

Universidad Tecnológica de la Mixteca

Métodos algebraicos en el cálculo de propagadores cristalinos, con aplicaciones fotónicas

TESIS

Que para obtener el título de

Ingeniero en Física Aplicada

Presenta:

José Guadalupe Santiago García

Director:

Dr. Raúl Juárez Amaro

Codirector:

Dr. Emerson Sadurní Hernández

Oaxaca, México.
Febrero, 2021

Dedicatoria

Con cariño para mi mamá, papá, hermana y abuelos

Agradecimientos

La elaboración de esta tesis y, en general, el desarrollo y la conclusión de mis estudios es el resultado de la ayuda de muchas personas a las que les quiero expresar mis más sinceros agradecimientos. No hay otra forma que empezar por agradecer a mi mamá, Teresa, y a mi papá, Juan, por darme lo necesario para llegar hasta aquí. Gracias mamá y papá por todo su trabajo, ¡lo logramos!. Mi hermana Rosa también ha sido una fuente de apoyo incondicional, gracias Rosi. Los amo.

Quiero agradecer a todos los profesores que me instruyeron en el transcurso de mi carrera. Especialmente, agradezco al prof. Octavio por sus clases tan llenas de vida que nutrieron mi curiosidad. Sin duda, el prof. Octavio ha tenido un gran impacto en mí, gracias profesor. Los profesores que a lo largo de estos años han asumido el cargo de la Jefatura de Carrera me han respaldado decididamente. Agradezco al prof. Santana por apoyarme al inicio de mi carrera y por gestionar la beca de alimentos de la que fui beneficiario, otorgada por la empresa “Cervezas Modelo en la Mixteca, S. A. de C. V.”, a cuyos directivos también agradezco. De igual forma, el prof. Salomón intervino a mi favor en diversas circunstancias; así también lo ha hecho el prof. Rafael, recientemente, al seguir de cerca mi proceso de titulación.

Gracias a la UTM por todas las herramientas y programas educativos de diversa índole provistos para mi desarrollo profesional y para el desempeño de numerosas actividades.

A mitad de carrera, el prof. Víctor me recibió en el grupo de óptica cuántica (GOC) de la Facultad de Ciencias de la UNAM. En estas líneas le agradezco por hacer posible mi visita; aprendí mucho durante mis estancia en su laboratorio. Agradezco también a los miembros del GOC por su amistad y por explicarme varias cosas; experimentar con fotones es fascinante.

Al prof. Sadurní le agradezco por la oportunidad que me ha dado para desarrollar este proyecto, por todos los comentarios que me ha hecho para llegar a buen puerto, y, en general, por todo lo que me ha enseñado.

Estoy especialmente agradecido con la familia De los Santos Gómez. La sra. Rosalia me abrió las puertas de su hogar y me trató como uno más de su familia con la bondad y amabilidad que la caracterizan, muchas gracias sra. Rosi. Gracias por todo Sam, Anahí y Edith; también agradezco a su padre, su legado hizo esto posible. Además, doy las gracias a la mamá de la sra. Rosi por permitirme acompañarlas, y a su hermana por las atenciones brindadas. A todas ustedes, y a sus familias, les deseo lo mejor.

Conocí a la sra. Rosi gracias al profesor Tello. Él, junto con su esposa, la profa.

Verónica, hicieron posible mi estancia en Puebla, gracias a los dos y a su hija Eva. Y conocí al prof. Tello gracias a Gustavo. Gracias Gustavo por ayudarme en reiteradas ocasiones.

A lo largo de esta etapa conviví con much@s amig@s. A *tod@s* ell@s les agradezco por las tantas vivencias que hicieron agradable mi estancia en la UTM.

También agradezco a los profesores Rafael, Ramón, Raúl y Ricardo por el tiempo que han destinado para la lectura de estas páginas y por las observaciones que me comunicaron para mejorar este trabajo.

Para terminar, debo decir que el resto de mi familia, mis abuel@s, mis tí@s y prim@s también me han ayudado de distintas maneras para hacer esto posible, no quiero terminar sin agradecerles por todo querida familia.

Gracias a todos.

José G. Santiago García
Oaxaca, México
Febrero, 2021

Índice de figuras

2.1. Cortina de constante dieléctrica ϵ_1 sumergida en un medio de permitividad ϵ_2	22
2.2. Pozo de potencial efectivo correspondiente a una cortina de constante dieléctrica ϵ_1 sumergida en un medio de permitividad menor, ϵ_2	24
2.3. Dos cortinas dieléctricas de ancho L y L' y profundidad de piel λ y λ' , respectivamente, separadas una distancia d	25
2.4. Cristal fotónico 1D.	27
3.1. Cadena unidimensional.	39
3.2. Acoplamientos en función de la posición según el valor de los parámetros alfa y delta.	50
4.1. Dinámica de pulsos en un cristal SU(2) libre.	68
4.2. Dos partículas en un cristal SU(2).	72
4.3. Tapices sobre espacio-tiempo SU(2).	73
4.4. Dispersión de ondas Gaussianas monocromáticas en la cadena SU(2) libre.	74
4.5. Emergencia de oscilaciones de Bloch.	76
4.6. Oscilaciones de Bloch asimétricas SU(2).	76
4.7. Tapices de oscilaciones de Bloch sobre espacio-tiempo en cristal SU(2).	77
4.8. Dispersión de ondas Gaussianas monocromáticas en una cadena SU(2) con campo externo.	78
4.9. Propagación de pulsos en una cadena infinita SU(1,1) en ausencia de campo externo.	80
4.10. Campo en el intervalo $(0, \sqrt{2 \alpha })$ sobre la cadena infinita SU(1,1).	83
4.11. Oscilaciones de Bloch SU(1,1).	84
4.12. Propagación de pulsos en una cadena SU(1,1) bajo un campo en el intervalo no oscilatorio $(0, \sqrt{2 \alpha })$	85
4.13. Oscilaciones de Bloch asimétricas SU(1,1).	85
4.14. Oscilaciones de Bloch asimétricas SU(1,1) desde una posición más cercana al origen.	86
4.15. Partícula libre en una cadena de Heisenberg.	91
4.16. Oscilaciones de Bloch-Heisenberg.	93
5.1. Multiplete genérico de SU(3).	104

5.2. Multipletes de $SU(3)$	105
5.3. Multipletes de $SO(4)$	107
5.4. Propagación de pulsos en un cristal inhomogéneo $SO(4)$	110

Índice de tablas

6.1. Propagadores cristalinos unidimensionales.	112
---	-----

Contenido

Dedicatoria	3
Agradecimientos	5
Resumen	13
Abstract	15
1. Introducción	17
1.1. Motivación para estudiar cristales artificiales	17
1.2. Evolución de paquetes y propagadores	18
1.3. Nuevos problemas	18
2. Realización de cristal fotónico con medios dieléctricos	21
2.1. Ecuación de Schrödinger efectiva para una cortina dieléctrica, a partir de las ecuaciones de Maxwell	21
2.2. Estimación de acoplamientos y energías en sitio para dos pozos de potencial	25
2.3. Generalización a cadenas de cortinas dieléctricas	27
3. Formalismo de propagadores discretos unidimensionales	31
3.1. Ecuación de Schrödinger discreta y función de Green discreta	31
3.2. Ecuaciones de Mello - Moshinsky discretas	34
3.3. Problemas resolubles a través de linealización algebraica	37
3.3.1. Solución a la Ecuación de Heisenberg lineal para tres operadores con coeficientes independientes del tiempo: N , T y T^\dagger	37
3.3.2. Solución a la Ecuación de Heisenberg lineal para tres operadores con coeficientes independientes del tiempo: N , A y A^\dagger	41
3.3.3. Solución a la Ecuación de Heisenberg lineal para tres operadores con coeficientes dependientes del tiempo: N , A y A^\dagger	44
3.3.4. Acoplamientos y campos en función de la posición en el cristal	49
3.3.5. Ecuaciones de recurrencia en general	52
3.4. Teoría de grupos semisimples $SU(2)$ y $SU(1,1)$	55
3.4.1. Constantes de estructura, álgebra de Cartan y forma de Killing	55
3.4.2. Álgebra de Heisenberg como caso degenerado	58
3.4.3. Aplicación a las cadenas de amarre fuerte	59

