adicionales pueden derivarse de (4.43). A través de los cálculos anteriores, hemos determinado las órbitas en el espacio de matrices que conectan todos los modelos isoespectrales, caracterizando así $\mathcal{S}(H)$. Este gran número de restricciones puede derivarse de (4.43); para expresarlos más transparentemente en términos de los acoplamientos, analizaremos la ecuación secular $\det(E - \tilde{H}) = 0$, $\det(E - H) = 0$ en la siguiente sección. Vamos a concluir esta sección resumiendo que el problema general de isoespectralidad en Hamiltonianos de amarre fuerte con sitios idénticos puede reducirse al problema isoespectral de cadenas que son localmente periódicas por medio de una serie de transformaciones representadas por medio de la matriz X . Entonces, variando X se pueden obtener todas las posibles órbitas de una matriz $A^\dagger A$ por medio de la relación de equivalencia $XA^\dagger AX^\dagger = \tilde{A}^\dagger \tilde{A} \equiv A^\dagger A[\alpha]$, es decir, se trata de una funcional de α . El paso final consiste en una reconstrucción de F usando una vez más $F_n = |A_n||A_{n+1}|$, donde las fases adicionales son irrelevantes debido a (4.13). En la generación de nuevos acoplamientos \tilde{F}_n interviene únicamente la variación de todas las posibles α 's. Nuestro procedimiento se muestra en el diagrama fig. 4.1.

$$\begin{array}{ccc}
A(N) & \xleftarrow{A^\dagger A = X \tilde{A}^\dagger \tilde{A} X^\dagger} & \tilde{A}(N) \\
\downarrow F_n = A_n A_{n+1}^* & & \uparrow \text{Fórmula (4.24)} \\
F(N), H & \xrightarrow{\tilde{H} = U H U^\dagger} & \tilde{F}(N), \tilde{H}
\end{array}$$

Figura 4.1: Diagrama de los mapas entre Hamiltonianos tridiagonales isoespectrales (fila de abajo) y su caracterización en términos del operador X (fila superior).

4.2. Soluciones exactas para cadenas cortas

Una manera simple de estudiar el problema inverso es a través de sistemas de cadenas cortas (cadenas finitas con pocos sitios), empleando el acoplamiento a primeros vecinos F . El operador Hamiltoniano en (4.6) se escribe como sigue,

$$H = E_0 + \sum_{n=1}^{N-1} F_n \{|n\rangle\langle n+1| + h.c.\}, \quad (4.46)$$

donde E_0 es la energía en sitio. Se observa que las constantes de acoplamiento corresponden a elementos de matriz que pertenecen a las diagonales secundarias; esto puede verse de la siguiente forma en una base $\{|m\rangle\}$ de sitios,

$$\langle m|H|m'\rangle = E_n \delta_{m,m'} + F \delta_{m,m'+1} + F \delta_{m+1,m'}. \quad (4.47)$$

El abordar este problema donde la dimensionalidad de los sistemas es baja, permite obtener las restricciones asociadas analíticamente y adicionalmente ilustrar de manera sencilla la multiplicidad de las soluciones para la descripción de nuestro problema inverso.

En esta sección se estudia la isoespectralidad (i.e. sistemas que poseen un mismo espectro de energías) en cadenas unidimensionales con 3, 4 y 5 sitios acoplados. Para cada caso se obtiene el dominio donde las cadenas son isoespectrales, en el espacio de acoplamientos F 's. En cada caso la dimensión de los parámetros libres es $N + 1$. Por comodidad restamos la energía en sitio, ya que es proporcional a la identidad. Trabajaremos así con el operador $H - E_0$, la ecuación secular es

$$\det [H - (E_0 - \lambda)] = 0, \quad (4.48)$$

4.2.1. Dominio de sistemas isoespectrales en cadenas de tres sitios

En cadenas de tres sitios $N + 1 = 3$ o bien tres esquinas idénticas y dos acoplamientos, en este caso F_1 y F_2 . El polinomio característico de 4.48 es,

$$\det(H - (E_0 - \lambda)) = \lambda(\lambda^2 - F_1^2 - F_2^2) = 0, \quad (4.49)$$

y su espectro de energías $\sigma(H)$ en términos de los acoplamientos F_1 y F_2 está dado por,

$$\sigma(H) = \{-\sqrt{F_1^2 + F_2^2}, 0, \sqrt{F_1^2 + F_2^2}\}, \quad (4.50)$$

de donde hemos definido $E_0 = -E_2$, $E_1 = 0$, es decir el espectro de energías es simétrico alrededor de 0. El dominio de los sistemas que son isoespectrales con dos acoplamientos es,

$$F_1^2 + F_2^2 = \text{cte.} \quad (4.51)$$

Es importante notar que el espacio de soluciones en cadenas de tres sitios, arroja una familia completa de sistemas que tienen un mismo espectro. En la fig. 4.2 se muestra el dominio en

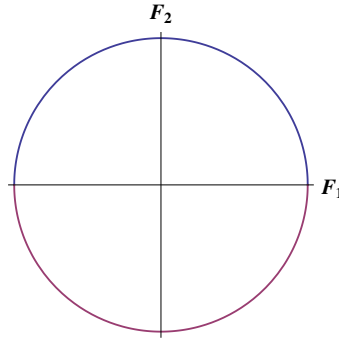


Figura 4.2: Se muestra el espacio de acoplamientos F_1 y F_2 que representan cadenas isoespectrales de tres sitios.

cadenas de tres sitios.

4.2.2. Dominio de sistemas isoespectrales en cadenas de cuatro sitios

En cadenas de cuatro sitios o bien cuatro esquinas idénticas y tres acoplamientos, F_1 , F_2 y F_3 , el polinomio característico de (4.48) es

$$\det(H - (E_0 - \lambda)) = \lambda^4 - \lambda^2(F_1^2 + F_2^2 + F_3^2) + F_1^2 F_3^2 = 0, \quad (4.52)$$

y el polinomio característico en términos de las energías, se obtienen mediante un producto de la siguiente forma,

$$\prod_{n=0}^3 (\lambda - E_n) = \lambda^4 - \lambda^2(E_0^2 + E_1^2) + E_0^2 E_1^2 = 0, \quad (4.53)$$

aquí se considera el siguiente espectro de energías $\sigma(H)$,

$$\sigma(H) = \{-E_1, -E_0, +E_0, +E_1\}, \quad (4.54)$$

igualando los coeficientes de las expresiones (4.52) y (4.53) se encuentran las siguientes restricciones,

$$F_1^2 + F_2^2 + F_3^2 = E_0^2 + E_1^2, \quad (4.55)$$

$$F_1^2 F_3^2 = E_0^2 E_1^2. \quad (4.56)$$

El dominio de cadenas de cuatro sitios que son isoespectrales es motrado en la fig. 4.3. En el espacio de los acoplamientos, dicho dominio puede verse como la intersección de una esfera descrita por (4.55) con el cilindro hiperbólico de (4.56)

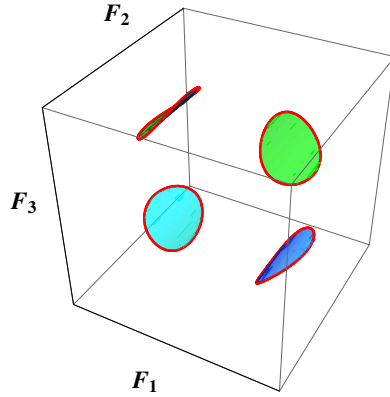


Figura 4.3: En la figura se muestra en contorno rojo la intersección de una esfera con una hipérbola, esto representa el dominio de las soluciones sobre la cual los sistemas los sistemas son isoespectrales.

4.2.3. Dominio de sistemas isoespectrales en cadenas de cinco sitios

En cadenas unidimensionales de cinco sitios o bien de cinco esquinas idénticas y cuatro acoplamientos F_1, F_2, F_3 y F_4 , se obtiene el correspondiente polinomio característico de (4.48),

$$\det(H - (E_0 - \lambda)) = \lambda^5 - \lambda^3(F_1^2 + F_2^2 + F_3^2 + F_4^2) + \lambda(F_1^2 F_3^2 + F_1^2 F_4^2 + F_2^2 F_4^2) = 0, \quad (4.57)$$

el polinomio característico en términos de las energías, es mediante un producto de la siguiente forma,

$$\prod_{n=0}^4 (\lambda - E_n) = \lambda^5 - \lambda^3(E_1^2 + E_2^2) + \lambda(E_1^2 E_2^2) = 0, \quad (4.58)$$

donde se ha considerado un espectro de energías $\sigma(H)$ como sigue,

$$\sigma(H) = \{-E_2, -E_1, -E_0, E_1, E_2\}, \quad (4.59)$$

igualando los coeficientes en λ en las ecs. (4.57) y (4.58) se obtienen las siguientes dos ecuaciones que relacionan acoplamientos F 's y energías E 's,

$$F_1^2 + F_2^2 + F_3^2 + F_4^2 = E_1^2 + E_2^2, \quad (4.60)$$

$$F_1^2 F_3^2 + F_1^2 F_4^2 + F_2^2 F_4^2 = E_1^2 E_2^2. \quad (4.61)$$

$$0 < F_4 < \sqrt{E_1^2 + E_2^2} \quad (4.62)$$

En la fig. 4.4 se muestra la intersección de las superficies de las ecs. (4.57) y (4.57) donde

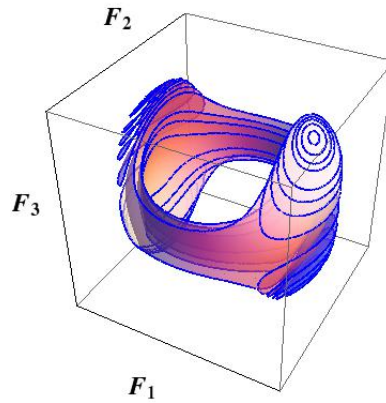


Figura 4.4: En la figura se muestra la intersección de una esfera con una hipérbola lo que muestra el dominio de las soluciones (caso de cuatro dimensiones). Notemos que en cada superficie se ha fijado el parámetro F_4 obteniendo el dominio de los acoplamientos F en 4 dimensiones, de esta manera se obtiene isospectralidad en cada contorno de las superficies.

se ha parametrizado el acoplamiento F_4 de acuerdo a (4.62), obteniendo de la intersección, el espacio de acoplamientos, donde cadenas con cinco sitios son isospectrales.

4.3. Ecuaciones algebraicas de acoplamientos y energías

En la sección anterior, se obtuvo el dominio en el espacio de acoplamientos, en cadenas cortas de baja dimensionalidad con $N + 1 = 3, 4, 5$ sitios. Se encontró que la intersección de las ecuaciones de restricción obtenidas en estos sistemas, proporcionan el dominio para un espectro de energías dado $\sigma(H)$ y la solución no es única, es decir se obtiene que existe toda una familia de sistemas que poseen el mismo espectro de energías. En este mismo orden de ideas, la obtención del dominio de cadenas de muchos sitios, pueden llegar a ser una tarea difícil de realizar; sin embargo, es posible encontrar su solución aunque de forma abstracta, ya que una descripción gráfica del dominio en el espacio de acoplamientos F_n , en cadenas lineales de más de seis sitios ya no es práctica, es por esto que es necesario obtener una descripción analítica del dominio para cadenas cuya dimensionalidad sea mayor a seis sitios. En esta sección se obtendrán las ecuaciones algebraicas que relacionan acoplamientos $\{F_n\}_{n=1}^N$ como variables, en términos de energías $\sigma(H) = \{E_k\}_{k=1}^{N+1}$. El procedimiento a seguir, es análogo al visto en cadenas de pocos sitios, y es deseable construir un algoritmo que permita generar cada uno de los coeficientes de un polinomio característico, más adelante veremos que esto se puede lograr por medio de una recurrencia de orden dos. Para una cadena de $N + 1$ sitios, se comienza de la definición de ecuación secular. Del Hamiltoniano de enlace fuerte H (4.48),

$$\Phi_N(\lambda) = \det(H - (E_0 - \lambda)) = 0, \quad (4.63)$$

de esta ecuación secular se obtiene su correspondiente polinomio característico $\Phi_N(\lambda)$, cuya recurrencia se obtiene desarrollando por menores comenzando desde abajo en (4.63),

$$\Phi_N(\lambda) = \lambda\Phi_{N-1}(\lambda) - F_N^2\Phi_{N-2}(\lambda). \quad (4.64)$$

Se puede observar que la (4.64) representa una recurrencia de orden 2 en el tamaño del sistema para los polinomios Φ 's, y que contiene además la información de los acoplamientos F 's. Otra forma de escribir (constantes de acoplamiento), también otra forma de escribir el polinomio característico es a través de la siguiente expansión,

$$\Phi_N(\lambda) = \sum_{j=0}^{N+1} \Lambda_N^j \lambda^j, \quad (4.65)$$

por lo que nos enfocaremos en encontrar los coeficientes Λ_N^j . Como hemos visto anteriormente, de estos dependen las ecuaciones de restricción que necesitamos. Para resolver la

recurrencia necesitamos las siguientes condiciones iniciales,

$$\Phi_0(\lambda) = \lambda, \quad \Phi_1(\lambda) = \lambda^2 - F_1^2. \quad (4.66)$$

La recurrencia, en términos de coeficientes de expansión, adquiere la siguiente forma

$$\sum_{j=0}^{N+1} \Lambda_N^j \lambda^j = \sum_{j=0}^N \Lambda_{N-1}^j \lambda^{j+1} - F_N^2 \sum_{j=0}^{N-1} \Lambda_{N-2}^j \lambda^j, \quad (4.67)$$

o bien reescribiendo (4.67),

$$\sum_{j=0}^{N+1} \Lambda_N^j \lambda^j = \sum_{j=1}^{N+1} \Lambda_{N-1}^{j-1} \lambda^j - F_N^2 \sum_{j=0}^{N-1} \Lambda_{N-2}^j \lambda^j, \quad (4.68)$$

agrupando coeficientes en cada potencia,

$$\Lambda_N^j = \Lambda_{N-1}^{j-1} - F_N^2 \Lambda_{N-2}^j, \quad 2 \leq N \leq \infty, \quad 1 \leq j \leq N-1. \quad (4.69)$$

La ecuación (4.69) representa una doble recurrencia de tamaño N y orden j . Para resolver la recurrencia en dos variables, hay que especificar las fronteras de la red (N, j) . El índice j está limitado por $N+1$, implicando que el primer coeficiente $\Lambda_N^{N+1} = 1$ representa al polinomio mónico. Cuando fijamos $j=0$ se obtiene la condición de frontera inferior, y se encuentra que $\Lambda_{N-1}^{-1} = 0$. Notamos que este coeficiente se encuentra fuera de las fronteras en la fig. 4.5, de modo que este término se anula. Partiendo de (4.69) se obtiene

$$\Lambda_N^0 = -F_N^2 \Lambda_{N-2}^0. \quad (4.70)$$

Cuando $j=1$ la (4.69) toma la siguiente forma,

$$\Lambda_N^1 = \Lambda_{N-1}^0 - F_N^2 \Lambda_{N-2}^1. \quad (4.71)$$

Cuando $j=N$ la (4.69) toma la siguiente forma,

$$\Lambda_N^N = \Lambda_{N-1}^{N-1}. \quad (4.72)$$

Notemos que $\Lambda_{N-1}^{-1} = 0$, por lo que haciendo $j=0$ en (4.69) arroja una subrecurrencia de orden 2 que es trivial de resolver:

$$\Lambda_N^0 = -F_N^2 (-F_{N-2}^2 (-F_{N-4}^2 \dots (-F_1^2) \dots)). \quad (4.73)$$

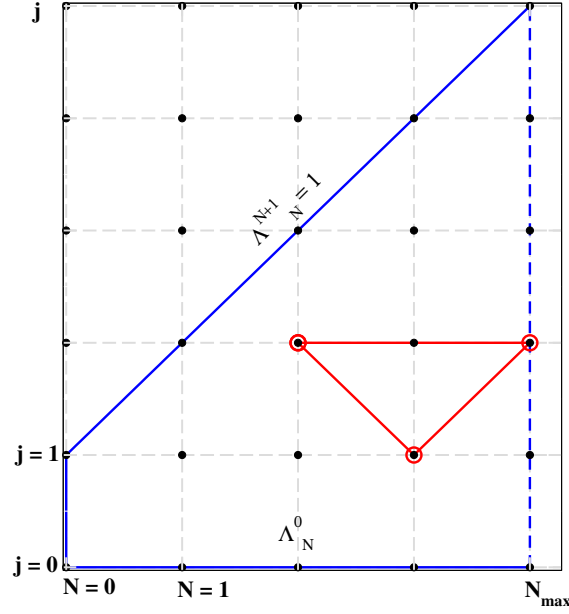


Figura 4.5: En la figura mostramos el espacio (j, N) donde se encuentra el dominio de las recurrencias Λ_N^j . En color rojo se muestra la relación para el coeficiente $\Lambda_{N=4}^{j=2}$.