3.4.4. Solución a las recurrencias con la función D de Wigner	61
4. Análisis de propagación de pulsos	67
4.1. Cadena finita $SU(2)$	67
4.1.1. Partícula libre $SU(2)$	67
4.1.2. Partícula en presencia de un campo externo $SU(2)$	75
4.2. Cadena infinita $SU(1,1)$	79
4.2.1. Partícula libre $SU(1,1)$	79
4.2.2. Partícula en presencia de un campo externo $SU(1,1)$	82
4.3. Cadena semi-infinita Heisenberg	87
4.3.1. Partícula libre Heisenberg	87
4.3.2. Partícula en presencia de un campo externo Heisenberg	91
5. Hacia redes bidimensionales	97
5.1. Álgebra de Cartan para grupos semisimples de rango 2	97
5.2. Hamiltoniano bilineal soluble general y ecuaciones de movimiento	99
5.3. Multipletes de $SU(3)$ y redes triangulares	101
5.4. Multipletes de $so(4) = so(3) \oplus so(3)$	105
5.5. Recurrencias generales del propagador	107
6. Conclusiones	111
6.1. Resultados obtenidos, sumario	111
6.2. El futuro bidimensional, resultados esperados	113
A. Serie de Dyson como solución al problema dependiente del tiempo	115
Bibliografía	117

Resumen

Se presenta una descripción teórica de un cristal fotónico 1D hecho de cortinas dieléctricas: se dan las expresiones correspondientes para acoplamientos dependientes de la posición y potenciales en sitio, proporcionando un sistema en el que nuestras predicciones pueden ser probadas, como se reportó en [1]. La viabilidad de un cristal fotónico con propiedades dependientes del tiempo se discute brevemente. Las ecuaciones de movimiento para los operadores de red se resuelven para Hamiltonianos con y sin dependencia temporal. Se estudian cadenas finitas, infinitas y semi-infinitas no homogéneas con los correspondientes grupos dinámicos $SU(2)$, $SU(1,1)$ y Heisenberg y se calculan los propagadores cristalinos asociados en forma cerrada mediante las ecuaciones de Mello-Moshinsky discretas, en el caso de los grupos semisimples, y mediante otras técnicas algebraicas de carácter estándar para la cadena de Heisenberg. Se discuten las propiedades de propagación para cada cadena y se encuentra que, cuando se tiene en cuenta un potencial lineal, se producen oscilaciones de Bloch en este tipo de cristales unidimensionales (no homogéneos). La dinámica resultante contrasta con la del Hamiltoniano de amarre fuerte estándar [2]. Renacimientos, transporte de estados, alfombras cuánticas así como propagación de Gaussianas son susceptibles de discusión para la cadena $SU(2)$. Finalmente, allanamos el camino hacia los propagadores cristalinos exactos de redes no homogéneas 2D con $SU(3)$ y $SO(4)$ como grupos dinámicos.

Abstract

A theoretical description of a 1D photonic crystal made of dielectric slabs is presented: the corresponding expressions for position-dependent couplings and on-site potentials are given, providing a system in which our predictions may be tested, as reported in [1]. The feasibility of a photonic crystal with time-dependent properties is briefly discussed. Equations of motion for lattice operators are solved for Hamiltonians with and without time dependence. Inhomogeneous finite, infinite and semi-infinite chains with corresponding $SU(2)$, $SU(1,1)$ and Heisenberg dynamical groups are studied and the associated crystalline propagators are calculated by means of the discrete Mello-Moshinsky equations, in the case of semisimple groups, and by other standard algebraic techniques for the Heisenberg chain. Propagation properties are discussed for each chain and it is found that, when a linear potential is taken into account, Bloch oscillations take place in this type of one-dimensional lattices (inhomogeneous). The resulting dynamics contrast with that of the standard tight-binding Hamiltonian [2]. Revivals, transport of states, quantum carpets as well as propagation of Gaussians, are susceptible of discussions for the $SU(2)$ chain. Finally, we pave the road toward exact crystalline propagators of 2D inhomogeneous lattices with $SU(3)$ and $SO(4)$ as dynamical groups.

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación para estudiar cristales artificiales

Una de las primeras aplicaciones de la mecánica cuántica se dio en el estudio de cristales, aquellos materiales cuyos constituyentes están altamente ordenados, siendo un ejemplo bien conocido el resultado sobre el sorprendente comportamiento de los electrones en esos entornos periódicos [3]. Sin duda, la física del estado sólido se benefició enormemente de la entonces nueva ciencia con el desarrollo de la teoría de bandas de los sólidos, lo que a su vez condujo a la revolución electrónica.

Un siglo casi ha pasado desde el establecimiento de dicha teoría física que ahora ha sido verificada muchas veces de forma exitosa. No obstante, el interés por esos sistemas físicos no ha desaparecido, al contrario. Aunque originalmente se tenía en mente a electrones en átomos, hoy en día se han concebido una gran variedad de sistemas experimentales análogos. Estructuras cristalinas han sido creadas de diferentes elementos, gobernados por leyes dinámicas equivalentes, que van desde ondas electromagnéticas en medios dieléctricos periódicos (cristales fotónicos) [4–6], cristales fonónicos [7], [8], así como microondas interactuando con discos cerámicos dispuestos en arreglos ingeniosamente diseñados [9–12], y, más recientemente, ondas mecánicas en resonadores conectados por barras de aluminio [13]. Otro ejemplo interesante lo constituyen los metamateriales cuánticos [14], en los que las propiedades efectivas dependen directamente del estado de algún subsistema cuántico. Por otro lado, la litografía por haz de electrones, una técnica bien establecida, juega un papel clave en el diseño de estructuras periódicas en una dimensión a escala nanométrica [15]. Entre los ejemplos más refinados, que llegan al nivel de manipular unos cuantos átomos, figuran los condensados de Bose-Einstein en redes de luz [16–18], y de varios gases ultrafríos en trampas periódicas [19–22]. En varios estudios esto ha conducido, con toda la intención, a la emulación de dinámica microscópica con el objetivo de estudiar novedosas teorías de la materia a escala macroscópica y así ganar acceso a fenómenos que ocurren a ese nivel (atómico y molecular), como es el caso de los puntos de Dirac en el grafeno [23, 24].

La naturaleza ondulatoria de la materia y la validez de la aserción opuesta, en el marco de evolución unitaria, nos permite adoptar una visión unificada de la dinámica de todos estos sistemas y por lo tanto un formalismo único ha sido

visualizado para el estudio de estados no estacionarios [2, 25, 26]. Ahora es evidente que una descripción exacta de la dinámica de paquetes de ondas en medios cristalinos con distintas topologías se necesita. En este contexto, el interés en la propagación de ondas en cristales naturalmente nos lleva a considerar la acción de un campo externo actuando sobre ellos. Así, desde ondas mecánicas en ambientes clásicos hasta electrones en la materia (sólidos), el comportamiento ondulatorio bajo la acción de un campo externo es de gran interés. Por lo tanto, las contribuciones teóricas en este sentido son apreciadas hoy más que nunca. Lo anterior ha conducido naturalmente al estudio de estos fenómenos desde un enfoque de propagadores.

1.2. Evolución de paquetes y propagadores

Una descripción exacta de la dinámica de ondas en cristales con dependencia explícita del tiempo tiene sus raíces en el trabajo fundamental de Mello y Moshinsky [27] y Quesne y Moshinsky [28]. Ellos demostraron que la representación unitaria de transformaciones canónicas no lineales, y por lo tanto el propagador, en mecánica cuántica, se obtiene fácilmente de la solución de un conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas (este conjunto de ecuaciones diferenciales después es transformado en otro, ahora de relaciones de recurrencia acopladas, cuando uno considera al espacio discreto) y que en el caso lineal (oscilador armónico) están representadas por núcleos Gaussianos, respectivamente.

Recientemente, las ecuaciones de Mello-Moshinsky (MM), como se conocen [29], han sido generalizadas al ámbito del espacio discreto [26], el cual corresponde físicamente a estructuras cristalinas. Allí se demostró que el estudio de las representaciones espaciales de una nueva clase de transformaciones canónicas no lineales conduce a un nuevo tipo de ecuaciones MM: las ecuaciones de Mello-Moshinsky discretas. La amplia aplicabilidad de éstas últimas se ha ejemplificado con el cálculo del propagador para la escalera de Wannier-Stark a una banda [2]. Fenómenos como conos de luz efectivos en espacio-tiempo fueron descubiertos. Este problema fue iluminado aún más mediante la introducción de campos externos dependientes del tiempo, cuya solución (a través de las MM discretas) demostró superar en efectividad a la serie de Dyson [25] y que, entre otras cosas, permite controlar la forma de las distribuciones resultantes pues las cáusticas se pueden poner en función del campo externo. Desde entonces, un nuevo conjunto de problemas ha sido de considerable interés, entre ellos el de propagación en medios no homogéneos, sobre lo que versa este trabajo.

1.3. Nuevos problemas

Los medios no homogéneos se caracterizan por no tener las mismas propiedades en todos los puntos que lo constituyen. En cadenas de amarre fuerte una forma de conseguir esto es mediante la introducción de acoplamientos dependientes de la posición. El objetivo de este trabajo es calcular un conjunto de expresiones en forma cerrada para propagadores cristalinos de cadenas no homogéneas mediante las Ecs. de Mello-Moshinsky discretas y con esto revisar una serie de métodos de teoría

de grupos para esta clase de problemas exactamente resolubles así como analizar el contenido físico de cada núcleo. Para lograr esto, nos basamos en las conocidas álgebras de Lie tridimensionales de los grupos $SU(2)$, $SU(1,1)$ y Heisenberg. Los sistemas físicos correspondientes son los de cadenas no homogéneas finitas, infinitas y semi-infinitas. Un campo externo permitido da lugar al popular fenómeno de oscilaciones de Bloch, esta vez en cadenas no homogéneas, lo cual se analiza a fondo para cada cadena. Por otro lado, la finitud de la cadena $SU(2)$ nos da la oportunidad de discutir la reconstrucción y el transporte de estados así como las llamadas alfombras cuánticas, junto con la propagación de paquetes Gaussianos. Su realización física es propuesta a través del modelo de un cristal fotónico unidimensional.

Este trabajo se estructura de la siguiente manera: en el capítulo 2 presentamos un modelo de un cristal (fotónico) unidimensional hecho de cortinas dieléctricas. Los acoplamientos y potenciales en sitio correspondientes se dan como funciones del ancho y de la separación de las cortinas, aunque se remarca la dependencia de la permitividad, explorando la viabilidad de nuestro modelo de campo externo dependiente del tiempo. Esto hace posible dar una receta general para implementar acoplamientos y potenciales en sitio arbitrarios. A continuación, en el capítulo 3, procedemos a revisar brevemente el formalismo de propagadores cristalinos desarrollado por Sadurní [2], [25],[26]. Es con este marco teórico que continuamos, ahora resolviendo un conjunto de ecuaciones de movimiento para operadores de red con Hamiltonianos que incluso contemplan dependencia temporal. Las restricciones se imponen a los acoplamientos en base a los conmutadores. Las soluciones se reformulan como un tipo particular de ecuaciones MM discretas y, después de una revisión de la teoría de grupos semisimples de rango uno, todavía en el capítulo 3, damos el propagador para las cadenas con grupos dinámicos dados por $SU(2)$ y $SU(1,1)$. Finalmente, las propiedades de propagación se escudriñan en el capítulo 4 junto con el propagador de Heisenberg restante, que ahí se calcula y se analiza. El capítulo 5 da una idea de lo que deberían ser los propagadores cristalinos exactos para cristales bidimensionales no homogéneos con $SU(3)$ y $SO(4)$ como grupos dinámicos, de hecho, se da el propagador de este último cristal. Concluimos en el capítulo 6.

Capítulo 2

Realización de cristal fotónico con medios dieléctricos

En la presente sección se obtiene una ecuación de Schrödinger efectiva para una cortina dieléctrica, tal y como lo hizo Sadurní en [1], con esto veremos que es posible emular un pozo de potencial finito de mecánica cuántica en un sistema clásico a través de una disposición adecuada de elementos dieléctricos cuya interacción con un campo eléctrico se describe haciendo uso de las leyes del electromagnetismo. En seguida, se calculan acoplamientos para dos pozos de potencial, pues, como bien se sabe, resultan ondas evanescentes en la región entre cortinas. También se dan expresiones para las energías en sitio efectivas. Finalmente, los resultados se generalizan a una cadena de cortinas dieléctricas proporcionando una forma de diseñar acoplamientos y potenciales en sitio arbitrarios, de forma particular, los que se estudian en este trabajo. Se discuten las cualidades de este sistema así como la factibilidad de un cristal fotónico con permitividad dependiente del tiempo.

2.1. Ecuación de Schrödinger efectiva para una cortina dieléctrica, a partir de las ecuaciones de Maxwell

Consideremos una cortina de ancho L y de constante dieléctrica ϵ_1 sumergida en un medio de permitividad menor, ϵ_2 , como se muestra en la Fig. 2.1. La cortina dieléctrica está orientada paralela al eje x . Además, supongamos un modo transversal eléctrico continuo \mathbf{E} que se propaga en la dirección dada por el vector \mathbf{k} que yace en el plano $x = 0$. Mostraremos que dicho sistema emula un pozo de potencial finito de mecánica cuántica.

Para lograr tal cometido, recordemos que la propagación de dicho campo está gobernada por la conocida ecuación de Helmholtz 3D general:

$$\nabla^2 \mathbf{E} + \mu_0^2 \omega^2 \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E} + \nabla \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \mathbf{E} \cdot \nabla \epsilon(\mathbf{r}) \right] = 0. \quad (2.1)$$

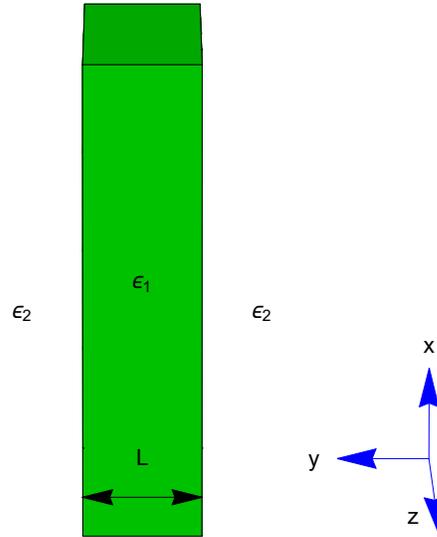


Figura 2.1: Cortina de constante dieléctrica ϵ_1 sumergida en un medio de permitividad ϵ_2 . Aquí elegimos $\epsilon_1 > \epsilon_2$ para garantizar la existencia de estados ligados dentro de la cortina.

Con un campo de la forma $\mathbf{E} = \phi(y) e^{ik_z z} \hat{\mathbf{x}}$, i. e. una onda electromagnética polarizada en la dirección $\hat{\mathbf{x}}$, que oscila en la dirección z y cuya amplitud es modulada por una función que depende de y , y con la función dieléctrica $\epsilon(\mathbf{r})$ variando únicamente en la dirección y , podemos mostrar que el argumento del gradiente en el tercer término del lado izquierdo de la ec. (2.1) es igual a cero. Esto nos lleva a reducir la ec. (2.1) a

$$\nabla^2 \mathbf{E} + \mu_0^2 \omega^2 \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E} = 0. \quad (2.2)$$

La función $\epsilon(\mathbf{r})$ se define como

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \begin{cases} \epsilon_1 & \text{si } y \in \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right] \\ \epsilon_2 & \text{si } y \notin \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right] \end{cases} \quad (2.3)$$

y da cuenta de la presencia de la cortina dieléctrica. En unidades en las que $c = 1$, obtenemos las ecuaciones

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + \epsilon_1 \omega^2) \mathbf{E} &= 0, & \mathbf{r} \in \Omega, \\ (\nabla^2 + \epsilon_2 \omega^2) \mathbf{E} &= 0, & \mathbf{r} \notin \Omega, \end{aligned} \quad (2.4)$$

donde Ω ha sido definida como la región en la que $y \in \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right]$.