Finalmente, cuando N y j tienen la misma paridad derivamos la siguiente condición,

$$\Lambda_N^0 = \begin{cases} 0, & \text{para } N \text{ par} \\ (-1)^{\frac{N-1}{2}} \prod_{k=1}^{\frac{N-1}{2}} F_{N-2k}^2, & \text{para } N \text{ impar} \end{cases}$$

Es importante mencionar que cuando $N = N_{\text{máx}}$ en la fig. 4.5 no se tiene una condición de frontera, sino el mero hecho de que $N_{\text{máx}}$ siempre está fijo durante el proceso. La recurrencia puede resolverse para una N fija pero arbitraria. Se puede tomar ventaja de que la (4.69) es de orden 1 en j ; sin embargo, resolver (4.69) consiste en realizar una serie de iteraciones Λ_{N-2}^j en términos de Λ_{N-3}^j , Λ_{N-4}^j y los anteriores términos de Λ_{N-5}^j y así sucesivamente como se muestra a continuación.

Dependiendo de la paridad de N se tiene lo siguiente,

$$\Lambda_N^1 = \Lambda_{N-1}^0 - F_N^2 \Lambda_{N-2}^1 \quad (4.74)$$

o bien

$$\Lambda_N^1 = \begin{cases} 0, & \text{para } N \text{ impar} \\ (-1)^{\frac{N}{2}} \prod_{k=0}^{(N-2)/2} F_{(N-1)-2k}^2 - F_n^2 \Lambda_{N-2}^1, & \text{para } N \text{ par} \end{cases}$$

desarrollando para N par,

$$\Lambda_N^1 = (-1)^{N/2} \prod_{k=0}^{\frac{N-2}{2}} F_{(N-1)-2k}^2 - F_N^2 (-1)^{\frac{N-2}{2}} \prod_{k=0}^{\frac{N-4}{2}} F_{N-3-2k}^2 + F_N^2 F_{N-2}^2 \Lambda_{N-4}^1, \quad (4.75)$$

y reescribiendo esta última expresión

$$\Lambda_N^1 = \sum_{n=0}^{\frac{N-4}{2}} \left[(-1)^n \prod_{l=0}^{n-1} F_{N-2l}^2 \right] (-1)^{\frac{N-2n}{2}} \prod_{k=0}^{\frac{N-2-2n}{2}} F_{n-1-2n-2k}^2, \quad (4.76)$$

de donde $N - 2l = N - 2n - 2 = 2$, por lo tanto el valor máximo del índice es $n = (N - 4)/2$.

Para el caso en el que N y j tienen paridad opuesta,

$$\Lambda_N^j = \Lambda_{N-1}^{j-1} - F_N^2 \Lambda_{N-2}^j, \quad (4.77)$$

de donde el último término se puede reescribir como sigue,

$$\Lambda_{N-2}^j = \Lambda_{N-3}^{j-1} - F_{N-2}^2 \Lambda_{N-4}^j \quad (4.78)$$

insertando esto en la (4.77),

$$\Lambda_N^j = \Lambda_{N-1}^{j-1} - F_N^2 \Lambda_{N-3}^{j-1} + F_N^2 F_{N-2}^2 \Lambda_{N-4}^j, \quad (4.79)$$

y como antes, notemos que el último término coeficiente Λ_{N-4}^j se puede escribir como sigue,

$$\Lambda_{N-4}^j = \Lambda_{N-5}^{j-1} - F_{N-4}^2 \Lambda_{N-6}^j. \quad (4.80)$$

Reescribiendo (4.79)

$$\Lambda_N^j = \Lambda_{N-1}^{j-1} - F_N^2 \Lambda_{N-3}^{j-1} + F_N^2 F_{N-2}^2 \Lambda_{N-5}^{j-1} - F_N^2 F_{N-2}^2 F_{N-4}^2 \Lambda_{N-6}^j, \quad (4.81)$$

y continuando con este proceso iterativo obtenemos la recurrencia de orden 1 en j como sigue,

$$\Lambda_N^j = \sum_{n=0}^{\frac{N-j+1}{2}} (-1)^n \Lambda_{N-2n-1}^{j-1} \prod_{l=0}^{n-1} F_{N-2l}^2. \quad (4.82)$$

Notemos que $j - 2 = n - 2n - 1$, y el coeficiente Λ_{N-2n-1}^{j-1} de la (4.82) se puede reescribir de la siguiente manera,

$$\Lambda_{N-2n-1}^{j-1} = \sum_{n'=0}^{\frac{N-j+1-2n}{2}} (-1)^{n'} \Lambda_{N-2n-2-2n'}^{j-2} \prod_{l'=0}^{n'-1} F_{N-2n-1-2l'}^2. \quad (4.83)$$

De aquí en adelante empleamos la siguiente notación:

$$\begin{aligned} n &\rightarrow n_0, & l &\rightarrow l_0, \\ n' &\rightarrow n_1, & l' &\rightarrow l_1, \\ n'' &\rightarrow n_2, & l'' &\rightarrow l_2, \end{aligned}$$

nuevamente sustituyendo Λ_{N-2n-1}^{j-1} en (4.82) tenemos,

$$\Lambda_N^j = \sum_{n=0}^{\frac{N-j+1}{2}} (-1)^n \left[\prod_{l=0}^{n-1} F_{N-2l}^2 \right] \sum_{n'=0}^{\frac{N-j+1-2n}{2}} (-1)^{n'} \Lambda_{N-2n-2-2n'}^{j-2} \prod_{l'=0}^{n'-1} F_{N-2n-1-2l'}^2 \quad (4.84)$$

arreglando términos tenemos,

$$\Lambda_N^j = \sum_{n=0}^{\frac{N-j+1}{2}} (-1)^n \sum_{n'=0}^{\frac{N-j+1-2n}{2}} (-1)^{n+n'} \left[\prod_{l=0}^{n-1} F_{N-2l}^2 \prod_{l'=0}^{n'-1} F_{N-2n-2l'-1}^2 \right] \Lambda_{N-2n-2n'-2}^{j-2} \quad (4.85)$$

disminuyendo en 1 a j i.e. en el coeficiente $\Lambda_{N-2n-2n'-2}^{j-2}$ tenemos,

$$\begin{aligned} \Lambda_N^j &= \sum_{n=0}^{\frac{N-j+1}{2}} (-1)^n \sum_{n'=0}^{\frac{N-j+1-2n}{2}} \sum_{n''=0}^{\frac{N-j+1-2n-2n'}{2}} (-1)^{n+n'+n''} \\ &\times \left[\prod_{l=0}^{n-1} F_{N-2l}^2 \prod_{l'=0}^{n'-1} F_{N-2n-2l'-1}^2 \prod_{l''=0}^{n''-1} F_{N-2n-2n'-2l''-2}^2 \right] \Lambda_{N-2n-2n'-2n''-2}^{j-3}, \end{aligned} \quad (4.86)$$

de donde podemos observar que la secuencia de índices superiores es:

$$N_{k,j} \equiv \frac{N-j+1}{2} - \sum_{i=0}^{k-1} n_i, \quad 0 \leq k \leq j-1, \quad (4.87)$$

y la secuencia de índices inferiores es:

$$M_m \equiv N - 2l_m - 2 \sum_{i=0}^{m-1} n_i - m, \quad 0 \leq m \leq j, \quad (4.88)$$

$$\{n\} \equiv \{n_0, n_1, \dots, n_{j-1}\}, \quad 0 \leq j \leq N+1. \quad (4.89)$$

Continuando con el proceso j veces y reemplazando $\Lambda_{N-2\sum_{i=0}^{j-1} n_i - j}^0$ en términos de F 's finalmente podemos obtener la solución de la ecuación de recurrencias de la siguiente forma

$$\Lambda_N^j = \begin{cases} 0, & \text{si } N-j \text{ par,} \\ \sum_{\{n\}}^{N_{k,j}} (-1)^{\sum_{i=0}^{j-1} n_i} \prod_{m=0}^j \left[\prod_{l_m=0}^{n_m-1} F_{M_m}^2 \right] & \text{si } N-j \text{ impar.} \end{cases} \quad (4.90)$$

Hasta aquí se ha logrado la obtención de cada uno de los coeficientes Λ_N^j , en términos de los acoplamientos F 's. Dichos acoplamientos dan forma a cadenas unidimensionales de $N + 1$ sitios idénticos, y que además puede modelarse con enlace fuerte con acoplamientos variables F 's.

Ahora se obtendrán los coeficientes de $\Phi_N(\lambda)$, pero en términos de algún espectro $\sigma(H)$ conocido, $\{E_k\}_{k=1}^{N+1}$,

$$\Phi_n(\lambda) = \prod_{k=1}^{N+1} (\lambda + E_k), \quad (4.91)$$

de manera que los coeficientes en términos de E_k , que expresa únicamente el polinomio característico para un espectro dado,

$$\Lambda_N^j = \sum_{\{k_i\}} \prod_{r=1}^{N-j} E_{k_r}, \quad \{k_1\} \equiv \{1, \dots, N + 1 \mid \forall i; k_i \neq k_j \forall i \neq j\}. \quad (4.92)$$

Igualando los coeficientes de (4.90) y (4.92), se obtienen las ecuaciones algebraicas que relacionan los acoplamientos variables F 's con algún espectro de energía dado o bien las ecuaciones de restricción que nos dan el dominio de los sistemas isoenergéticos,

$$\boxed{\sum_{\{n\}}^{N_{k,j}} (-1)^{\sum_{j=0}^{j-1} n_i} \prod_{m=0}^j \left[\prod_{l_m=0}^{n_m-1} F_{M_m}^2 \right]} = \sum_{\{k_i\}} \prod_{r=1}^{N-j} E_{k_r}. \quad (4.93)$$

Podemos ver que (4.93) es un conjunto de $\lfloor (N + 1)/2 \rfloor$ ecuaciones, dando lugar a un número $N - \lfloor (N + 1)/2 \rfloor = \lfloor N/2 \rfloor$ de variables libres y en consecuencia una superficie $\lfloor N/2 \rfloor$ -dimensiones representando a \mathcal{S}_H . Podemos dar solución a estas relaciones.

4.4. Distribuciones de acoplamientos de espectros aleatorios: Ejemplos numéricos

El diseño y construcción de cadenas unidimensionales de N sitios idénticos, dado algún espectro simétrico $\sigma(H)$, juega un papel muy importante en el estudio de una gran variedad de sistemas, no sólo periódicos donde los acoplamientos entre sitios F son constantes, sino que también pueden aplicarse a aquellos sistemas que presentan desorden a nivel de acoplamiento a primeros vecinos. Lo anterior nos motiva a dar solución a problemas inversos de esta naturaleza empleando (4.93) la cual relaciona acoplamientos F y energías de algún

espectro. Las soluciones del conjunto de restricciones pueden encontrarse numéricamente implementando un método adecuado, por ejemplo el método de Newton-Raphson.

Por otro lado resulta interesante encontrar, sistemas que puedan resolverse analíticamente, pero esto es cierto para valores pequeños de N como ya se ha mostrado en la Sec. 4.2. En lo sucesivo se exploran ejemplos de sistemas con N grandes. Para ello se generan espectros de energía, caracterizados por tener una distribución aleatoria. En particular se estudian dos ejemplos: El primero consiste de un espectro de energías cuya distribución es Gaussiana es decir, emula espectros localizados. En el segundo ejemplo, se da una distribución de energías que emula una cadena periódica y cuya relación de dispersión esta dada por una ley coseno.

En el primer ejemplo se estudia una distribución normal o también conocida como gaussiana [63] la cual queda determinada al fijar su media y su varianza, representando esta última la anchura de la distribución. Su importancia radica en el interés por modelar espectros localizados, cuya banda esta bien definida, i.e. sistemas con eigenvalores aproximadamente degenerados. Esto se puede asociar con sistemas cuasi-integrables y típicamente los niveles que emergen están ubicados alrededor del promedio con una anchura (varianza) bien definida.

De la solución numérica de (4.93) se ha obtenido la correspondiente distribución de acoplamientos $P(F)$ para una distribución Gaussiana con media $\langle E \rangle = 0$, desviación estandar $\sigma = 0.292$ y varianza $\sigma^2 = 0.085$. En la fig. 4.6 (b) podemos observar que la distribución de acoplamientos se encuentra acotada en el intervalo $0 \leq F \leq 0.5$, esto debido a la distribución normal, el máximo de los acoplamientos se encuentra dentro de una banda Gaussiana. También podemos ver que el comportamiento asintótico en ambas distribuciones poseen un comportamiento similar. Para $P(F)$ se encuentra que el acoplamiento promedio es $\langle F \rangle = 0.17$ y el acoplamiento más probable es $F = 0.11$ lo que nos dice que energías cero o cercanas a cero pueden dar lugar a acoplamientos F distintos de cero, ver fig. 4.6 (b).

El segundo ejemplo es de gran importancia para nuestra teoría general dado el papel que juega X en (4.30). Se sabe que en sistemas periódicos el espectro de energías es una ley coseno como ya se ha visto anteriormente en el Cap. 2, Sec. .2.4. Nuevamente empleamos métodos numéricos para la solución del problema inverso de una distribución de energías que sigue la ley coseno cuya media es cero, su desviación típica y varianza están definidas a partir de ella se obtiene su correspondiente distribución de acoplamientos $P(F)$, ver fig. 4.7

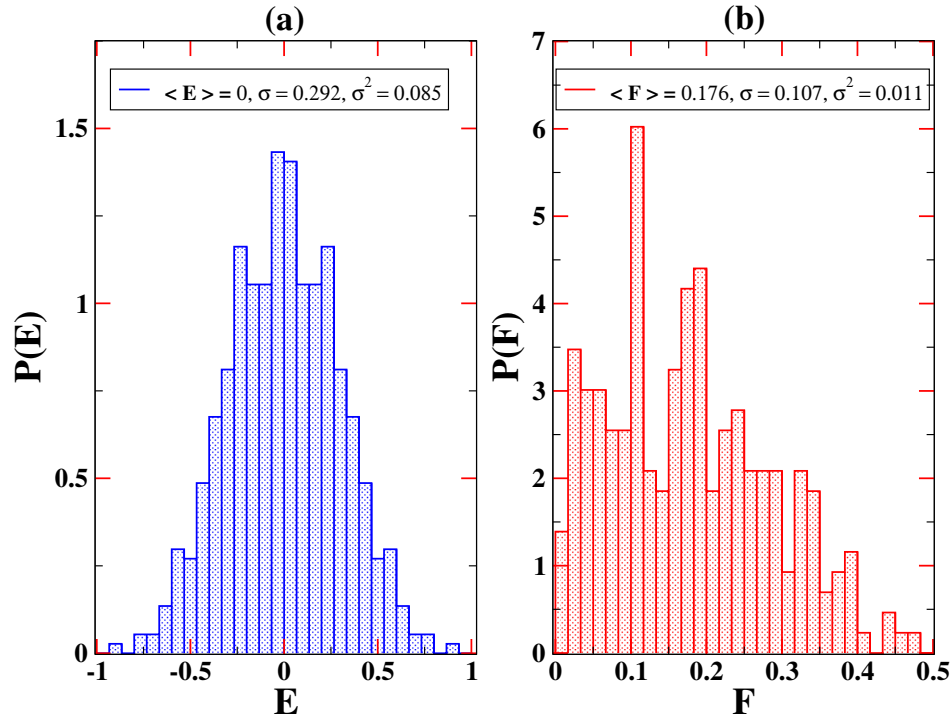


Figura 4.6: (a) Distribución Gaussiana de energías: $\langle E \rangle = 0, \sigma = 0.2921, \sigma^2 = 0.0853$ (b) Distribución de acoplamientos con varianza pequeña y promedio no cero: $\langle F \rangle = 0.1768, \sigma = 0.1073, \sigma^2 = 0.0115$.