Estudiemos qué pasa en la región de constante dieléctrica ϵ_1 . Puesto que $\mathbf{E} = E_x \hat{\mathbf{x}}$, con $E_x = \phi(y) e^{ik_z z}$, sustituir esta expresión en (2.2) produce

$$(\nabla^2 E_x + \epsilon_1 \omega^2 E_x) \hat{\mathbf{x}} = 0. \quad (2.5)$$

Al calcular el Laplaciano, tenemos

$$\nabla^2 E_x = e^{ik_z z} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - k_z^2 \phi \right), \quad (2.6)$$

2.1. Ecuación de Schrödinger efectiva para una cortina dieléctrica, a partir de las ecuaciones de Maxwell

este resultado es reemplazado en (2.5), con lo que la parte escalar es

$$(\nabla^2 E_x + \epsilon_1 \omega^2 E_x) = e^{ik_z z} [\phi'' + (\epsilon_1 \omega^2 - k_z^2) \phi] = 0. \quad (2.7)$$

La Ec. (2.7) se puede poner como un problema de valores propios, teniendo en cuenta que la solución es válida para todo z , escribimos

$$-\phi'' - \epsilon_1 \omega^2 \phi = -k_z^2 \phi, \quad (2.8)$$

esta forma se parece más a la Ec. de Schrödinger. Hemos elegido esta presentación para la Ec. (2.8) ya que resulta de utilidad para la analogía. Una ecuación diferencial similar se obtiene en la región en la que la constante dieléctrica es ϵ_2 , a saber

$$-\phi'' - \epsilon_2 \omega^2 \phi = -k_z^2 \phi. \quad (2.9)$$

Ahora, definamos la siguientes cantidades

$$\begin{aligned} U_0 &\equiv (\epsilon_2 - \epsilon_1) \omega^2 < 0 \\ E &\equiv \epsilon_2 \omega^2 - k_z^2. \end{aligned} \quad (2.10)$$

La motivación detrás de estas definiciones se origina de la observación de que las ecuaciones diferenciales obtenidas nos recuerdan, cada una, a la Ec. de Schrödinger con potencial efectivo del tipo $\epsilon(\mathbf{r}) \omega^2$. Entonces, el potencial efectivo que caracteriza al arreglo de dieléctricos se puede escribir como U_0 en la región entre $-L/2$ y $L/2$, vea la Fig. 2.2. Finalmente, la ecuación de Schrödinger efectiva para una cortina dieléctrica es

$$\boxed{\left[-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + U_0 \Theta(L/2 - |y|) \right] \phi(y) = E \phi(y),} \quad (2.11)$$

donde Θ es la función de Heaviside. Se puede pensar a la Ec. (2.11) como el equivalente a la ecuación de Schrödinger estacionaria con Hamiltoniano efectivo

$$H_e = -\frac{\partial^2}{\partial y^2} + U_0 \Theta(L/2 - |y|), \quad (2.12)$$

donde el subíndice “e” significa “efectivo”.

Con una energía efectiva negativa, $E < 0$ para estados ligados, obtenemos expresiones de la forma

$$\phi(y) = N \times \begin{cases} \exp\left(-\frac{|y - \frac{L}{2}|}{\lambda}\right) & \text{si } y > \frac{L}{2} \\ \exp\left(-\frac{|y + \frac{L}{2}|}{\lambda}\right) & \text{si } y < -\frac{L}{2}, \end{cases} \quad (2.13)$$

para las soluciones simétricas, mientras que para $|y| < \frac{L}{2}$ la función $\phi(y)$ es trigonométrica. Las funciones (2.13) son ondas evanescentes definidas de tal forma que sólo nos preocupamos por la distancia a las esquinas del pozo. La energía efectiva se

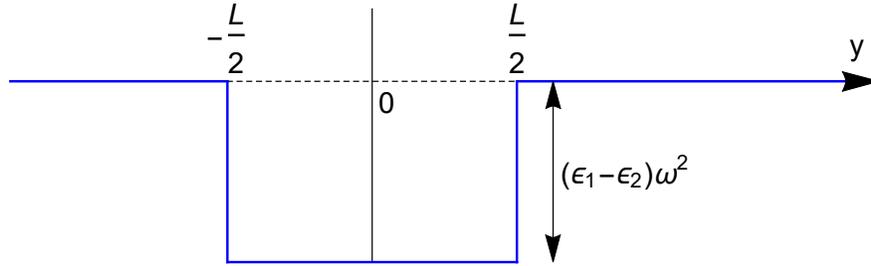


Figura 2.2: Pozo de potencial efectivo correspondiente a una cortina de constante dieléctrica ϵ_1 sumergida en un medio de permitividad menor, ϵ_2 . El potencial efectivo U_0 es negativo.

relaciona con la profundidad de piel mediante la ecuación $\lambda = \frac{1}{\sqrt{|E|}}$, como se puede verificar.

Para hallar los potenciales en sitio hay que resolver la ecuación trascendental

$$\tan z = \frac{\sqrt{\zeta^2 - z^2}}{z}, \quad (2.14)$$

con

$$z = \frac{L}{2} \sqrt{|U_0| + E} \quad y \quad \zeta^2 = |U_0| \left(\frac{L}{2} \right)^2, \quad (2.15)$$

que resulta de la continuidad de las soluciones en $|y| = \frac{L}{2}$, tal y como se hace en mecánica cuántica. Se sabe que existe al menos un estado ligado para dicho pozo el cual es de nuestro interés, para encontrar su energía efectiva sólo debemos hacer $\zeta^2 \ll 1$ y resolver (2.14). Tomando en cuenta un pozo poco profundo, un estimado de la energía de dicho estado es

$$E \approx -\frac{L^2 U_0^2}{4} = -\frac{L^2 (\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 \omega^4}{4}. \quad (2.16)$$

Este resultado nos da la siguiente expresión para la profundidad de piel

$$\lambda \approx \frac{2}{L(\epsilon_1 - \epsilon_2)\omega^2}. \quad (2.17)$$

Ambas expresiones dependen justamente de parámetros controlables del sistema como el ancho de la cortina y las constantes dieléctricas en juego por lo que la profundidad de piel se puede ajustar fácilmente.

Otro caso de interés es aquel en el que el pozo es bastante profundo. Nos enfocaremos en los estados cercanos a la base del pozo. Es bien sabido que cuando $\zeta^2 \gg 1$, los valores de z , para las funciones de onda simétricas, se acercan al valor correspondiente al pozo de potencial infinito, es decir

$$z \approx \frac{\pi}{2}(2m + 1), \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (2.18)$$

2.2. Estimación de acoplamientos y energías en sitio para dos pozos de potencial

Hay que recordar que el número de valores posibles de m depende de qué tan profundo sea el pozo y de cuán ancha sea la cortina. En otras palabras, para los estados del fondo del pozo, no hace mucha diferencia que el pozo sea finito, siempre y cuando sea lo suficientemente profundo. Esto nos permite poner la profundidad de piel en términos de las variables geométricas del pozo pues notemos que de (2.18) y (2.15) se sigue que

$$E_m \approx U_0 + \frac{\pi^2(2m+1)^2}{L^2} \quad (2.19)$$

con lo que la profundidad de piel es

$$\lambda_m \approx \frac{1}{\sqrt{|U_0 + \frac{\pi^2(2m+1)^2}{L^2}|}}. \quad (2.20)$$

Así que tenemos otra forma en la que λ depende del ancho del pozo. Con esto hemos encontrado un sistema clásico capaz de emular los fenómenos cuánticos asociados al pozo de potencial finito, de especial interés es el sistema que consiste de una cadena de átomos con electrones fuertemente enlazados.

2.2. Estimación de acoplamientos y energías en sitio para dos pozos de potencial

Imaginemos ahora dos cortinas dieléctricas acomodadas como se muestra en la Fig. 2.3. Es posible obtener una expresión para las energías en sitio y los acopla-

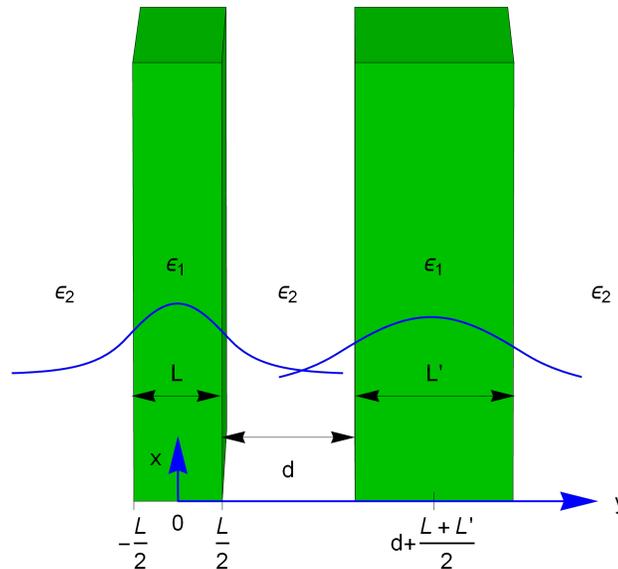


Figura 2.3: Dos cortinas dieléctricas de ancho L y L' y grosor de piel λ y λ' , respectivamente, separadas una distancia d . En la región entre $L/2$ y $L/2 + d$ las ondas se traslapan.

mientos para las dos cortinas dieléctricas, para calcular esta última cantidad se hace uso de la integral de traslape. Es evidente que cada cortina está caracterizada por una profundidad de piel y ancho respectivos.