(a) y (b). La distribución de acoplamientos revela un pico alrededor de $F = 1/2$ el cual corresponde a el valor de acoplamiento más probable i.e. como en el caso periódico. sin embargo, también se pueden observar una anchura mostrando que existen otros sistemas con el mismo espectro pero que no corresponden a sistemas periódicos es decir, que existen otras posibilidades de acoplamientos que pueden dar lugar a la misma relación de dispersión a pesar de la carencia de periodicidad local.

En el diseño inverso de cadenas unidimensionales se ha logrado caracterizar el espacio de soluciones correspondiente a Hamiltonianos de enlace fuerte que son isoespectrales. En el caso de cadenas de baja dimensionalidad (pocos sitios) se puede obtener una solución analítica exacta a través de las ecuaciones de restricción. Sin embargo, para cadenas de muchos sitios (N grandes) lo anterior no es posible, para ello se recurre a la obtención de ecuaciones algebraicas que relacionan los acoplamientos con las energías de un espectro simétrico. Finalmente mediante el uso de métodos numéricos se resuelven las ecuaciones de restricción para dos distintas distribuciones que son la distribución Gaussiana y la coseno obteniendo

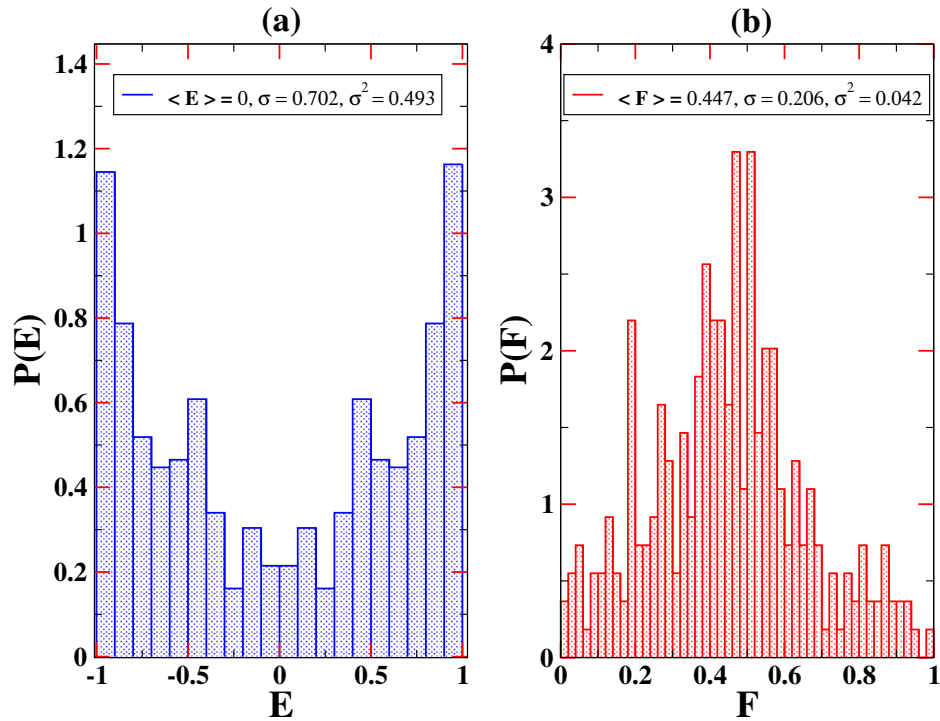


Figura 4.7: (a) Distribución coseno de energías: $\langle E \rangle = 0$, $\sigma = 0.7020$, $\sigma^2 = 0.4930$. (b) Distribución de acoplamientos con un pico centrado alrededor de $F = 1/2$ con anchura no cero: $\langle F \rangle = 0.4475$, $\sigma = 0.2060$, $\sigma^2 = 0.0424$. El pico representa sistemas que son periódicos.

las correspondientes distribuciones de acoplamientos. En el siguiente capítulo se diseñarán sistemas de baja dimensionalidad que son isoenergéticos así como ejemplos de problemas que son exactamente solubles.

Capítulo 5

Diseño espectral en guías de ondas dobladas

La variación en la longitud de segmentos en una cadena o guía de ondas con esquinas proporciona gran flexibilidad para el diseño y construcción de diversas geometrías, de manera que el traslape de los modos evanescentes juegan un papel relevante en la realización de estos sistemas. La manipulación de dichos sistemas pueden producir, como ya hemos mostrado, distintos espectros e incluso isoespectralidad. Por otro lado debemos tener en cuenta que el problema de valores en la frontera a altas energías o frecuencias más allá del umbral de propagación, posee una descripción que no es fácil de entender, y que trae consigo manifestaciones de caos ¹ [64]. Sin embargo, a bajas energías menores a la de umbral de propagación podemos hacer uso de los estados atrapados en guías con esquinas [22, 24, 65, 66] cuyos acoplamientos decaen con la distancia en forma exponencial. En este sentido, la variación de las distancias en los arreglos permite la ingeniería de dichos acoplamientos con el fin de reproducir o emular un espectro dado. Esta es la solución a un problema inverso.

5.1. Problemas con soluciones analíticas

En esta sección se exploran dos ejemplos, de sistemas exactamente solubles, incluyendo sorprendentemente la solución al problema inverso correspondiente, i.e. encontrar las cadenas que producen sistemas algebraicamente solubles. En las tablas 5.1 y 5.2 se da una

¹Refiriéndose aquí a las definiciones clásicas de estos comportamientos v. gr. Golsdtein.

-	Osc. de Dirac	Osc. finito
Restricciones	$\{FT, F^\dagger T^\dagger\} = H^2,$ $(FT)^2 = 0$	$[FT, F^\dagger T^\dagger] = 2J_z,$ $FT = J_+$
Hamiltoniano	$H = \sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger$	$H = J_x$
Grupo	S(2)	SU(2)
Espectro	$\{\pm\sqrt{n}\}_{n \in \mathbb{N}}$	$\{-\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}\}$
Acop. F_n	\sqrt{n} or 1	$\sqrt{(n-1)(N+1-n)}$

Tabla 5.1: Clasificación de problemas inversos y sus estructuras algebraicas.

clasificación de estos sistemas.

5.2. Oscilador de Dirac

Originalmente el oscilador de Dirac fue propuesto por M. Monshisky y A. Szczepaniak [67], sus propiedades han sido ampliamente estudiadas en diversas áreas de la física, principalmente en ramas de la física matemática [68–72], física nuclear [73–75], óptica cuántica [76–78] y en la reciente realización experimental por [79], mediante un arreglo con resonadores dispuestos en forma de dímeros y el empleo de microondas. Aquí los resonadores son discos dieléctricos con un índice de refracción grande, que ofrecen características favorables y que permiten el acoplamiento de cadenas de dímeros, ver fig. 5.1. Debemos destacar, que el acoplamiento puede controlarse mediante la separación de los discos dieléctricos (resonadores), permitiendo la construcción de cadenas unidimensionales de resonadores acoplados. El modelo de oscilador de Dirac para el caso unidimensional puede escribirse en términos de matrices de Pauli [80],

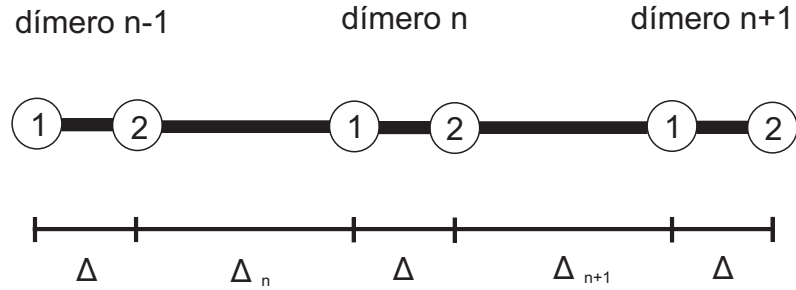
$$H = \sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger, \quad (5.1)$$

donde a y a^\dagger representan operadores de escalera de un oscilador armónico no relativista, y σ_\pm son los operadores de creación y aniquilación de espín 1/2 en términos de las matrices de Pauli, ver tabla 5.1,

$$\sigma_\pm = \sigma_x \pm i\sigma_y. \quad (5.2)$$

-	Op. de posición	Op. de posición deformado	Cadena infinita
Restricciones	$[FT, F^\dagger T^\dagger] = \hat{N},$ $FT = a$	F	$F = 1$
Hamiltoniano	$H = x$	$H = X_\nu$	$H = T + T^\dagger$
Grupo	Heisenberg	Heisenberg	$(Z, +)$
Espectro	\Re	Conjunto de Cantor	$[-2, 2] \subset \Re$
Acop. F_n	\sqrt{n}	$F = \text{sen}\left(\frac{\omega(N+1)}{\sqrt{N+1}}\right)$	1

Tabla 5.2: Clasificación de problemas inversos y sus estructuras algebraicas


 Figura 5.1: Cadena de resonadores que denotan sitios del tipo 1 y 2 formando dímeros. Aquí n es la etiqueta de dímero, Δ es el acoplamiento entre los sitios que componen un dímero, el cual es constante en toda la cadena, Δ_n representa el acoplamiento entre dos dímeros.

Cadenas finitas de dímeros acoplados, pueden emplearse en la construcción de guías, al concebir un dímero como la unión de dos esquinas (dos sitios), y cuyo acoplamiento se mantiene constante a lo largo del arreglo, es decir la distancia intradímero es constante y la distancia entre diferentes dímeros está dada por la siguiente ley de distancias d_n ,

$$d_n = -\lambda \ln \left\{ \frac{\Delta \sqrt{n}}{\Delta(0)} \right\}, \quad F \equiv \Delta(d) = \Delta \sqrt{n}. \quad (5.3)$$

Para la construcción de la cadena de dímeros, primero se fija el acoplamiento mínimo (distancia máxima) en términos del número total de sitios en el arreglo ($n_{max} + 1$),

$$\Delta(0) \sim \Delta \sqrt{n_{max} + 1}, \quad (5.4)$$

de esta manera se tiene que las distancias d_n entre dímeros varía como,

$$d_n = \frac{\lambda}{2} \ln \{ \ln (n_{\max} + 1) - \ln (n) \}, \quad (5.5)$$

con la restricción,

$$\frac{\Delta \sqrt{n_{\max} + 1}}{\Delta(0)} \leq 1. \quad (5.6)$$

Para ver la lista de parámetros, ver la tabla (5.1).

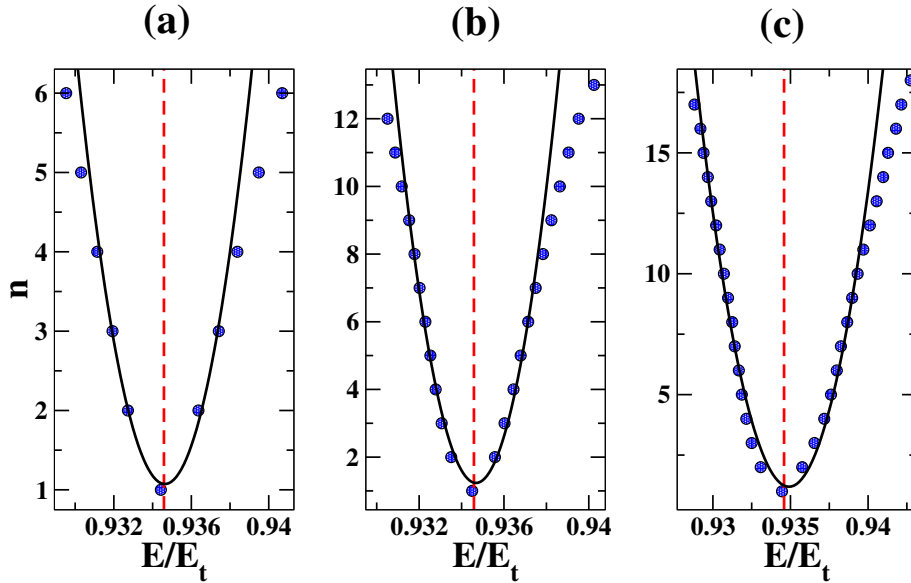


Figura 5.2: Espectros de energía provenientes de tres configuraciones distintas de osciladores de Dirac i.e. para (a) $N = 10$, (b) $N = 22$, (c) $N = 30$ sitios. Un mejor acuerdo se logra cuando incrementamos el tamaño del arreglo. Esto se traduce en más niveles de energía (puntos en azul) los cuales pueden ajustarse por una ley de raíz cuadrada (curva sólida de color negro) centrada alrededor del la energía del estado ligado en una esquina aislada (línea punteada roja).



Figura 5.3: Guía de onda doblada la cual representa un oscilador de Dirac. El arreglo es deformado por una ley logarítmica para 11 dímeros y su espectro puede observarse en el panel (b) de la figura 5.2.

Observamos que existe un excelente acuerdo con nuestras predicciones: Una ley raíz cuadrada es derivada para la mitad del espectro de energías (alrededor del centro de la

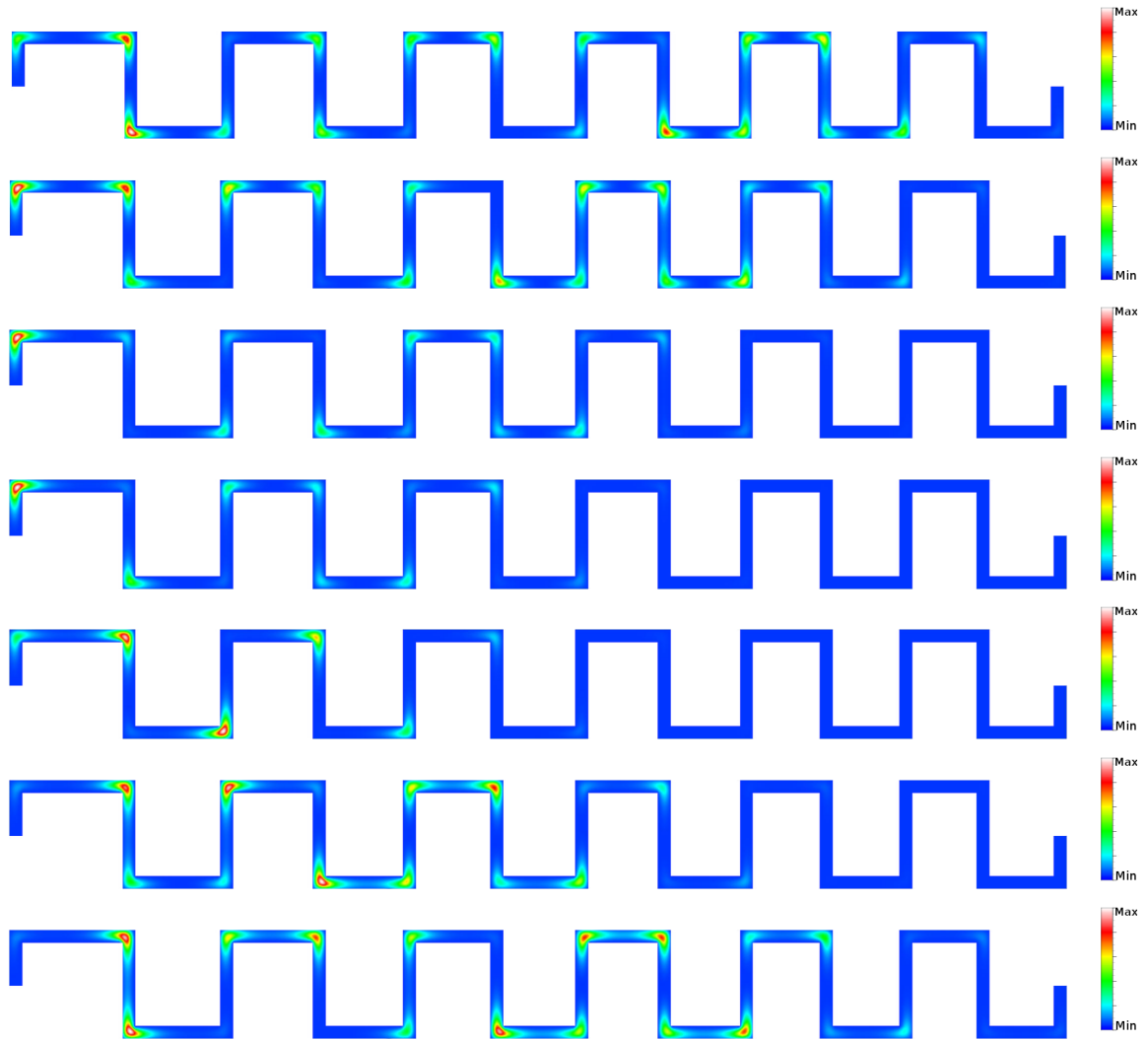


Figura 5.4: Funciones de onda de una cadena de 11 dímeros (de arriba hacia abajo) correspondientes a las energías, $E/E_t = 0.93602, 0.93557, 0.93450, 0.93351, 0.93306, 0.93277, 0.93252$ la cuales se encuentran alrededor del centro del espectro de energías, ver (b) fig. 5.2.

banda). Una curva parabólica es ajustada para el espectro de más bajas energías usando el método de mínimos cuadrados.

5.3. Oscilador finito y espectro equiespaciado

Algunas realizaciones en grafeno artificial, han sido propuestas en [8, 81], como ya se ha mencionado anteriormente. Tales estructuras se caracterizan por poseer redes hexa-

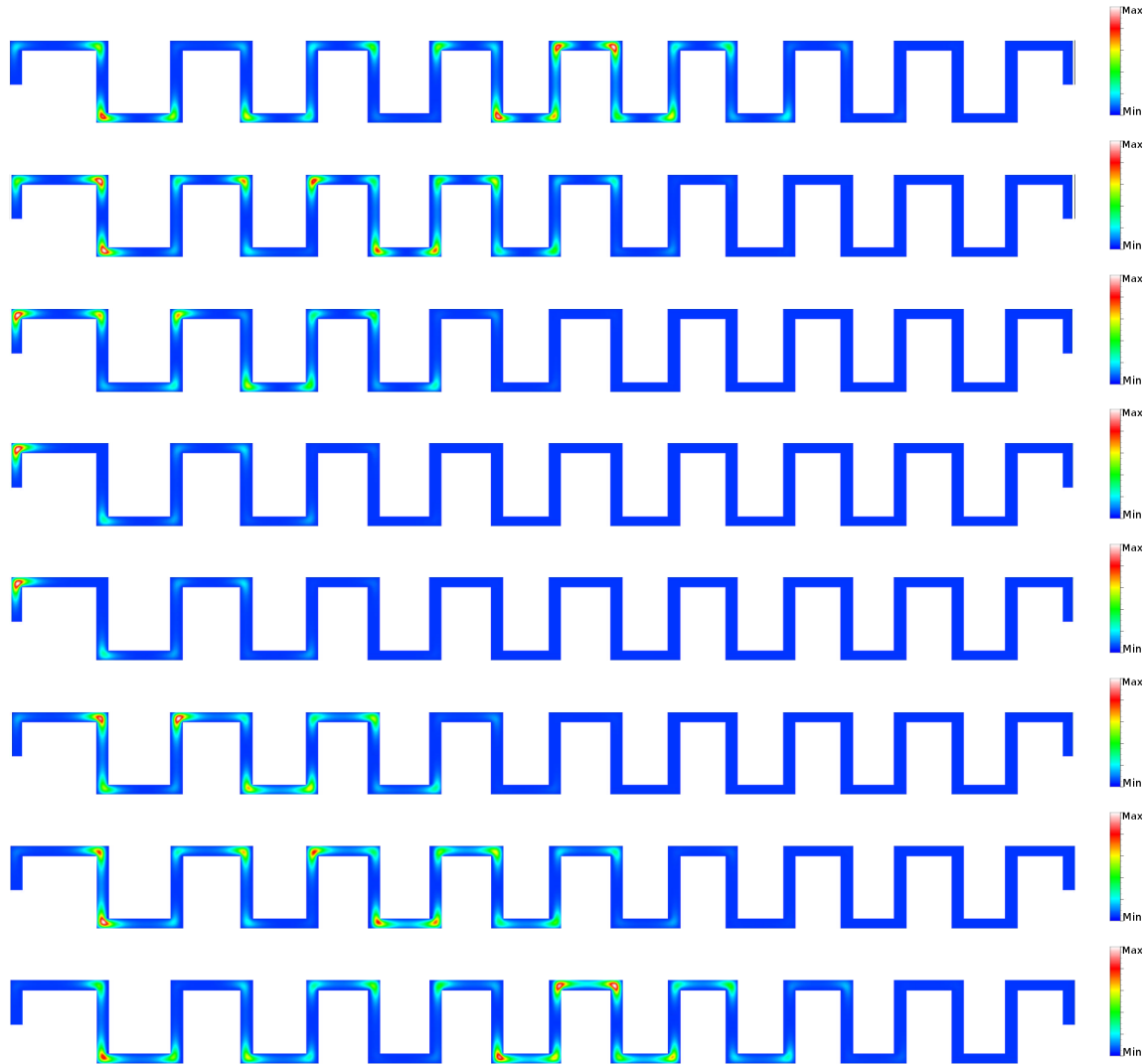


Figura 5.5: Funciones de onda de una cadena de 15 dímeros correspondientes a las energías alrededor del centro del espectro de energías $E/E_t = 0.937177, 0.936545, 0.935753, 0.934452, 0.933081, 0.932497, 0.932153, 0.931864$ la cuales se encuentran alrededor del centro del espectro de energías, ver (c) fig. 5.2.

gonales y en este sentido se han podido explorar propiedades de grafeno molecular [82]. Arreglos de este tipo, se pueden describir a través de ecuaciones relativistas efectivas y Hamiltonianos de enlace fuerte con interacción a primeros vecinos. En analogía con las redes hexagonales, existen sistemas de arreglos unidimensionales que pueden describirse a través de ecuaciones relativistas, tal es el caso de los osciladores finitos [83,84] y también en rotores

relativistas [85–88] en relación a diferentes sistemas integrables o exactamente solubles. Se encuentra, por ejemplo, que el operador de momento angular L^2 posee invariancia rotacional, mientras que L_x y L_z están relacionados precisamente por una rotación. La forma tridiagonal que define al operador L_x , permite pensar en la emulación de sistemas con acoplamientos a primeros vecinos. Esto justifica la realización experimental con microondas, en arreglos con resonadores acoplados de manera que este sistema produzca un espectro de frecuencias equiespaciadas pero finitas [89].

En esta sección estudiamos este sistema exactamente soluble, ver la tabla 5.1. El estudio se hace a través de la construcción de una guía de ondas con esquinas o bien una cadena unidimensional de sitios. Siguiendo el procedimiento propuesto en [89], en arreglos con resonadores, cuya distancia de separación depende de la ley de acoplamientos, se construye la contraparte en guías de onda ². La descripción es a través del siguiente Hamiltoniano

$$F_m\psi_{m-1} + F_{m+1}\psi_{m+1} + E_b\psi_m = E\psi_m, \quad (5.7)$$

de donde E_b es la energía del estado ligado en una esquina y el acoplamiento F_m coincide con el elemento en las diagonales de la matriz de L_x en la base de L_z , de manera que el espectro de L_x , corresponde a una proyección ortogonal del momento angular respecto al eje de cuantización,

$$F_m = \epsilon\sqrt{(l-m)(l+m+1)}, \quad m = n - l - 1. \quad (5.8)$$

El parámetro ϵ controla el tamaño de la ventana, donde caben todos los niveles de energía del sistema en cuestión, dispuestos alrededor de la energía del estado ligado E_b . El acoplamiento expresado en términos de la distancia entre dos esquinas, como ya se vió, es

$$F_m \equiv \Delta(d_n) = \Delta(0) \exp\left(-\frac{d_n}{\lambda}\right). \quad (5.9)$$

Igualando las expresiones de acoplamientos ecs. (5.8) y (5.9) se obtiene que las distancias entre esquinas están dadas por,

$$d_n = -\lambda \ln \left\{ \frac{\epsilon\sqrt{n(2l+1+n)}}{\Delta(0)} \right\}. \quad (5.10)$$

A partir de la ley de distancias obtenida en (5.10), se construyó la cadena de sitios unidimensional o guía de ondas con un número finito de sitios, tal y como se planeó.

La construcción se muestra en la fig. 5.7. Esto ha permitido ver que también es posible

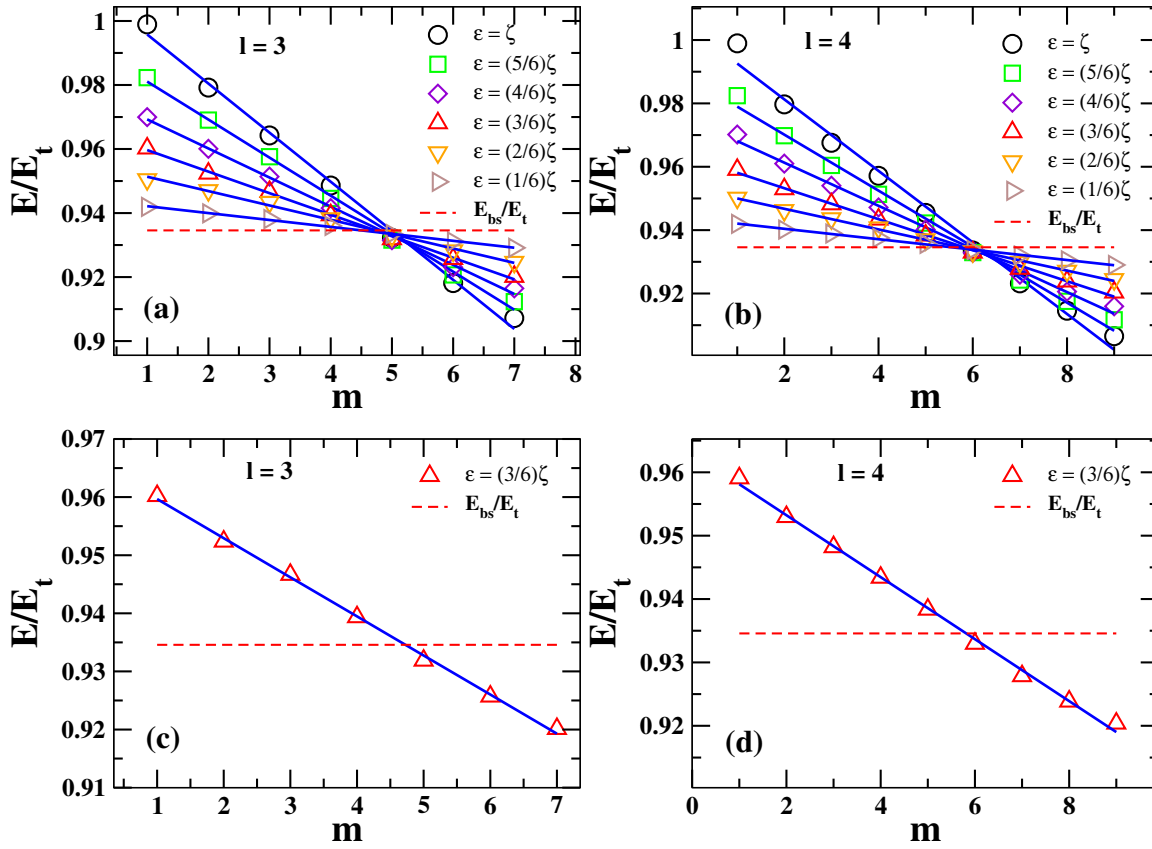


Figura 5.6: Espectro obtenido de forma numérica y normalizado a la energía de umbral de propagación E_t para guías de onda, que obedecen las condiciones de los osciladores finitos. (a) y (b) se muestran diferentes espectros equiespaciados en términos de $\epsilon = (E_t - E_b)/l$. En los paneles (c) y (d) se muestran los casos especiales en los que los espectros equiespaciados muestran un buen acuerdo.

obtener espectros finitos (sin efectos de borde) y equiespaciados de la misma manera en la que se ha reportado en cadenas de resonadores [89]. Los resultados obtenidos con guías de ondas muestran un buen acuerdo con los espectros esperados, al ajustar líneas rectas, ver fig. 5.6 así mismo podemos notar que todos los espectros de energía, se encuentran por debajo del umbral de propagación.

²Pozos de potencial de igual ancho y profundidad, en el caso de una guía de ondas un sitio corresponde a esquina de ancho constante.

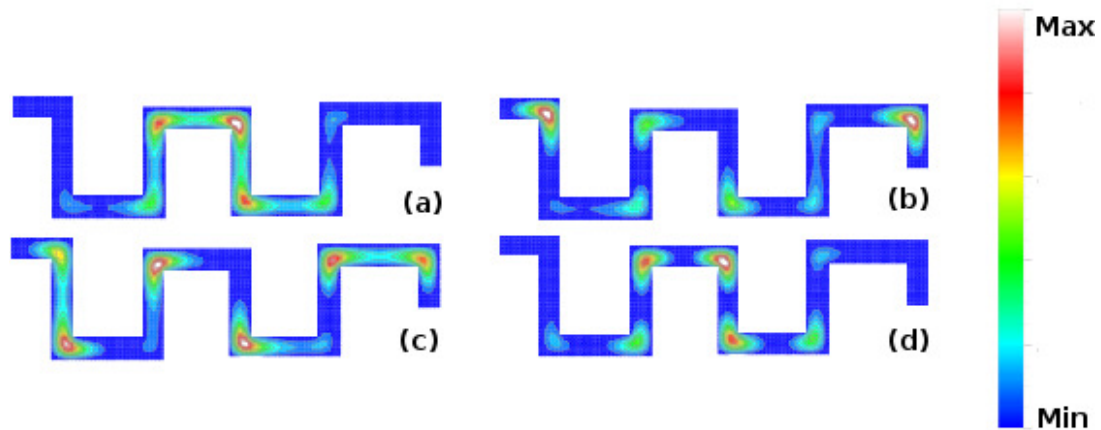


Figura 5.7: Funciones de onda para osciladores finitos con 9 sitios, es decir cuando $l = 4$. Estos funciones de onda corresponden a los casos (a) $m = 1$, (b) $m = 4$, (c) $m = 6$, (d) $m = 9$. El espectro es mostrado en la fig. 5.6 (d).

5.4. Sistemas con isoespectralidad parcial

Otro tipo de sistemas que son exactamente solubles, son los sistemas de baja dimensionalidad en los acoplamientos F . Anteriormente en el Cap. 4, Sec. 4.2 se obtuvo la solución de tales sistemas. Para mostrar que efectivamente son isoespectrales, se han construido guías de onda con $N = 3$ (cuatro sitios o esquinas) y $N = 4$ (cinco sitios o esquinas). Estos arreglos fueron modelados, escogiendo los acoplamientos F de forma aleatoria sobre las superficies de restricción ya determinadas en el capítulo 4, figs. 4.3 y 4.4. Una vez que se tienen los acoplamientos, se procede a la determinación de las correspondientes distancias entre esquinas d_n , a partir de la ley de acoplamientos dada por 2.38 y obtenida en la Sec. (2.3) del Capítulo (2).

Para corroborar que, en efecto, estos modelos representan guías con esquinas acopladas, se procede también a resolver con diferencias finitas la ecuación de Helmholtz para las geometrías resultantes, y así comparar ambos espectros. Los resultados muestran un buen acuerdo con el espectro de referencia, ver fig. 5.8. Sin embargo, con la solución numérica, se presentan pequeñas desviaciones en el espectro, debido a la discretización inherente al método de solución. En particular, la distancia utilizada en estas construcciones debe estar dada como un múltiplo del número de puntos o granos que conforman la malla del método numérico. Esto conlleva un redondeo que añade incertidumbre a los cálculos. Notemos que

d_n procede de una ley de acoplamientos que es exponencial, siendo este muy sensible a las variaciones o redondeos en la distancia. Hacer estos redondeos hacia arriba o hacia abajo, genera barras de incertidumbre en los espectros numéricamente obtenidos, ver fig 5.8. Sin embargo, confirmamos nuestros resultados verificando que el espectro de referencia cae completamente dentro de las barras de incertidumbre así generadas; esto es un éxito de la teoría.