En el marco de la aproximación de amarre fuerte a primeros vecinos, la integral de traslape está dada por

$$\Delta = \int_{-\infty}^{\infty} dy \phi H_e \phi'^*, \quad (2.21)$$

aquí primamos para señalar que se trata de la función correspondiente a la segunda cortina y no para indicar una derivada como lo hemos hecho antes. Parte del integrando es

$$H_e \phi'^*(y) = \left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + U_0 \Theta(L/2 - |y|) \right) \phi'(y) = E' \phi'(y), \quad (2.22)$$

puesto que tanto ϕ como ϕ' son funciones reales. De esta forma, el acoplamiento se aproxima a

$$\Delta \approx - \int_{\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}+d} dy \phi \frac{d^2 \phi'}{dy^2}, \quad (2.23)$$

pues notemos que en la región entre $L/2$ y $L/2 + d$ el potencial efectivo es cero, i. e. las cortinas equivalen a dos pozos de potencial finito, cada uno de ancho L y L' , separados una distancia d .

Recordemos que las soluciones de la Ec. de Schrödinger efectiva en la región de interés están dadas por las expresiones para ondas evanescentes

$$\phi(y) = N \exp\left(\frac{\frac{L}{2} - y}{\lambda}\right) \quad \text{y} \quad \phi'(y) = N' \exp\left(\frac{y - (\frac{L}{2} + d)}{\lambda'}\right), \quad (2.24)$$

por lo que al calcular la integral

$$\Delta \approx - \int_{\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}+d} dy \left[N \exp\left(\frac{\frac{L}{2} - y}{\lambda}\right) \frac{N'}{\lambda'^2} \exp\left(\frac{y - (\frac{L}{2} + d)}{\lambda'}\right) \right], \quad (2.25)$$

obtenemos el acoplamiento dado por

$$\Delta(d) \approx \Delta(0) \exp\left(-\frac{\lambda + \lambda'}{2\lambda\lambda'} d\right) \sinh\left(\frac{\lambda - \lambda'}{2\lambda\lambda'} d\right), \quad (2.26)$$

en función de la separación entre cortinas. Esta dependencia es muy importante pues significa que la propagación de las ondas en este sistema se puede controlar tan sólo con alejar o acercar a las cortinas entre sí. En cuanto a las energías en sitio, podemos mostrar que están dadas por (2.16) o por (2.19), tomando como variable los anchos correspondientes a cada cortina. En lo que sigue damos un último paso hacia la descripción completa de un sistema capaz de emular modelos de amarre fuerte unidimensionales.

2.3. Generalización a cadenas de cortinas dieléctricas

Con los resultados obtenidos, generalizar a cadenas de cortinas dieléctricas no resulta tan complicado. Para hacerlo, supongamos una cadena de cortinas dieléctricas

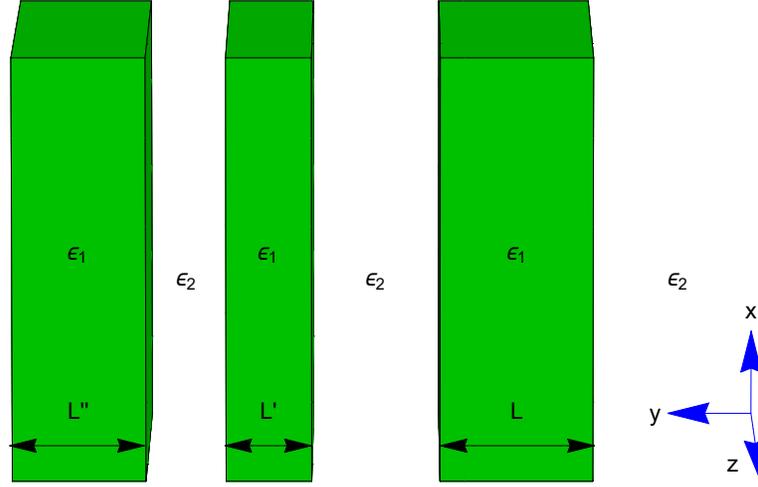


Figura 2.4: Cristal fotónico 1D. Cadena de cortinas de constante dieléctrica ϵ_1 sumergidas en un medio de permitividad ϵ_2 . Las cortinas se pueden colocar deliberadamente de tal forma que una ley de acoplamientos y potenciales en sitio arbitrarios se pueda diseñar.

tricas cada una de ancho $L^{(n)}$ separadas por una distancia d_n como se muestra en la Fig. 2.4, entonces los acoplamientos se pueden obtener mediante la integral de traslape (2.21) con ayuda de las siguientes definiciones:

$$\begin{aligned} \langle n|H|n \pm 1\rangle &\equiv -\Delta_1, \\ \langle n|H|n \pm 2\rangle &\equiv -\Delta_2, \\ &\vdots \\ \langle n|H|n \pm k\rangle &\equiv -\Delta_k, \end{aligned} \quad (2.27)$$

para los acoplamientos entre primeros, segundos, \dots , k -ésimos vecinos. En la aproximación de amarre fuerte a primeros vecinos sólo Δ_1 es significativo. Las energías en sitio se pueden estimar, vea (2.16) y (2.19), y difieren únicamente en el ancho de cada cortina. De la relación $\lambda = 1/\sqrt{|E|}$, como hemos visto, se pueden determinar las profundidades de piel.

La invertibilidad de las expresiones obtenidas en la sección anterior nos proporciona directamente la receta de dónde colocar cada cortina dieléctrica y también de cuáles deben ser los anchos para lograr satisfacer algún conjunto de propiedades objetivo. Consideremos un conjunto de acoplamientos y potenciales en sitio deseados $\{\Delta_n, V_n\}$, con n el sitio de red. Luego, aproximando la Ec. (2.26) solamente con la

exponencial, como se señala en [1], el conjunto correspondiente de separaciones y anchos se obtienen fácilmente mediante (2.16), (2.19) y (2.26) como:

$$L^{(n)} = \frac{2}{\omega^2(\epsilon_1 - \epsilon_2)} \sqrt{|V_{\text{offset}} - V_n|}, \quad \zeta^2 \ll 1 \quad (2.28)$$

$$L_m^{(n)} = \frac{\pi(2m+1)}{\sqrt{V_n^m - U_0}}, \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad \zeta^2 \gg 1 \quad (2.29)$$

$$d_n = - \left(\frac{2}{\sqrt{|V_n| + |V_{n+1}|}} \right) \log \left(\frac{\Delta_n}{\Delta(0)} \right), \quad (2.30)$$

con $V_n^0 \equiv V_n$ para (2.29). Estas expresiones se derivan de las definiciones que hemos utilizado, e. g., $\lambda_n = 1/\sqrt{|E_n|}$ conduce a (2.30), y donde hemos tomado la expresión general $V_{\text{offset}} - V_n$ para (2.28). Así, vemos que podemos construir leyes de acoplamiento y potenciales en sitio arbitrarios bajo una elección apropiada de separaciones y anchos $\{d_n, L^{(n)}\}$. Como veremos en este trabajo, entre las formas de interés para la amplitud de salto se encuentran funciones que van como la raíz de polinomios cuadráticos y lineales.

Es importante enfatizar las características de este cristal fotónico y lo que significan para el estudio de modelos de amarre fuerte. Como lo hemos visto, tanto los acoplamiento como las energías en sitio son funciones de dos variables que podemos controlar: el ancho de las cortinas dieléctricas y la separación entre éstas, esto nos permite sintonizar los acoplamiento a placer y con esto explorar distintos escenarios, según se desee. Por otro lado, una pregunta natural que se nos ocurre del estudio de estos sistemas, en el que incluso consideramos (teóricamente) un cristal con propiedades dependientes del tiempo, va sobre si es posible construir un cristal con características de ese tipo. Primeramente, uno pensaría que el sistema se controla bien variando el ancho de las cortinas dieléctricas o su separación, sin embargo, observemos que (2.16) también puede ser ajustada variando la permitividad. Lo anterior abre la posibilidad de considerar funciones dieléctricas dependientes del tiempo. Esto es muy interesante, como puede notarse. Estamos familiarizados con la dependencia en frecuencia de la función dieléctrica más no del tiempo.