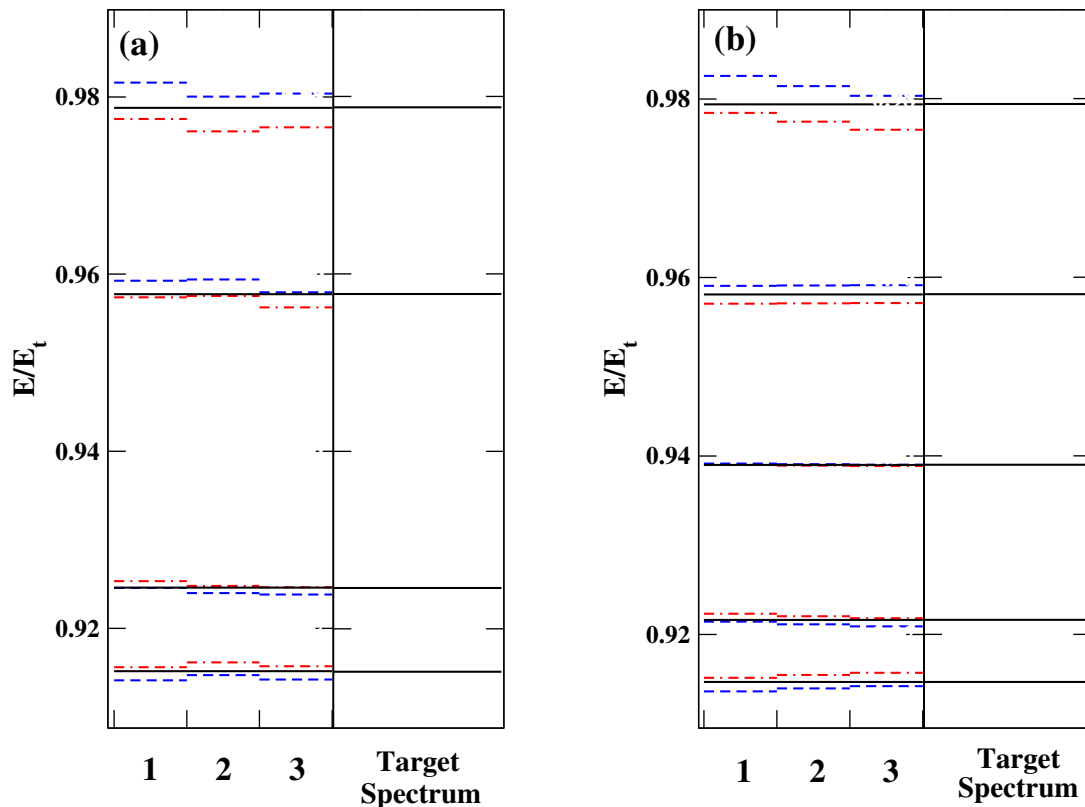


Figura 5.8: Espectros de energía correspondientes a; (a) tres sistemas con 4 esquinas y (b) tres sistemas con 5 esquinas a la izquierda de ambos se muestra el espectro blanco. En línea punteada en color rojo se muestran las desviaciones que sufre el espectro al ajustar las distancias entre esquinas hacia el entero próximo, de igual manera en línea punteada en azul se muestra la desviación que sufre el espectro al ajustar la distancia hacia abajo del entero.

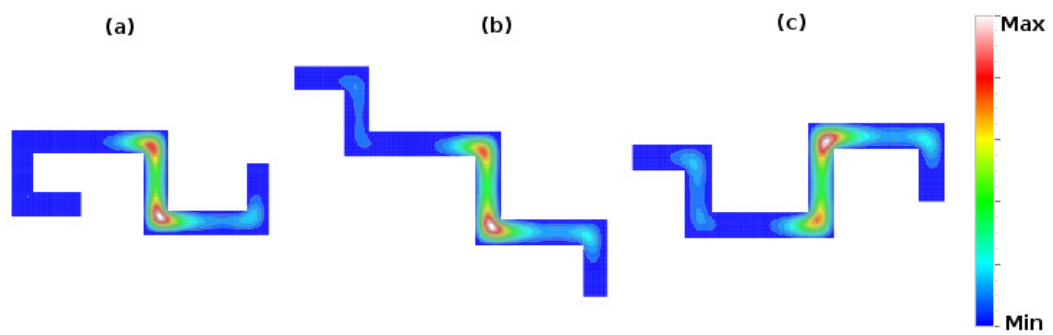


Figura 5.9: Funciones de onda en sistemas de guías que son parcialmente isoespectrales (a), (b) y (c) corresponden a los sistemas 1, 2 y 3 que se muestra en la fig. 5.8 (b) correspondientes al primer estado excitado.

Capítulo 6

Espectro fractal en sistemas singulares

La introducción de álgebras de oscilador deformadas no es una idea nueva, existe una gran cantidad de trabajos relacionados, que hacen referencia a este tipo de álgebras. Específicamente en el estudio de los q – osciladores, han sido introducidos en el estudio de estructuras matemáticas de grupos cuánticos [90]. Desde el punto de vista matemático los q – osciladores representan ejemplos no triviales de álgebras de Hopf [91]. En ellos se pueden encontrar dos principales propiedades; la primera es que aparecen de manera natural como bloques constructores de teorías completamente integrables, herramienta indispensable en la física. La segunda propiedad hace referencia a la conexión que existe entre la q – deformación y la no linealidad. Desde el punto de vista físico, resulta muy interesante estudiar el álgebra de oscilador deformada, en particular el álgebra de Heisenberg [92,93], la cual incluye operadores de creación y aniquilación deformados, provenientes de las llamadas q y f – deformaciones. El espacio fase que exhibe el álgebra deformada de Heisenberg ha sido poco explorado, se verá que el operador de posición deformado X contiene un espectro dado por el conjunto de Cantor, mostrando que el espacio fase modificado algebraicamente arroja propiedades topológicas no triviales. Por ejemplo, la medida espectral del espacio es nula, a pesar de la no numerabilidad de los eigenvalores asociados al operador de posición. Por lo que se tiene un espacio fase puramente singular [94].

La primera evidencia que se reporta en la literatura acerca de un espectro fractal dado por el conjunto de Cantor aparece en [95]. Por otro lado a mediados de los años 70's Douglas

R. Hofstadter [96] encontró que el espectro de energías correspondiente a un sistema de una partícula moviéndose en una red cristalina cuadrada y aplicando un campo magnético magnético, tiene una forma muy característica. Sin embargo, a pesar de la gran cantidad de literatura poco se sabe acerca del estudio de otros fenómenos en los que aparecen este tipo de espectros.

6.1. Álgebra deformada

El formalismo presentado en el capítulo 4, específicamente la ecuación (4.6), corresponde a un Hamiltoniano de enlace fuerte, de manera que este puede ser identificado con un operador de posición X , perteneciente a un f - o q - oscilador deformado, propuesto por Man'ko [97–100], al introducir deformaciones en el álgebra de Heisenberg. Este tema es del dominio de óptica cuántica y requiere especificarse el número de ocupación de los fotones a cierta frecuencia $\hat{N} - 1$ (modos normales en una cavidad), sabiendo que los operadores de posición poseen un espectro real y simétrico ¹. A continuación, empleamos un álgebra de oscilador y vamos a deformarla, tal y como recomienda Man'ko [99]. Primero se define una función de deformación $F(N)$, con $N = \frac{1}{2}(p^2 + x^2 - 1)$ el operador de número. El álgebra de Heisenberg es

$$[x, p] = i, \quad [a, a^\dagger] = 1, \quad (6.1)$$

de donde a y a^\dagger corresponden a los operadores de escalera,

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + ip) \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - ip), \quad (6.2)$$

la relación entre la función de deformación y los operadores a y a^\dagger es la siguiente

$$aF(N) = F(N + 1)a. \quad (6.3)$$

Definiendo nuevos operadores A y A^\dagger en términos de a y $F(N)$ tenemos,

$$A = F(N)a, \quad A^\dagger = a^\dagger F^\dagger(N) = a^\dagger F(N), \quad (6.4)$$

con su correspondiente conmutador,

$$[A, A^\dagger] = F(N)^2(N + 1) - F(N - 1)^2N. \quad (6.5)$$

¹Se dice simétrico, ya que es invariante ante reflexión respecto al origen.

Los operadores A y A^\dagger permiten escribir nuevos operadores de posición X y de momento P ,

$$X = \frac{1}{\sqrt{2}}(A + A^\dagger), \quad P = \frac{1}{i\sqrt{2}}(A - A^\dagger), \quad (6.6)$$

de donde el conmutador de operadores deformados arroja

$$[X, P] = i [F(N)^2(N + 1) - F(N - 1)^2N]. \quad (6.7)$$

Es importante notar que las deformaciones, modifican el espectro del Hamiltoniano, expresado en términos de los operadores deformados,

$$H = \frac{1}{2}(X^2 + P^2) = \frac{1}{2}(AA^\dagger + A^\dagger A) = \frac{1}{2} [F(N)^2(N + 1) + F(N - 1)^2N], \quad (6.8)$$

y su correspondiente espectro de energías $\sigma(H)$ puede ser obtenido actuando sobre la base usual de oscilador $\{|n\rangle\}_{n=0,1,2,3,\dots}$, obteniendo,

$$E_n = \frac{1}{2} [F(n)^2(n + 1) + F(n - 1)^2n], \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (6.9)$$

Ahora se expresan los elementos de matriz del operador deformado de posición X en la base de oscilador,

$$\langle n|X|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [F(n)\sqrt{n+1}\delta_{n,m-1} + F(n-1)\sqrt{n}\delta_{n,m+1}]. \quad (6.10)$$

Los operadores de posición X y de momento P están relacionados unitariamente,

$$P = \exp\left(i\frac{\pi N}{2}\right)X \exp\left(-i\frac{\pi N}{2}\right) = i^N X i^{-N}, \quad (6.11)$$

por lo tanto, los operadores P y X son isoenergéticos. Ahora se explora el operador de posición, gracias a que siempre podemos escribir las eigenfunciones $|\xi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n |n\rangle$ del operador X en términos de la base de oscilador. Es posible obtener una relación de recurrencia, sustituyendo $|\xi\rangle$ en la ecuación $X|\xi\rangle = \xi|\xi\rangle$

$$\frac{F(n)\sqrt{n+1}}{\sqrt{2}}\phi_{n+1} + \frac{F(n-1)\sqrt{n}}{\sqrt{2}}\phi_{n-1} = \xi\phi_n, \quad (6.12)$$

con la condición de frontera $\phi_{-1} \equiv 0$. Esta última expresión (6.12) se puede ver que representa un modelo de enlace fuerte a primeros vecinos, donde ξ es la k -ésima energía de amarre de una partícula en un sitio de una cadena y $\frac{F(n-1)\sqrt{n}}{\sqrt{2}}$ puede identificarse con el término de acoplamiento Δ_n entre dos sitios de la cadena, por lo que siempre se puede expresar de la siguiente forma,

$$\Delta_{n+1}\phi_{n+1}^k + \Delta_n\phi_{n-1}^k = \xi_k\phi_n^k. \quad (6.13)$$

En el caso de una cadena semi-infinita, se debe considerar la condición de borde, donde el acoplamiento $\Delta_0 \equiv 0$. El Hamiltoniano de enlace fuerte a primeros vecinos puede ser escrito en términos de los operadores de traslación T y T^\dagger y de los acoplamientos Δ_n como sigue,

$$H_{t.b.}|\phi^k\rangle = \left[\Delta(N)T + T^\dagger\Delta^\dagger(N) \right] |\phi^k\rangle = \xi_k|\phi_n^k\rangle, \quad |\phi^k\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n^k|n\rangle, \quad (6.14)$$

de donde los operadores de traslación T y T^\dagger tienen las siguientes propiedades,

$$T|n\rangle = |n+1\rangle, \quad T^\dagger|n\rangle = |n-1\rangle, \quad T^\dagger|0\rangle = 0, \quad N|n\rangle = n|n\rangle. \quad (6.15)$$

6.2. El mapeo entre el operador de posición y el Hamiltoniano de Harper

En esta sección, se muestra cómo el operador de posición, puede escribirse en la forma del ya bien conocido Hamiltoniano de Harper, que describe el movimiento de electrones en una una malla cuadrada, con un campo magnético aplicado [96],

$$H_{Harper} = T + T^\dagger + 2 \cos(\omega N - \nu). \quad (6.16)$$

Es importante notar que este hamiltoniano, no presenta deformaciones en la red, es decir los acoplamientos se mantienen constantes en toda la red y la fractalidad que exhibe su espectro proviene del efecto causado por la aplicación del campo magnético externo. Sin embargo, existe una manera de obtener un espectro fractal aplicando únicamente las f -deformaciones a el operador de posición X , encontrando que existe un mapeo entre el operador de posición y el Hamiltoniano de Harper [101]. Existe una U unitaria tal que $UXU^\dagger = \lambda H_{Harper}$ donde λ es un factor de escalamiento. Reescribiendo el operador de posición X en términos de la función de deformación $F(N)$,

$$\begin{aligned} X &= \frac{\text{sen}[\omega(N+1)]}{\sqrt{2(N+1)}}a + a^\dagger \frac{\text{sen}[\omega(N+1)]}{\sqrt{2(N+1)}} \\ &= a \frac{\text{sen}[\omega N]}{\sqrt{2N}} + \frac{\text{sen}[\omega N]}{\sqrt{2N}}a^\dagger \\ &= a \frac{\cos[\omega N - \pi/2]}{\sqrt{2N}} + \frac{\cos[\omega N - \pi/2]}{\sqrt{2N}}a^\dagger, \end{aligned} \quad (6.17)$$

de donde la función de deformación $F(N)$ está definida en términos de funciones trigonométricas

$$F(N) = \frac{\text{sen}[\omega(N+1)]}{\sqrt{N+1}} \quad (6.18)$$

con la introducción de un parámetro extra ν el operador de posición puede escribirse de una forma más general,

$$\begin{aligned} X_\nu &= a \frac{2 \cos [\omega N - \nu]}{\sqrt{N}} + \frac{2 \cos [\omega N - \nu]}{\sqrt{N}} a^\dagger \\ &= a \frac{\exp [i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} + \frac{\exp [-i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} a^\dagger + a \frac{\exp [-i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} + \frac{\exp [i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} a^\dagger \\ &\equiv H_0 + V, \end{aligned} \quad (6.19)$$

de donde se puede identificar que,

$$\begin{aligned} H_0 &= a \frac{\exp [i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} + \frac{\exp [-i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} a^\dagger, \\ V &= a \frac{\exp [-i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} + \frac{\exp [i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} a^\dagger. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Lo siguiente es mostrar que H_0 efectivamente corresponde a la suma de dos operadores de traslación y V al potencial magnético, escrito en una base apropiada. Definiendo los nuevos estados $|k\rangle$ se mostrará que el operador X_ν transforma unitariamente,

$$|k\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left\{ i \left[\omega \left(\frac{1}{2} n(n+1) + k(k-1-2n) \right) + \nu n \right] \right\} |n\rangle, \quad k \in \mathbb{Z}, \quad (6.21)$$

donde \mathcal{N} es una constante de normalización. Realizando un poco de álgebra se pueden encontrar las siguientes relaciones,

$$\left\{ \frac{\exp [-i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} a^\dagger \right\} |k\rangle = |k+1\rangle, \quad \left\{ a \frac{\exp [i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} \right\} |k\rangle = |k-1\rangle, \quad (6.22)$$

$$\left\{ a \frac{\exp [-i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} + \frac{\exp [i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} a^\dagger \right\} |k\rangle = 2 \cos [2\omega k - 2\nu] |k\rangle. \quad (6.23)$$