Algunos estudios muestran que tal escenario puede ser físicamente realizable, por ejemplo, en [30] se explora, mediante simulaciones, la posibilidad de variar la función dieléctrica de monocapas moleculares de ANT (antraceniol) sobre sustratos de oro con ayuda de pulsos láser de corta duración (del orden de centenas de ps). Se reporta una variación de 8.18 a 8.94 en el valor de la función dieléctrica antes y en el momento donde la intensidad del pulso es máxima, después de la cual vuelve a su estado original. Otra propuesta, dada en [31], consiste en implementar la dependencia temporal de la permitividad con ayuda de medios móviles, la idea general estriba en hacer uso de un medio no lineal isotrópico que se mueve con cierta velocidad y sobre el cual incide, de forma paralela al movimiento, un pulso intenso, e. g., de tipo Gaussiano. Éste genera una respuesta no lineal de la polarización del medio, que para medios isotrópicos, como el que se propone, significa considerar sólo hasta el

término no lineal correspondiente al del efecto Kerr óptico, i. e. el de tercer orden, lo anterior se traduce en una función dieléctrica dependiente del espacio y del tiempo. Funciones del tiempo lineales y exponenciales se discuten. Los resultados reportados en [32] son otro ejemplo interesante puesto que en él se considera una cortina dieléctrica, como la que se muestra en la Fig. 2.1, aunque de permitividad que varía armónicamente en el tiempo. El mecanismo propuesto para alcanzar esta modulación temporal es mediante el uso de una tira de dos conductores que encapsulan a un medio ferroeléctrico, el cual desempeña el papel de la cortina. Como señalan, para producir una función dieléctrica variable en el tiempo, el sistema ha de colocarse en un campo electromagnético intenso. De hecho, una consideración de este tipo parece conducir a una forma más general de sentenciar las ecuaciones de Maxwell debido a que al considerar dependencia temporal de la permitividad se puede mostrar que se obtiene una ley de Ampere-Maxwell generalizada, dando lugar a un nuevo término, de acuerdo con [33]. En la misma referencia se da a conocer que los campos eléctricos y magnéticos en presencia de una función dieléctrica variable en el tiempo evolucionan de forma independiente. Las simulaciones de moléculas de ANT, que discutimos al comenzar esta indagatoria, confirman estos resultados teóricos. En conjunto, esto puede permitirnos implementar potenciales en sitio dependientes del tiempo, un escenario que se estudia en el presente trabajo.

De esta forma, tenemos un sistema novedoso en el cual se pueden implementar modelos de amarre fuerte en una dimensión incluso con dependencia temporal; respecto al caso bidimensional, la propagación de ondas electromagnéticas en medios con propiedades variables en el tiempo, como la permitividad, han sido analizados en [34]. Como en el caso 1D, donde el cristal se construye de cortinas dieléctricas, para redes bidimensionales, uno puede utilizar, por ejemplo, un conjunto de discos cerámicos [12].

Capítulo 3

Formalismo de propagadores discretos unidimensionales

En el presente capítulo damos un repaso a la teoría de propagadores cristalinos desarrollada de forma extensa recientemente por Sadurní [2], [25]. El camino que trazamos consiste en discutir la Ec. de Schrödinger en su forma discreta. En este sentido, también discutiremos una versión discreta de la función de Green y su conexión con los propagadores cristalinos, todo esto en una dimensión. Continuaremos hablando de las ecuaciones de Mello-Moshinsky discretas, obtenidas por Sadurní [26]. Con esto plantearemos y resolveremos problemas mediante linealización algebraica. Este formalismo nos permitirá obtener acoplamientos entre sitios de una cadena unidimensional en base a los conmutadores así como expresiones para los campos sobre el cristal. Finalmente la teoría de grupos semisimples de rango uno nos habilita para resolver las ecuaciones de recurrencia que obtenemos de las Ecs. de Mello-Moshinsky discretas lo que a su vez nos permite encontrar expresiones para nuestros propagadores cristalinos, dependiendo de los valores que elijamos para los parámetros de nuestro modelo.

3.1. Ecuación de Schrödinger discreta y función de Green discreta

En esta sección mostraremos que la discretización de la ecuación de Schrödinger conduce naturalmente a un Hamiltoniano en términos de operadores de red, de traslación y posición discreta, que actúan sobre estados localizados (de Wannier) y que el propagador correspondiente satisface las propiedades de una función de Green. Nuestro punto de partida será la Ec. de Schrödinger para una partícula libre:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t}. \quad (3.1)$$

Es bien sabido que la ecuación de Schrödinger en una dimensión describe, según la interpretación probabilística de Born, la evolución espacio-temporal de la amplitud de probabilidad de encontrar a un sistema en un estado arbitrario. Nuestra tarea

consiste en calcular una ecuación de Schrödinger discreta. Seguimos de cerca la referencia [2].

Para empezar, el punto clave para discretizar (en el espacio) a la Ec. de Schrödinger de una partícula libre consiste en discretizar la derivada en (3.1). Esto se logra con la definición de derivada a través del límite central, mediante ésta, la derivada de una función, digamos $u(x)$, es aproximadamente

$$u'(x) \approx \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h}, \quad (3.2)$$

para h lo suficientemente pequeño. Con esto en mente, notamos de inmediato que la segunda derivada se aproxima a

$$u''(x) \approx \frac{u(x+2h) - 2u(x) + u(x-2h)}{(2h)^2}. \quad (3.3)$$

Así, la ecuación de Schrödinger (3.1) se puede aproximar sobre una red en una dimensión sustituyendo la segunda derivada del Laplaciano por la Ec. (3.3), haciendo esto obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\phi(x+a, \tau) - 2\phi(x, \tau) + \phi(x-a, \tau)}{a^2} = i\hbar \frac{\partial \phi(x, \tau)}{\partial \tau}, \quad (3.4)$$

donde hemos identificado $2h$ con el parámetro de red, a . La Ec. (3.4) se puede reescribir, utilizando el índice discreto n , como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\phi_{n+1}(\tau) - 2\phi_n(\tau) + \phi_{n-1}(\tau)}{a^2} = i\hbar \frac{\partial \phi_n(\tau)}{\partial \tau}. \quad (3.5)$$

Reescalando el tiempo a $t = \frac{\hbar}{ma^2}\tau$ y tomando $\psi_n(t) = e^{it}\phi_n(\tau)$, una transformación que contiene la misma física, obtenemos

$$\boxed{-\frac{1}{2} [\psi_{n+1}(t) + \psi_{n-1}(t)] = i \frac{\partial \psi_n(t)}{\partial t}.} \quad (3.6)$$

La Ec. (3.6) es la Ec. de Schrödinger discreta y describe la dinámica de ondas de amplitud de probabilidad en el espacio discreto definido por n . La ecuación estacionara correspondiente

$$-\frac{1}{2} [\psi_{n+1}^k + \psi_{n-1}^k] = E^k \psi_n^k \quad (3.7)$$

tiene como solución a las funciones de Bloch de la forma $\psi_n^k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikn}$ con $E_k = -\cos k$ y $k \in (0, 2\pi)$, tomando $a = 1$. El siguiente Hamiltoniano se puede extraer de (3.6)

$$H = -\frac{1}{2} (T + T^\dagger), \quad (3.8)$$

el cual está dado en términos de operadores de traslación discreta. Podemos escribir el operador de evolución temporal en descomposición espectral como

$$U_{nm} = \langle n|U|m \rangle = \int_0^{2\pi} dk e^{-iE_k t} \langle n|k \rangle \langle k|m \rangle = \int_0^{2\pi} dk e^{-iE_k t} \psi_n^k \psi_m^{k*} \quad (3.9)$$

donde $\langle n|k \rangle \equiv \psi_n^k$ es una onda de Bloch, y donde hemos insertado una relación de completitud. La expansión de Jacobi-Anger de $e^{it \cos k}$ y la integración de (3.9) produce

$$U_{nm} = i^{n-m} J_{n-m}(t) \quad (3.10)$$

y finalmente, el propagador es

$$K_{nm}(t) = \Theta(t) i^{n-m} J_{n-m}(t). \quad (3.11)$$

como se obtuvo en [2].