Por sustitución directa de (6.21) en la segunda relación de (6.22) y la primera relación se sigue que,

$$|k+1\rangle = \left\{ \frac{\exp [-i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} a^\dagger \right\} \left\{ a \frac{\exp [i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} \right\} |k+1\rangle, \quad (6.24)$$

$$\begin{aligned} |k+1\rangle &= \left\{ \frac{\exp [-i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} a^\dagger \right\} \left\{ a \frac{\exp [i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} \right\} |k+1\rangle \\ &= \left\{ \frac{\exp [-i(\omega N - \nu)]}{\sqrt{N}} a^\dagger \right\} |k\rangle. \end{aligned} \quad (6.25)$$

De las anteriores propiedades se pueden identificar a H_0 y a V como sigue,

$$H_0 = T_k + T_k^\dagger, \quad V = 2 \cos(\tilde{\omega} K - \tilde{\nu}), \quad (6.26)$$

es decir T_k y T_k^\dagger son operadores de traslación en k y V es una función del operador de número K , de tal modo que $K|k\rangle = k|k\rangle$ y donde se ha definido $\tilde{\omega} = 2\omega$, $\tilde{\nu} = 2\nu$. De esta manera la ecuación de Harper surge cuando X_ν es aplicado al eigenvector $|\xi\rangle$ como una superposición lineal $|\xi\rangle = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \psi_k|k\rangle$; la recurrencia es;

$$\psi_{k+1} + \psi_{k-1} + 2 \cos(\tilde{\omega}k - \tilde{\nu})\psi_k = \xi\psi_k. \quad (6.27)$$

Sin embargo, notemos que esta ecuación corresponde a una cadena infinita dado que $k \in \mathbb{Z}$. Ahora se mostrará que la transformación $|n\rangle \rightarrow |k\rangle$ es unitaria. Se puede aplicar la transpuesta conjugada de (6.21) a $|k\rangle$ como sigue:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -i \left[\omega \left(\frac{1}{2}n(n+1) + k(k-1-2n) \right) + \nu n \right] \right\} |k\rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -i \left[\omega \left(\frac{1}{2}n(n+1) + k(k-1-2n) \right) + \nu n \right] \right\} \\ & \times \frac{1}{N} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ i \left[\omega \left(\frac{1}{2}m(m+1) + k(k-1-2m) \right) + \nu m \right] \right\} |m\rangle \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \exp \left\{ i \left[\frac{1}{2}\omega(m(m+1) - n(n+1)) + \nu(m-n) \right] \right\} \\ & \times \left\{ \frac{1}{N^\epsilon} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{2i\omega k(n-m)} \right\} |m\rangle \\ &= |n\rangle, \end{aligned} \quad (6.28)$$

en la última suma entre llaves representa una delta normalizada por lo que $m = n$.

Es de suma importancia notar que el mapeo no funciona cuando (6.16) contiene un potencial más general $2\Lambda \cos(\omega N - \nu)$ con $\Lambda \neq 1$. De manera que sólo con $\Lambda = 1$ se tiene la posibilidad de producir un espectro singular. Para una Λ general la función de deformación se transforma en una función compleja

$$\begin{aligned} F(N) &= \frac{\exp \{i[\omega(N+1) - \nu]\} + \Lambda \exp \{-i[\omega(N+1) - \nu]\}}{\sqrt{N+1}} \\ &= \frac{e^{i\Phi(N)} \sqrt{1 + \Lambda^2 + 2\Lambda \cos [2\omega(N+1) - 2\nu]}}{\sqrt{N+1}} \end{aligned} \quad (6.29)$$

y su espectro es modificado. Cuando $\Lambda \gg 1$ o $\Lambda \ll 1$, la parte trigonométrica es sólo una perturbación.

6.3. Espectro de X_ν

En esta sección se obtiene el espectro de X_ν , encontrando que este es equivalente al conjunto de Cantor, cuando ω no es conmensurado con π , es decir el espectro es puramente singular independientemente del valor del parámetro ν . El sistema periódico surge

cuando $q\omega = p\pi$. Si p y q son primos relativos, una estructura de q bandas emerge, donde q representa el periodo. El espectro del operador X_ν sin diagonal principal (6.20) puede explicarse al considerar el comportamiento ergódico de $F(N)$ y puede obtenerse al realizar la diagonalización directa sobre X_ν . La construcción del operador de posición X_ν , proviene de matrices finitas dando lugar a la aparición de efectos de borde en los eigenvalores del espectro. Para mostrar este efecto mostramos los paneles de la fig. 6.1 diferentes resultados, donde se ha variado el parámetro ν .

Apartir de la obtención del espectro de X_ν , es posible aplicar en método de diseño inverso

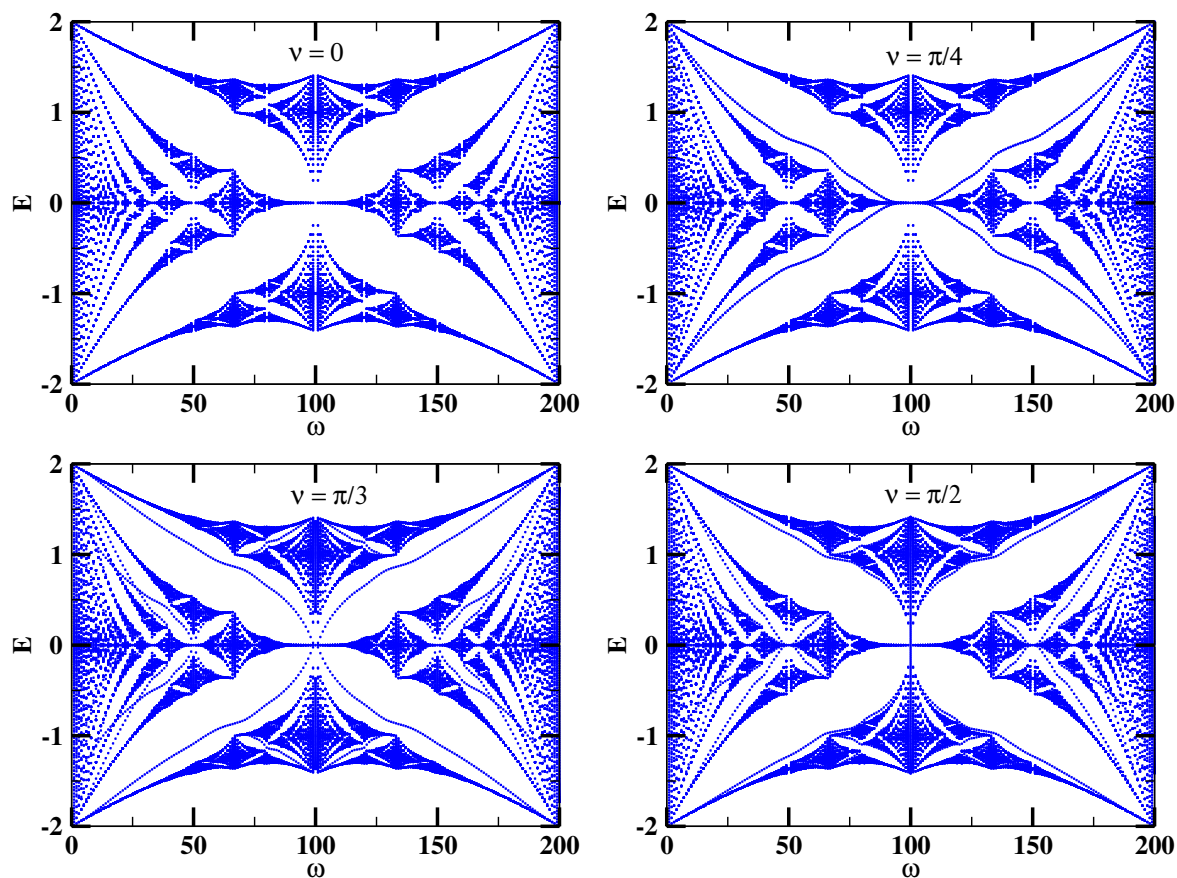


Figura 6.1: Espectros obtenidos de forma numérica los cuales corresponden al operador de posición X_ν . En cada panel se ha cambiado el parámetro ν , indicando la aparición de efectos de borde en los espectros que se obtienen. En todos los casos se ω fue dividida 200 veces.

para construir sistemas de cadenas unidimensionales. En guías de ondas es posible obtener este tipo de espectros, en dichos sistemas los acoplamientos son variables pues dependen de (6.18), de esta manera se puede fijar una ley de distancias y realizar la correspondiente

ingeniería de acoplamientos de modos evanescentes. En la fig. 6.2 se muestran dos de guías de onda cuyo período corresponde a $q = 10$ y $q = 17$ en ambos casos se ha fijado $p = 1$. De manera que cada bloque que aquí se muestra se repite hasta un tamaño apropiado, notemos que cada sistema corresponde a una $\omega = (p/q)\pi$ fija.

Se ha obtenido por diagonalización numérica el espectro fractal de un operador de posición,

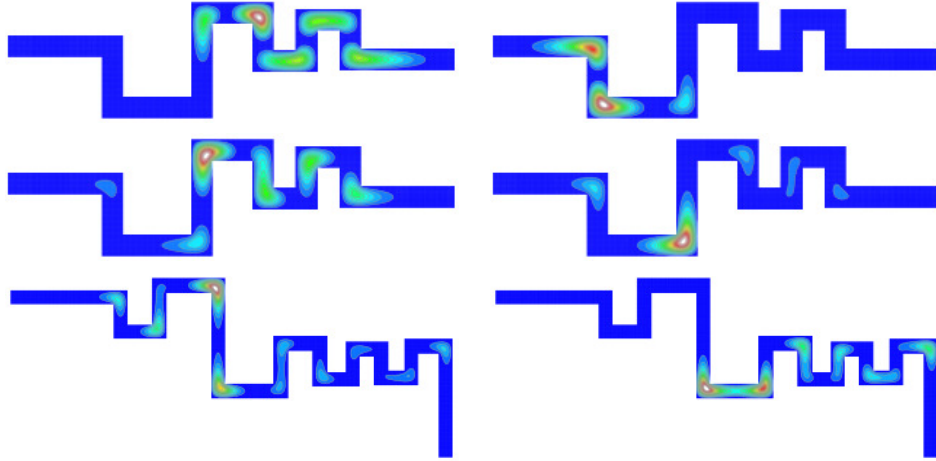


Figura 6.2: Guías de onda cuyos períodos $q = 10$ y $q = 17$ coincide con el número de esquinas. Los acoplamientos fueron derivados apartir de $F(N)$ y en ambos sistemas $p = 1$ con $\omega = \frac{p}{q}\pi$.

el cual fue descrito en términos de un álgebra deformada mediante la incorporación de la función de deformación $F(N)$. El espectro obtenido es un resultado equivalente al encontrado en el problema de un electrón moviéndose en una malla cuadrada bajo la influencia de un campo magnético. Debido al tamaño finito de los sistemas se encuentra que el espectro muestra pequeños efectos de borde.

Capítulo 7

Conclusiones

Esencialmente en una guía de ondas con esquinas, todo estado atrapado que se encuentra por debajo de la energía o frecuencia de umbral de propagación, corresponde a un modo evanescente, lo que nos ha permitido proponer arreglos flexibles, de cadenas de sitios unidimensionales, con acoplamientos a primeros vecinos. Gracias a la implementación del método de diferencias finitas, se obtiene la solución completa al problema de valores a la frontera y permite conocer tanto el espectro de energías como las funciones de onda asociadas a las diferentes geometrías propuestas. En este mismo sentido se ha estudiado el transporte en sistemas abiertos, en particular en arreglos periódicos de guías de onda con esquinas, donde se ha mostrado que el acoplamiento de modos evanescentes producen transmisión a lo largo del arreglo, verificando además que el espectro de energías sufre una asimetría producida por dos razones: el acoplamiento de terminales y la introducción de segundos vecinos. La primera causa de la asimetría se produce por acoplar terminales semi-infinitas al sistema localmente periódico. Dicha asimetría que puede corregirse, al introducir la llamada función de autoenergía. La segunda causa que genera la asimetría se debe a que la distancia entre esquinas pueden producir acoplamientos a segundos vecinos. Por otra parte el diseño inverso de cadenas finitas unidimensionales permite que para un espectro simétrico dado, se obtienen un infinito número de sistemas, descritos por modelos de enlace fuerte a primeros vecinos, logrando con ello la caracterización del espacio completo de Hamiltonianos de enlace fuerte de sistemas que son parcialmente isoenergéticos (Parcialmente significa isoenergético exclusivamente bajo el umbral de propagación). A este respecto se han obtenido los correspondientes acoplamientos de dos diferentes distribuciones de energía aleatorias (Gaussiana y Coseno) ilustrando el empleo de nuestro sistema de ecuaciones para

resolver el problema inverso en cadenas finitas. Se ha logrado el diseño espectral de diferentes sistemas en guías de onda dobladas, obtenidos a partir de modelos exactamente solubles, que producen un espectro finito y equiespaciado: esta configuración es mejor conocida como el oscilador finito. También exploramos el oscilador de Dirac. Para completar el tratamiento y agotar todos los tipos de problemas que pueden presentarse, también se estudió el ejemplo de un sistema singular (espectro no numerable pero de medida cero). Dicho ejemplo, ha mostrado tener un espectro semejante, como el encontrado en el problema de un electrón moviéndose en una malla cuadrada bajo la influencia de un campo magnético. Sin embargo, del espectro obtenido resaltan efectos de borde debido al tamaño finito del sistema. También se encuentra que es posible construir sistemas de arreglos artificiales en resonadores con microondas, redes ópticas y en cadenas de sitios idénticos como guías de ondas con esquinas que propagan por debajo del umbral y donde los acoplamientos pueden ser ajustados.

Apéndice A

Ecuación de Helmholtz en diferencias finitas

El método apropiado para hallar los valores propios y las funciones propias en un sistema de guías de ondas con esquinas, será el de elemento finito, para ello se resolverá el problema de valores a la frontera. Recordando que la ecuación de Helmholtz se puede escribir de la siguiente forma,

$$\left\{ \nabla_{x,y}^2 + k^2 \right\} \phi(x, y) = 0, \quad (\text{A.1})$$

donde $\nabla_{x,y}^2$ es el Laplaciano en coordenadas cartesianas, k es el vector de onda, y $\phi(x, y)$ es un campo escalar. Se sabe también que la ecuación estacionaria de Schrödinger con $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$ la cual corresponde a una estructura matemática idéntica a la ecuación de Helmholtz,

$$-\nabla_{x,y}^2 \phi(x, y) = E\phi(x, y), \quad \phi(x, y)|_{\partial\Omega} = 0, \quad (\text{A.2})$$

de donde $\partial\Omega$ representa la frontera del sistema. Para expresar el operador ∇^2 definamos lo siguiente,

(a) $\phi(x, y) = \sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} C_k$ base de ondas planas. Se resuelve para C_k y esto se llama método de ondas planas.

(b) Aproximamos al operador derivada como sigue

$$\frac{\partial}{\partial x} \phi(x, y) \simeq \frac{\phi(x + h, y) - \phi(x - h, y)}{2h}, \quad (\text{A.3})$$

con h pequeño. En variable discreta, $n \equiv \frac{x}{h}$ esto representa un número entero. De manera que el operador $\frac{\partial}{\partial x}$ de A.3 toma la forma,

$$\frac{\partial}{\partial x} \simeq \frac{1}{2h} \{ \phi((n+1)h, y) - \phi((n-1)h, y) \}, \quad (\text{A.4})$$

similarmente para la componente y .