Vale recordar ahora una propiedad fundamental de toda función de Green G bajo la acción de su operador diferencial asociado D , a saber

$$DG(x) = \delta(x), \quad (3.12)$$

esto es, el operador convierte a la función de Green en la función delta cuando actúa sobre ella. Esto también quiere decir que podemos pensar a la función de Green G como la inversa del operador diferencial definido por D . Resulta que K , el propagador discreto que hemos obtenido para la Ec. de Schrödinger de una partícula libre cumple la siguiente igualdad:

$$\boxed{-\frac{1}{2} [K_{n+1,m}(t) + K_{n-1,m}(t)] - i \frac{\partial}{\partial t} K_{n,m}(t) = -i \delta(t) \delta_{n,m}}, \quad (3.13)$$

por lo que el propagador asociado a la Ec. de Schrödinger discreta para una partícula libre (3.1) es, además, la función de Green del operador diferencial definido por la misma.

Mostremos detalladamente que K_{mn} satisface la propiedad que define a una función de Green, es decir, que nos da deltas cuando el operador diferencial, como lo define la ecuación de Schrödinger discreta, actúa sobre él. Para ver esto, primero tenga en cuenta que K_{mn} satisface (3.6) para $t > 0$ ya que $\psi_n(t) = \sum_m U_{mn}(t) \psi_m(0)$ y $\psi_n(t)$ satisface la ecuación de Schrödinger. Ahora, si se permite que t tome el valor cero, primero podemos trabajar con una versión simplificada del problema, i. e. tomemos simplemente $K_{n,n}$, luego podemos mostrar que

$$\frac{1}{2} [K_{n+1,n}(t) + K_{n-1,n}(t)] = \Theta(t) \frac{1}{2} i [J_1(t) - J_{-1}(t)] = i \Theta(t) J_1(t) \quad (3.14)$$

ya que $J_{-n} = (-1)^n J_n$. A continuación, vemos que

$$\frac{\partial}{\partial t} K_{n,n}(t) = i^0 \frac{\partial \Theta(t) J_0(t)}{\partial t} = \delta(t) J_0(t) - \Theta(t) J_1(t) \quad (3.15)$$

Tomadas en conjunto, (3.14) y (3.15) producen

$$-\frac{1}{2} [K_{n+1,n}(t) + K_{n-1,n}(t)] - i \frac{\partial}{\partial t} K_{n,n}(t) = -i \delta(t) K_{n,n}(t), \quad (3.16)$$

pero sabemos que el lado derecho de la Ec. (3.16) da cero para $t > 0$, cuando $m \neq n$, por lo que lo podemos escribir simplemente como $-i \delta(t)$ en lugar de $-i \delta(t) K_{n,n}(t)$

ya que $K_{mn}(0) = \delta_{mn}$ y también sabemos que para $m = n$ es cero para $t > 0$ debido a la función delta de Dirac, por lo tanto, es claro que se sigue el resultado deseado, Ec. (3.13). Puesto que trabajamos con los índices n y m , nos referimos al propagador K_{mn} , Ec. (3.11), como la función de Green discreta de la Ec. de Schrödinger discreta (3.6).

De forma más general, nos gustaría incluir un campo discreto de potencial dependiente del tiempo a la Ec. de Schrödinger discreta. Lo anterior es bastante directo si escribimos al campo, digamos $E(t)$, con unidades de energía/posición, de esta forma, la ecuación correspondiente es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\phi_{n+1}(\tau) - 2\phi_n(\tau) + \phi_{n-1}(\tau)}{a^2} + E(t)n\phi(\tau) = i\hbar \frac{\partial \phi_n(\tau)}{\partial \tau}. \quad (3.17)$$

Nuevamente simplificamos reescalando el tiempo a través de la definición $t = -\hbar\tau/2ma^2$ y con ayuda de la transformación $\phi_n(\tau) = e^{2it}\psi_n(t)$, obteniendo

$$\psi_{n+1}(t) + \psi_{n-1}(t) - \frac{2ma^3}{\hbar^2} E(t)n\psi_n(t) = i \frac{\partial \psi_n(t)}{\partial t}. \quad (3.18)$$

Finalmente, definimos $\alpha(t) = -\frac{2ma^3}{\hbar^2} E(t)$ con lo cual (3.18) se puede reescribir como

$$\psi_{n+1}(t) + \psi_{n-1}(t) + \alpha(t)n\psi_n(t) = i \frac{\partial \psi_n(t)}{\partial t}, \quad (3.19)$$

esta última ecuación es la Ec. de Schrödinger discreta dependiente del tiempo para una partícula bajo la acción de un campo también dependiente del tiempo, $\alpha(t)$. De la Ec. (3.19) se puede extraer el Hamiltoniano

$$H(t) = T + T^\dagger + \alpha(t)N, \quad (3.20)$$

donde los operadores T y T^\dagger nos trasladan en uno en la posición discreta n y N es el observable de posición, como se definirán a continuación.

Recomendamos al lector tener en mente a los Hamiltonianos (3.6), (3.20) ya que un planteamiento similar será nuestro punto de partida para nuestra investigación de propagadores cristalinos unidimensionales de cristales no homogéneos que desarrollamos en las siguientes secciones. Un propagador parecido a aquel de la partícula libre se puede obtener para la Ec. (3.20), se recomienda consultar [25] para conocer más información al respecto.

3.2. Ecuaciones de Mello - Moshinsky discretas

Las ecuaciones de Mello-Moshinsky se establecieron para calcular la representación de transformaciones canónicas no lineales en el espacio de configuración [29]. Recientemente, Sadurní mostró que es posible obtener unas ecuaciones de Mello-Moshinsky discretas en el espacio que corresponden físicamente a cristales de dimensiones arbitrarias, en [26] se exploran los casos particulares de cristales homogéneos uni- y bidimensionales, además se puede encontrar una discusión de efectos

novedosos de difracción en el espacio discreto. En esta sección daremos una revisión de la teoría correspondiente a las Ecs. de Mello-Moshinsky discretas que resultarán fundamentales para obtener propagadores cristalinos de una cadena unidimensional bajo la acción de un campo externo con acoplamientos variables.

Para comenzar nuestra discusión, queremos decir que, en la búsqueda de una teoría análoga a la de Mello y Moshinsky en el espacio discreto, naturalmente pensamos en variables canónicas en cristales, tal como se hace para el estudio de transformaciones canónicas en el espacio fase bidimensional, por ejemplo, donde las variables canónicas conjugadas son x y p , las cuales cumplen con la relación de conmutación

$$[x, p] = i\hbar, \quad (3.21)$$

la cual permanece invariante bajo transformaciones canónicas.

Lo primero que se nos ocurriría sería construir un par de operadores en variables discretas, digamos ξ , π , que satisfagan una ecuación análoga a (3.21), es decir $[\xi, \pi] = i\hbar$ y desarrollar las analogías correspondientes. Sin embargo, Sadurní mostró que, aunque es posible construir un par de dichos operadores, resulta conveniente trabajar, en vez de con estos, con un par de operadores independientes no canónicos pero cuyo conmutador sí se transforma canónicamente. Estos operadores son justamente los operadores de red: los operadores de desplazamiento T , T^\dagger y el operador de posición discreta N , que presentamos en la discusión de la Ec. de Schrödinger discreta y su elección radica en lo fácil que resulta realizar cálculos con ellos, ya que su aplicación sobre estados atómicos localizados se expresa de manera bastante simple en comparación con las expresiones que se obtienen para la aplicación del par ξ , π , sobre estos mismos estados, vea [26].

Una definición formal de los operadores de red se da a través de

$$N = \frac{x}{a}, \quad T = \exp(-iap) \quad (3.22)$$

cuya acción se puede intuir puesto que se dan en términos de los operadores de posición continua y traslación. La elección de este par se justifica al notar que cualquier transformación unitaria sobre x y p nos lleva a una transformación similar para T y N . Nuevamente, a denota al parámetro de red. Las relaciones de conmutación entre estos operadores son las siguientes

$$[T, T^\dagger] = 0, \quad [N, T] = T, \quad \text{y} \quad [N, T^\dagger] = -T^\dagger, \quad (3.23)$$

junto con el hecho obvio de que

$$TT^\dagger = T^\dagger T = 1. \quad (3.24)$$

Con esto ya estamos preparados para considerar una transformación de la forma

$$N' = N'(N, T), \quad T' = T'(N, T). \quad (3.25)$$

Tal y como lo hicieron Quesne y Moshinsky para el caso del oscilador armónico [28], la Ec. (3.25) describe la evolución de los operadores N y T bajo la acción de

algún Hamiltoniano, como se verá más adelante. Ahora, como lo hicieron Mello y Moshinsky [27], proponemos las siguientes transformaciones no lineales

$$\begin{aligned} N' &= \alpha(t)T + \alpha^*(t)T^\dagger + \beta(t)N \\ T' &= \gamma(t)T + \zeta(t)T^\dagger + \delta(t)N \end{aligned} \quad (3.26)$$

donde α, γ, ζ y $\delta \in \mathbb{C}$ mientras que $\beta \in \mathbb{R}$. Decimos que no son lineales pues recuerde que $T^\dagger = 1/T$. Debemos hacer énfasis en que, aunque el par de operadores N, T no es canónico, su conmutador $[N, T] = T$ sí es covariante en el sentido de que $[N', T'] = T'$, esta condición impone restricciones sobre los coeficientes de (3.26) que se especifican en [26].