De esta manera el operador derivada es

$$\frac{\partial}{\partial x} \simeq \frac{1}{2h} (\phi_{n+1} - \phi_{n-1}). \quad (\text{A.5})$$

Ahora se reescribe el operador A.4 $\frac{\partial}{\partial x}$ en su forma matricial,

$$\frac{\partial}{\partial x} \doteq \frac{1}{2h} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ \vdots & \ddots & -1 & 0 & \ddots \\ 0 & \dots & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (\text{A.6})$$

lo anterior puede verse como una matriz de tamaño $(N+1) \times (N+1)$ y el operador de Laplace en la coordenada x

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial^2 x} &\simeq \frac{1}{4h^2} [\phi_{n+2} - \phi_n - (\phi_n - \phi_{n-2})] \\ &= \frac{1}{4h^2} [\phi_{n+2} + \phi_{n-2} - 2\phi_n] \\ \Rightarrow \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right]_{mn} &\simeq \frac{1}{4h^2} [\delta_{m+2,n} + \delta_{m-2,n} - 2\delta_{m,n}]. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

y para cada coordenada se tiene

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)_{n_x, n'_x; n_y, n'_y}^2 = \delta_{n_y, n'_y} \frac{1}{4h^2} \{ \delta_{n_x, n'_x+2} + \delta_{n_x, n'_x-2} - 2\delta_{n_x, n'_x} \}, \quad (\text{A.8})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial y} \right)_{n_x, n'_x; n_y, n'_y}^2 = \delta_{n_x, n'_x} \frac{1}{4h^2} \{ \delta_{n_y, n'_y+2} + \delta_{n_y, n'_y-2} - 2\delta_{n_y, n'_y} \} \quad (\text{A.9})$$

de esta manera se puede construir el Laplaciano para cada una de las componentes apartir de la definición de la matriz (A.11):

$$\nabla^2 = \frac{1}{4h^2} \{ \mathbf{1} \otimes \mathbf{M} + \mathbf{M} \otimes \mathbf{1}, \} \quad (\text{A.10})$$

de donde \mathbf{M} corresponde al operador de Laplace definido para cada componente, por ejemplo $\frac{\partial^2}{\partial^2 x}$ se puede escribir como sigue

$$\mathbf{M} = \frac{\partial^2}{\partial^2 x} \doteq \frac{1}{4h^2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 1 & \ddots & \\ 1 & 0 & -2 & 0 & 1 & 0 & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & -2 & 0 & 1 & \ddots \\ \ddots & \ddots & 1 & 0 & -2 & 0 & 1 & 0 \\ \vdots & & 0 & 1 & 0 & -2 & 0 & \ddots \\ & & & \ddots & 1 & 0 & -2 & \ddots \\ 0 & \dots & & 0 & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

A.0.1. Condiciones de frontera

Para una base de pixeles o función característica ¹ χ toma la siguiente forma,

$$\chi_m(n) = \begin{cases} 0 & \text{si } n \neq m \\ 1 & \text{si } n = m \end{cases}$$

Lo anterior se puede reescribir como un vector de la forma,

$$\chi_m(n) \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow m \quad (\text{A.12})$$

donde el índice m recorre la posición del 1 del vector A.12 de tamaño N .

En lo siguiente aplicamos la definición de las condiciones de frontera, de donde una de las condiciones de frontera es la siguiente

$$\phi_{n_x, n_y} = 0 \quad (\text{A.13})$$

¹Aquí la función característica corresponde a la definición geométrica del sistema y también delimita las fronteras del sistema en cuestión

esto es cuando ϕ_{n_x, n_y} se encuentra fuera de la cavidad. Se incorpora la función característica χ :

$$\psi_{n_x, n_y} = \chi_{\Omega}(n_x, n_y) \phi_{n_x, n_y} \quad (\text{A.14})$$

finalmente modificamos (A.2) de manera que el Hamiltoniano que se obtiene es

$$-\nabla^2 \psi = E\psi \quad (\text{A.15})$$

o bien incorporando a ψ Ec. (A.14)

$$-\nabla^2 \chi_{\Omega} \phi = E \chi_{\Omega} \phi \quad (\text{A.16})$$

De esta manera el Hamiltoniano con las condiciones de frontera es de la forma

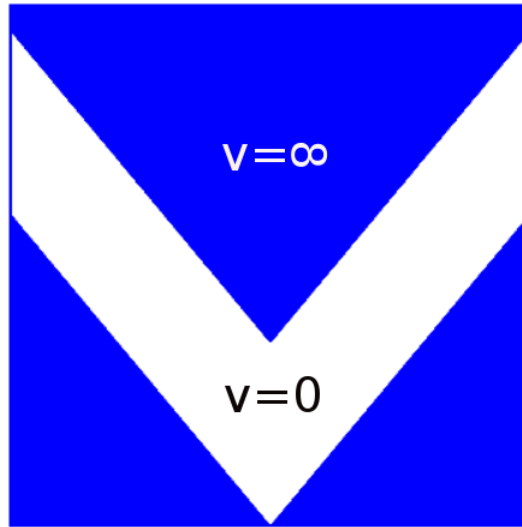


Figura A.1: Cavidad o guía de ondas doblada, la parte en color blanco cuando $v = 0$ corresponde a la parte de la función característica χ y es donde se resuelve el problema de eigenenergías y eigenvectores.

$$H_{n_x n'_x, n_y, n'_y} = \frac{1}{4\hbar^2} [\delta_{n_y, n'_y} \{ \delta_{n_x, n'_x+2} + \delta_{n_x, n'_x-2} - 2\delta_{n_x, n'_x} \}] \quad (\text{A.17})$$

$$+ \delta_{n_x, n'_x} \{ \delta_{n_y, n'_y+2} + \delta_{n_y, n'_y-2} - 2\delta_{n_y, n'_y} \}] \cdot \chi_{\Omega}(n_x, n_y) \chi_{\Omega}(n'_x, n'_y) \quad (\text{A.18})$$

notemos que ϕ es de la forma

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_{00} \\ \phi_{01} \\ \phi_{02} \\ \vdots \\ \phi_{0N} \\ \phi_{10} \\ \phi_{11} \\ \vdots \\ \phi_{1N} \\ \phi_{20} \\ \vdots \\ \phi_{2N} \\ \vdots \\ \phi_{NN} \end{pmatrix} \quad (\text{A.19})$$

Apéndice B

Función de autoenergía

Los eigenestados de una terminal rectangular de sección transversal uniforme (2D), son separables por el siguiente producto tensorial,

$$|\mathbf{k}\rangle = |k_x\rangle \otimes |k_y\rangle, \quad (\text{B.1})$$

Para nuestros fines vamos a definir los eigenestados transversales $|k_y\rangle$,

$$|k_y\rangle = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{n_y=1}^N \text{sen}(k_y n_y a) |n_y\rangle, \quad (\text{B.2})$$

considerando condiciones de frontera de pared dura (Dirichlet) en la dirección de \hat{y} , siendo $|m\rangle$ los estados transversales de la frontera, por lo que $\langle m|k_y\rangle = 0$. El estado $|k_y\rangle$ tiene la siguiente condición de cuantización,

$$\epsilon(k_y) = 2\Delta \cos(k_y a) \quad \text{con} \quad k_y(j) = \frac{j\pi}{N+1}, \quad 1 \leq j \leq N, \quad (\text{B.3})$$

y también se definen los eigenestados longitudinales $|k_x\rangle$ (como en las cadenas 1D),

$$|k_x\rangle = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{n_x=1}^N \text{sen}(k_x n_x a) |n_x\rangle, \quad (\text{B.4})$$

con eigenvalores,

$$\epsilon(k_x) = \epsilon_0 - 2\Delta \cos(k_x a). \quad (\text{B.5})$$

B.1. Función de Green para una terminal semi-infinita

Es bien sabido que cualquier función de Green puede ser expandida en términos de un conjunto completo de eigenfunciones,

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sum_{\alpha} \frac{\phi_{\alpha}(\mathbf{r})\phi_{\alpha}^*(\mathbf{r}')}{E - E_{\alpha} + i\eta}, \quad (\text{B.6})$$

donde,

$$H_0\phi_{\alpha}(\mathbf{r}) = E_{\alpha}\phi_{\alpha}(\mathbf{r}). \quad (\text{B.7})$$

o bien expresado en términos de los eigenestados $|k_x\rangle$ y $|k_y\rangle$ tenemos,

$$\begin{aligned} \langle m|\mathbf{G}|n\rangle &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{\langle \mathbf{m}|\mathbf{k}\rangle\langle \mathbf{k}|\mathbf{n}\rangle}{E + i\eta - \epsilon(k_x) - \epsilon(k_y)} \\ &= \sum_{k_y} \sum_{k_x} \frac{\langle m_y|k_y\rangle\langle k_y|n_y\rangle\langle m_x|k_x\rangle\langle k_x|n_x\rangle}{E + i\eta - \epsilon(k_x) - \epsilon(k_y)} \\ &= \sum_{k_y} \langle m_y|k_y\rangle\langle k_y|n_y\rangle \frac{2}{N_{inf}} \sum_{k_x} \frac{\text{sen}^2(x_x a)}{E + i\eta - \epsilon(k_x) - \epsilon(k_y)} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

en el borde $n_x = 1$. Separando la sumatoria de \sum_{k_x} ,

$$I(k_x) = \frac{2}{N_{inf}} \sum_{k_x} \frac{\text{sen}^2(x_x a)}{E + i\eta - \epsilon(k_x) - \epsilon(k_y)}, \quad (\text{B.9})$$

cuando $N_{inf} \rightarrow \infty$, entonces k_x es continua y la suma \sum_{k_x} puede ser reemplazada por una integral,

$$I(k_x) = \frac{a}{4\pi\Delta} \int_0^{\pi/a} dk_x \frac{2 - e^{2ik_x a} - e^{-2ik_x a}}{\chi - \cos(k_x a)}, \quad (\text{B.10})$$

donde se ha hecho la sustitución $\chi = \frac{E+i\eta-\epsilon(k_y)-\epsilon_0}{2\Delta}$. Para simplificar la notación vamos a definir el siguiente cambio de variable $\theta \equiv k_x a$, por lo que la integral toma la siguiente forma,

$$I(\theta) = \mathcal{N} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1 - e^{2i\theta}}{\chi - \cos(\theta)} d\theta, \quad (\text{B.11})$$

donde $\mathcal{N} = \frac{a}{4\pi\Delta}$. La integral B.11 puede ser resuelta realizando la siguiente sustitución $z = e^{i\theta}$ y $d\theta = \frac{dz}{iz}$ por lo que se convierte en una integral compleja, sobre el círculo unitario, dicha sustitución permite encontrar los polos que se encuentran dentro del círculo,

$$I(z) = \frac{-\mathcal{N}}{i} \oint_{|z|\leq 1} \frac{1 - z^2}{\frac{z^2}{2} - \chi z + \frac{1}{2}} dz, \quad (\text{B.12})$$

se encuentra que los polos son $z_{1,2} = \chi \pm \sqrt{\chi^2 - 1}$,

$$I(z) = \frac{-\mathcal{N}}{i} \oint_{|z| \leq 1} \frac{1 - z^2}{(z - z_1)(z - z_2)} dz, \quad (\text{B.13})$$

de donde únicamente el polo $z = \chi - \sqrt{\chi^2 - 1}$ esta dentro del círculo unitario si, $|\chi| \leq 1$. Se obtiene el correspondiente residuo,

$$\text{Res}(f(z), z_1) = \lim_{z \rightarrow z_1} f(z) = \frac{1 - z^2}{z_1 - z_2} = -\chi + \sqrt{\chi^2 - 1} \quad (\text{B.14})$$

de esta manera $F(z) = \frac{1 - z^2}{(z - z_1)(z - z_2)}$ y la integral es resuelta,

$$\begin{aligned} I(z) &= \frac{-\mathcal{N}}{i} \oint_{|z| \leq 1} f(z) dz \\ &= \frac{-\mathcal{N}}{i} 2\pi i \sum_{\alpha} \text{Res}(f(z), z_{\alpha}) \\ &= \frac{1}{2\Delta} \left\{ \chi - i\sqrt{1 - \chi^2} \right\} \\ &= \frac{1}{4\Delta^2} \left\{ E - \epsilon(k_y) - \epsilon_0 - i\sqrt{4\Delta^2 - (E - \epsilon(k_y) - \epsilon_0)} \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

de manera que la función de autoenergía es,

$$\langle m | \mathbf{G} | n \rangle = \frac{2}{N + 1} \sum_{k_y} \text{sen}(k_y m_y a) \frac{t_c^2}{4\Delta^2} \left\{ E - \epsilon(k_y) - \epsilon_0 - i\sqrt{4\Delta^2 - (E - \epsilon(k_y) - \epsilon_0)} \right\} \text{sen}(k_y n_y a) \quad (\text{B.16})$$

de aquí podemos ver que la función de autoenergía es compleja, esto permite separar en dos partes, la parte real y la parte imaginaria.

Bibliografía

- [1] A. K. Geim and K. S. Novoselov, “The rise of graphene,” *Nature Materials*, vol. **6**, pp. 183–191, 2007.
- [2] A. K. Geim, “Graphene: Status and prospects,” *Science*, vol. **324**, pp. 1530–1534, June 2009.
- [3] C. R. Dean, A. F. Young, I. Meric, C. Lee, L. Wang, S. Sorgenfrei, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Kim, K. L. Shepard, and J. Hone, “Boron nitride substrates for high-quality graphene electronics,” *Nat. Nano.*, vol. **5**, July (2010).
- [4] A. Kara, H. Enriquez, A. P. Seitsonen, L. L. Y. Voon, S. Vizzini, B. Aufray, and H. Oughaddou, “A review on silicene — new candidate for electronics,” *Surface Science Reports*, vol. **67**, no. 1, pp. 1 – 18, 2012.
- [5] H. Liu, A. T. Neal, Z. Zhu, Z. Luo, X. Xu, D. Tománek, and P. D. Ye, “Phosphorene: An unexplored 2d semiconductor with a high hole mobility,” *ACS Nano*, vol. **8**, no. 4, pp. 4033–4041, 2014. PMID: 24655084.
- [6] C.-C. Liu, H. Jiang, and Y. Yao, “Low-energy effective hamiltonian involving spin-orbit coupling in silicene and two-dimensional germanium and tin,” *Phys. Rev. B*, vol. **84**, p. 195430, Nov 2011.
- [7] Y. Xu, B. Yan, H.-J. Zhang, J. Wang, G. Xu, P. Tang, W. Duan, and S.-C. Zhang, “Large-gap quantum spin hall insulators in tin films,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **111**, p. 136804, Sep 2013.
- [8] M. Polini, F. Guinea, M. Lewenstein, H. C. Manoharan, and V. Pellegrini, “Artificial honeycomb lattices for electrons, atoms and photons,” *Nature nanotechnology*, vol. **8**, no. 9, pp. 625–633, 2013.
- [9] 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,” *Phys. Rev. B*, vol. **82**, p. 014301, Jul 2010.
- [10] T. D. Visser, D. Lenstra, and H. F. Schouten, eds., *‘Hexagon-type’ photonic crystal slabs based on SOI*, (Amsterdam, the Netherlands), Vrije Universiteit Amsterdam, 2002.

-
- [11] D. Cassagne, C. Jouanin, and D. Bertho, “Photonic band gaps in a two-dimensional graphite structure,” *Phys. Rev. B*, vol. **52**, pp. R2217–R2220, Jul 1995.
- [12] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*. Wiley, 2005.
- [13] 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,” *Phys. Rev. B*, vol. **82**, p. 094308, Sep 2010.
- [14] F. D. M. Haldane and S. Raghu, “Possible realization of directional optical waveguides in photonic crystals with broken time-reversal symmetry,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **100**, p. 013904, Jan 2008.
- [15] E. N. Bulgakov, P. Exner, K. N. Pichugin, and A. F. Sadreev, “Multiple bound states in scissor-shaped waveguides,” *Phys. Rev. B*, vol. **66**, p. 155109, Oct 2002.
- [16] P. Exner and P. Seba, “Bound states in curved quantum waveguides,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. **30**, no. 11, pp. 2574–2580, (1989).
- [17] P. Exner, “Resonances in curved quantum wires,” *Physics Letters A*, vol. **141**, no. 5, pp. 213 – 216, 1989.
- [18] J. Goldstone and R. L. Jaffe, “Bound states in twisting tubes,” *Phys. Rev. B*, vol. **45**, pp. 14100–14107, 1992.
- [19] R. L. Schult, D. G. Ravenhall, and H. W. Wyld, “Quantum bound states in a classically unbound system of crossed wires,” *Phys. Rev. B*, vol. **39**, pp. 5476–5479, 1989.
- [20] E. Sadurní and W. P. Schleich, “Conformal mapping and bound states in bent waveguides,” *AIP Conference Proceedings*, vol. **1323**, no. 1, pp. 283–295, 2010.
- [21] 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,” *Phys. Rev. E*, vol. **87**, p. 042912, Apr 2013.
- [22] J. P. Carini, J. T. Londergan, K. Mullen, and D. P. Murdock, “Bound states and resonances in waveguides and quantum wires,” *Phys. Rev. B*, vol. **46**, pp. 15538–15541, Dec 1992.
- [23] J. P. Carini, J. T. Londergan, K. Mullen, and D. P. Murdock, “Multiple bound states in sharply bent waveguides,” *Phys. Rev. B*, vol. **48**, pp. 4503–4515, Aug 1993.
- [24] J. P. Carini, J. T. Londergan, D. P. Murdock, D. Trinkle, and C. S. Yung, “Bound states in waveguides and bent quantum wires. i. applications to waveguide systems,” *Phys. Rev. B*, vol. **55**, pp. 9842–9851, Apr 1997.
- [25] E. Abrahams, *50 years of Anderson localization*. World Scientific, London, 2010.

- [26] E. Sadurní and J. A. Méndez-Bermúdez, “Photonic structures with disorder immunity,” *arXiv*, 1302.5835, feb 2013.
- [27] S. J. Tans, M. H. Devoret, H. Dai, A. Thess, R. E. Smalley, L. J. Geerligs, and C. Dekker, “Individual single-wall carbon nanotubes as quantum wires,” *Nature*, vol. **386**, pp. 474–477, 1997.
- [28] J. Appenzeller, J. Knoch, M. T. Bjork, H. Riel, H. Schmid, and W. Riess, “Toward nanowire electronics,” *IEEE Transactions on electron devices*, vol. **55**, no. 11, pp. 2827–2845, 2008.
- [29] S. Iijima, “Helical microtubules of graphitic carbon,” *nature*, vol. **354**, no. 6348, pp. 56–58, 1991.
- [30] S. Iijima and T. Ichihashi, “Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter,” *Nature*, vol. **363**, pp. 603–605, 1993.
- [31] J. Knight, T. Birks, P. S. J. Russell, and D. Atkin, “All-silica single-mode optical fiber with photonic crystal cladding,” *Optics letters*, vol. **21**, no. 19, pp. 1547–1549, 1996.
- [32] D. Bohm, *Quantum Theory*. Dover Books on Physics, Dover Publications, 2012.
- [33] C.-K. Wang, “Quantum bound states in a ballistic quantum channel with a multiple double-bend discontinuity,” *Semiconductor Science and Technology*, vol. **10**, pp. 1131–1138, aug 1995.
- [34] C.-K. Wang, K.-F. Berggren, and Z.-L. Ji, “Quantum bound states in a double-bend quantum channel,” *Journal of Applied Physics*, vol. **77**, p. 2564, aug 1995.
- [35] A. Weisshaar, J. Lary, S. M. Goodnick, and V. K. Tripathi, “Analysis of discontinuities in quantum waveguide structures,” *JAppl. Phys. Lett.*, vol. **55**, p. 2114, November 1989.
- [36] A. Weisshaar, J. Lary, S. M. Goodnick, and V. K. Tripathi, “Analysis and modeling of quantum waveguide structures and devices,” *J. Appl. Phys.*, vol. **70**, p. 355, March 1991.
- [37] H. J. Stoeckmann, *Quantum Chaos an introduction*. Cambridge University Press, (Edimburg Building Cambridge CB2 2RU UK, 2000).
- [38] E. Sadurní, E. Rivera-Mociños, and A. Rosado, “Discrete symmetry in graphene: the dirac equation and beyond,” *Revista mexicana de física*, vol. **61**, no. 3, pp. 170–181, 2015.
- [39] R. V. Churchill and B. J. D., *Complex Variables and Applications*. McGraw-Hill Higher Education, 2009.
- [40] I. Gradshteyn and I. Ryzhik, *Tables of integrals, series and products*. Academic Press, 2007.
- [41] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*. (Wiley, New York), 3 ed., 1999.
- [42] H. Goldstein, C. P. Poole, and J. L. Safko, *Classical Mechanics*. Adisson Wesley, 2002.

- [43] E. Rivera-Mociños, “Descripción efectiva de estados atrapados en una guía de onda doblada,” *Tópicos especiales en física: Encuentro de estudiantes de posgrado*, 2016.
- [44] P. Markos and C. M. Soukoulis, *Wave propagation: from electrons to photonic crystals and left-handed materials*. Princeton University Press, 2008.
- [45] R. Danneau, F. Wu, M. F. Craciun, S. Russo, M. Y. Tomi, J. Salmilehto, A. F. Morpurgo, and P. J. Hakonen, “Evanescence wave transport and shot noise in graphene: Ballistic regime and effect of disorder,” *Journal of Low Temperature Physics*, vol. **153**, no. 5, pp. 374–392, 2008.
- [46] E. P. Wigner, “Resonance reactions and anomalous scattering,” *Phys. Rev.*, vol. **70**, pp. 15–33, Jul 1946.
- [47] E. P. Wigner, “Resonance reactions,” *Phys. Rev.*, vol. **70**, pp. 606–618, Nov 1946.
- [48] F. J. Dyson, “Statistical theory of the energy levels of complex systems. i,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. **3**, no. 1, pp. 140–156, 1962.
- [49] C. Mahaux and H. A. Weidenmüller, “Shell-model approach to nuclear reactions.,” *Soft Matter*, vol. 1, 1969.
- [50] T. Kottos and M. Weiss, “Statistics of resonances and delay times: A criterion for metal-insulator transitions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **89**, p. 056401, Jul 2002.
- [51] F. Steinbach, A. Ossipov, T. Kottos, and T. Geisel, “Statistics of resonances and of delay times in quasiperiodic schrödinger equations,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **85**, pp. 4426–4429, Nov 2000.
- [52] R. Landauer, “Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices,” *Phil. Mag.*, vol. **21**, p. 863, 1970.
- [53] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas, “Generalized many-channel conductance formula with application to small rings,” *Phys. Rev. B*, vol. **31**, pp. 6207–6215, (1985).
- [54] Y. Blanter and M. Büttiker, “Shot noise in mesoscopic conductors,” *Physics Reports*, vol. **336**, no. 1–2, pp. 1 – 166, 2000.
- [55] D. S. Fisher and P. A. Lee, “Relation between conductivity and transmission matrix,” *Phys. Rev. B*, vol. **23**, pp. 6851–6854, Jun 1981.
- [56] E. Yablonovitch, “Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **58**, p. 2059, 1987.
- [57] J. Albert, C. Jouanin, D. Cassagne, and D. Monge, “Photonic crystal modelling using a tight-binding wannier function method,” *Optical and Quantum Electronics*, vol. **34**, p. 251, 2002.
- [58] I. Bloch, “Ultracold quantum gases in optical lattices,” *Nature Physics*, vol. **1**, pp. 23–30, Oct 2005.

- [59] M. K. Oberthaler, R. Abfalterer, S. Bernet, J. Schmiedmayer, and A. Zeilinger, “Atom waves in crystals of light,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **77**, pp. 4980–4983, Dec 1996.
- [60] F. Gesztesy and B. Simon, “m-functions and inverse spectral analysis for finite and semi-infinite jacobi matrices,” *Journal D’Analyse mathématique*, vol. **73**, pp. 267–297, 1997.
- [61] G. H. Wannier, “The structure of electronic excitation levels in insulating crystals,” *Physical Review*, vol. **52**, no. 3, p. 191, 1937.
- [62] N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, and D. Vanderbilt, “Maximally localized wannier functions: Theory and applications,” *Reviews of Modern Physics*, vol. **84**, no. 4, p. 1419, 2012.
- [63] A. F. Soria, *Física nuclear y de partículas*. Universitat de València, 2011.
- [64] A. Richter, *Playing billiards with microwaves-quantum manifestations of classical chaos*. Springer, 1999.
- [65] J. T. Londergan, J. P. Carini, and D. P. Murdock, *Binding and scattering in two-dimensional systems: applications to quantum wires, waveguides and photonic crystals*, vol. **60**. Springer Science & Business Media, 2003.
- [66] P. Exner and H. Kovarík, *Quantum waveguides*. Springer, 2015.
- [67] M. Moshinsky and A. Szczepaniak, “The Dirac oscillator,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. **22**, pp. L817–L819, sep 1989.
- [68] J. Benítez, R. P. Martínez y Romero, H. N. Núñez Yépez, and A. L. Salas-Brito, “Solution and hidden supersymmetry of a dirac oscillator,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **64**, pp. 1643–1645, Apr 1990.
- [69] A. D. Alhaidari, “Solution of the relativistic dirac-morse problem,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **87**, p. 210405, Nov 2001.
- [70] R. Lisboa, M. Malheiro, A. S. de Castro, P. Alberto, and M. Fiolhais, “Pseudospin symmetry and the relativistic harmonic oscillator,” *Phys. Rev. C*, vol. **69**, p. 024319, Feb 2004.
- [71] A. Bermudez, M. A. Martin-Delgado, and A. Luis, “Chirality quantum phase transition in the dirac oscillator,” *Phys. Rev. A*, vol. **77**, p. 063815, Jun 2008.
- [72] M. Hamzavi, M. Eshghi, and S. M. Ikhdair, “Effect of tensor interaction in the dirac-attractive radial problem under pseudospin symmetry limit,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. **53**, no. 8, pp.–, 2012.
- [73] J. Munárriz, F. Domínguez-Adame, and R. Lima, “Spectroscopy of the Dirac oscillator perturbed by a surface delta potential,” *Physics Letters A*, vol. **376**, pp. 3475–3478, oct 2012.

- [74] J. Grineviciute and D. Halderson, “Relativistic \mathbf{R} matrix and continuum shell model,” *Physical Review C*, vol. **85**, p. 054617, may 2012.
- [75] A. Faessler, V. I. Kukulin, and M. A. Shikhalev, “Description of intermediate- and short-range NN nuclear force within a covariant effective field theory,” *Annals Phys.*, vol. **320**, pp. 71–107, 2005.
- [76] V. V. Dodonov, ““nonclassical” states in quantum optics: a ‘squeezed’ review of the first 75 years,” *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, vol. **4**, pp. R1–R33, feb 2002.
- [77] L. Lamata, J. León, T. Schätz, and E. Solano, “Dirac equation and quantum relativistic effects in a single trapped ion,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **98**, p. 253005, Jun 2007.
- [78] S. Longhi, “Photonic realization of the relativistic dirac oscillator,” *Optics Letters*, vol. **35**, p. 1302, apr 2010.
- [79] J. A. Franco-Villafañe, E. Sadurní, S. Barkhofen, U. Kuhl, F. Mortessagne, and T. H. Seligman, “First experimental realization of the dirac oscillator,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **111**, p. 170405, Oct 2013.
- [80] E. Sadurní, “The dirac moshinsky oscillator: theory and applications,” *AIP Conference Proceedings*, vol. **1334**, no. 1, pp. 249–290, 2011.
- [81] E. Samuel Reich, “Graphene knock-offs probe ultrafast electronics,” *Nature*, vol. **497**, pp. 422–423, may 2013.
- [82] K. K. Gomes, W. Mar, W. Ko, F. Guinea, and H. C. Manoharan, “Designer dirac fermions and topological phases in molecular graphene,” *Nature*, vol. **483**, pp. 306–310, mar 2012.
- [83] N. M. Atakishiev and S. K. Suslov, “Difference analogs of the harmonic oscillator,” *Theoretical and Mathematical Physics*, vol. **85**, pp. 1055–1062, oct 1990.
- [84] N. M. Atakishiyev, G. S. Pogosyan, L. E. Vicent, and K. B. Wolf, “Finite two-dimensional oscillator: I. the cartesian model,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. **34**, pp. 9381–9398, nov 2001.
- [85] R. R. Aldinger, A. Bohm, P. Kielanowski, M. Loewe, P. Magnollay, N. Mukunda, W. Drechsler, and S. R. Komy, “Relativistic rotator. i. quantum observables and constrained hamiltonian mechanics,” *Phys. Rev. D*, vol. **28**, pp. 3020–3031, Dec 1983.
- [86] A. Bohm, M. Loewe, L. C. Biedenharn, and H. van Dam, “Relativistic rotator. ii. the simplest representation spaces,” *Phys. Rev. D*, vol. **28**, pp. 3032–3040, Dec 1983.
- [87] R. R. Aldinger, A. Bohm, P. Kielanowski, M. Loewe, and P. Moylan, “Relativistic rotator. iii. contraction limits and experimental justification,” *Phys. Rev. D*, vol. **29**, pp. 2828–2837, Jun 1984.

- [88] R. R. Aldinger, “Dynamical structure of the quantum relativistic rotator and analogy to rohrlich’s version of the quantum relativistic string,” *Phys. Rev. D*, vol. **32**, pp. 1503–1511, Sep 1985.
- [89] 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*, vol. **15**, p. 123014, dec 2013.
- [90] V. Drinfeld, “Proceedings of the international congress of mathematicians,” *Quantum Groups*, pp. 798–819, 1987.
- [91] J. C. M. John W. Milnor, “On the structure of hopf algebras,” *Annals of Mathematics*, vol. **81**, no. 2, pp. 211–264, 1965.
- [92] L. C. Biedenharn, “The quantum group $su_q(2)$ and a q -analogue of the boson operators,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. **22**, no. 18, p. L873, 1989.
- [93] A. J. Macfarlane, “On q -analogues of the quantum harmonic oscillator and the quantum group $su_q(2)$,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. **22**, no. 21, p. 4581, 1989.
- [94] J. Avron, P. H. M. v. Mouche, and B. Simon, “On the measure of the spectrum for the almost Mathieu operator,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. **132**, pp. 103–118, aug 1990.
- [95] M. Y. Azbel, “Energy spectrum of a conduction electron in a magnetic field,” *Sov Phys JETP-USSR*, vol. **19**, no. 3, pp. 634–645, 1964.
- [96] D. R. Hofstadter, “Energy levels and wave functions of bloch electrons in rational and irrational magnetic fields,” *Phys. Rev. B*, vol. **14**, pp. 2239–2249, Sep 1976.
- [97] V. I. Man’ko, G. Marmo, S. Solimeno, and F. Zaccaria, “Physical nonlinear aspects of classical and quantum q -oscillators,” *International Journal of Modern Physics A*, vol. **08**, no. 20, pp. 3577–3597, 1993.
- [98] V. Man’ko and G. Tino, “Experimental limit on the blue shift of the frequency of light implied by a q -nonlinearity,” *Physics Letters A*, vol. **202**, no. 1, pp. 24 – 27, 1995.
- [99] V. I. Man’ko and R. V. Mendes, “On the nonlinearity interpretation of q - and f -deformation and some applications,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. **31**, no. 28, p. 6037, 1998.
- [100] S. Mancini, V. I. Man’ko, and P. Tombesi, “Photon-number tomography and q -oscillator formalism,” *Journal of Russian Laser Research*, vol. **21**, no. 4, pp. 317–322, 2000.
- [101] E. Sadurní and E. Rivera-Mociños, “Fractal position spectrum for a class of oscillators,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. **48**, no. 40, p. 405301, 2015.



BUAP

MEMORANDUM

Para:	Dr. Francois Leyvaz Waltz, (Presidente). Dr. Felipe Pérez Rodríguez. Dr. Alfonso Rosado Sánchez. Dr. Antonio Méndez Blas. Dr. Emerson Leao Sadurní Hernández, (Asesor).
De:	Dr. Juan Francisco Rivas Silva, Director
Asunto:	Se cita al examen de Doctorado en Ciencias (Física) Eladio Rivera Mociños.
Fecha:	Viernes 6 de enero de 2017

Me permito informarles que el Comité Académico del IFUAP, los ha designado integrantes del Comité para el EXAMEN DE GRADO de Doctorado en Ciencias (Física) del **M.C. ELADIO RIVERA MOCIÑOS**, con su tesis cuyo título es: **"Propagación y transporte en guías de ondas desordenadas con esquinas"**, que presentará el día lunes 23 de enero de 2017 a las 10:00hrs. en el auditorio del IFUAP.


Dr. Juan Francisco Rivas Silva
DIRECTOR



Instituto de Física
"Ing. Luis Rivera
Terrazas"

Av. San Claudio esq. 18 sur, edif 110 A, B y C.
Ciudad Universitaria, Col. San Manuel,
Puebla, Pue. C.P. 72570
01(222) 2295610, Fax: ext. 5611