En este punto vale la pena señalar lo siguiente, como se comentó anteriormente, los operadores de red T y N tienen una interpretación clara al ser aplicados sobre estados localizados

$$T|n\rangle = |n+1\rangle, \quad N|n\rangle = n|n\rangle, \quad (3.27)$$

es decir, estos operadores nos desplazan en uno de nuestra posición en la red y nos dicen en dónde estamos, respectivamente. La elección de este par de operadores se justifica ya que sus elementos matriciales tienen la forma

$$T_{mn} = \langle m|T|n\rangle = \delta_{m,n+1}, \quad N_{mn} = \langle m|N|n\rangle = n\delta_{m,n}, \quad (3.28)$$

esta simplicidad se hereda a las ecuaciones para obtener los elementos matriciales de U lo cual resulta de gran ayuda.

Finalmente, puesto que T, T' y N, N' están relacionados mediante la transformación unitaria

$$T' = UTU^\dagger, \quad N' = UNU^\dagger, \quad (3.29)$$

podemos reescribir (3.26) de la forma

$$\begin{aligned} UN &= \alpha(t)TU + \alpha^*(t)T^\dagger U + \beta(t)NU \\ UT &= \gamma(t)TU + \zeta(t)T^\dagger U + \delta(t)NU, \end{aligned} \quad (3.30)$$

donde sólo hemos multiplicado por U por la derecha. Los elementos matriciales de (3.30) se obtienen de inmediato en la base de estados atómicos, siendo

$$\boxed{\begin{aligned} nU_{mn} &= \alpha(t)U_{m-1,n} + \alpha^*(t)U_{m+1,n} + \beta(t)mU_{mn} \\ U_{m,n+1} &= \gamma(t)U_{m-1,n} + \zeta(t)U_{m+1,n} + \delta(t)mU_{mn}, \end{aligned}} \quad (3.31)$$

el conjunto de ecuaciones (3.31) conforma un par de relaciones de recurrencia acopladas y es conocido como las Ecs. de Mello-Moshinsky (MM) discretas [26], aunque en este trabajo también nos referimos a ellas como las Ecs. de Sadurní-Mello-Moshinsky (SMM). Estas ecuaciones nos ofrecen una vía alterna para determinar los elementos matriciales del operador unitario U , es decir, la representación unitaria de la transformación en el espacio discreto. A su vez, los elementos matriciales del operador unitario U , nos permiten escribir nuestros propagadores cristalinos de forma directa a través de la definición

$$K_{mn}(t-t_0) = \Theta(t-t_0)U_{mn}(t-t_0), \quad (3.32)$$

donde Θ es la función de Heaviside. En lo que sigue, sin pérdida de generalidad, tomaremos $\Delta t = t$ para todos nuestros propagadores. A lo largo de este trabajo veremos varios ejemplos de esta clase de núcleos para redes unidimensionales no homogéneas ilustrando las propiedades de propagación de pulsos en dichos cristales. La clave está en encontrar U a través de las Ecs. MM discretas. Enfatizaremos la relevancia de tales ecuaciones para este tipo de problemas así como sus limitaciones. Para alcanzar nuestro objetivo, comenzaremos por discutir una serie de problemas cuya solución nos permite escribir nuestras Ecs. MM discretas.

3.3. Problemas resolubles a través de linealización algebraica

A continuación mostraremos la relevancia que adquieren las Ecs. de Mello-Moshinsky discretas en el estudio de modelos de amarre fuerte. En esta sección exploramos una serie de problemas resolubles mediante linealización algebraica en conexión con la propagación de pulsos en una cadena unidimensional bajo la acción de un campo externo. Mostraremos que las relaciones de conmutación o, en otras palabras, el álgebra que satisfacen los operadores T y N , hacen posible encontrar expresiones para el acoplamiento entre sitios de una cadena unidimensional en función de la posición discreta n así como expresiones correspondientes para los campos posibles. Un estudio cuidadoso nos permite describir la evolución de los operadores de red con ayuda de la ecuación de movimiento de Heisenberg, donde resulta relevante el álgebra de los operadores en cuestión. Las ecuaciones de movimiento se resuelven con ayuda de distintas técnicas, según sea el caso. Finalmente estas soluciones se reescriben como un conjunto de relaciones de recurrencia para las entradas matriciales del operador unitario U , es decir, obtenemos nuestras ecuaciones de Mello-Moshinsky discretas. La solución de estas ecuaciones se deja para la siguiente sección.

3.3.1. Solución a la Ecuación de Heisenberg lineal para tres operadores con coeficientes independientes del tiempo: N , T y T^\dagger

Empecemos considerando la Ec. de Schrödinger para una partícula bajo la acción de un potencial dependiente de la posición

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t}. \quad (3.33)$$

En línea con nuestra discusión, se puede mostrar que la discretización de (3.33) conduce a la siguiente versión discreta de la Ec. de Schrödinger dependiente del tiempo

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + V(n)\psi_n = i \frac{\partial\psi_n}{\partial t}. \quad (3.34)$$

De la ecuación precedente resulta el siguiente Hamiltoniano

$$H = T + T^\dagger + V(N). \quad (3.35)$$

Estos problemas discretos tienen una conexión directa con la aproximación de amarre fuerte a primeros vecinos. Recordemos que el Hamiltoniano de amarre fuerte convencional es

$$H = \Delta T + T^\dagger \Delta^\dagger + V_0, \quad (3.36)$$

donde $\Delta \in \mathbb{R}$ (o sea $\Delta = \Delta^\dagger$) es el acoplamiento entre sitios vecinos y representa la energía de transferencia o de salto, para electrones en el caso de cristales de estado sólido, de un orbital a otro próximo, mientras que V_0 es el potencial en sitio para cualquier electrón en cuestión.

En este trabajo, estudiaremos un Hamiltoniano de amarre fuerte más general en el que consideramos tanto acoplamientos como potenciales dependientes de la posición en la cadena unidimensional, a saber

$$H = \Delta(N)T + T^\dagger \Delta^\dagger(N) + V(N). \quad (3.37)$$

Empecemos por explorar el caso más simple posible que, sin embargo, nos da una idea de como avanzar hacia casos más generales. Concretamente, el problema consiste en resolver la Ec. de movimiento de Heisenberg para los operadores N , T y T^\dagger ante el escenario físico descrito por (3.37). Recordemos que $T^\dagger = 1/T$ por lo que escribir una ecuación correspondiente para T^\dagger resulta redundante y se evitará en mucho de lo que sigue. Para tener una mejor idea del planteamiento del problema, consideremos la cadena unidimensional que se muestra en la Fig. 3.1. El Hamiltoniano que corresponde a este sistema es justamente (3.37) y en lo que sigue determinaremos qué funciones son posibles para el acoplamiento y el campo externo.

Primero queremos saber cómo evoluciona el sistema, para esto usamos la convención antes expuesta

$$T |n\rangle = |n+1\rangle, \quad T^\dagger |n\rangle = |n-1\rangle \quad \text{y} \quad N |n\rangle = n |n\rangle, \quad (3.38)$$

que se desprende de (3.22), donde N es un observable. La ecuación de movimiento en la imagen de Heisenberg es

$$i\hbar \frac{dA^{(H)}}{dt} = [A^{(H)}, H], \quad (3.39)$$

la cual nos permite conocer la evolución de los operadores (en la imagen de Heisenberg, donde los operadores son los que evolucionan y no los vectores de estado) con el único requisito de conocer el conmutador del operador en cuestión con el Hamiltoniano del sistema, el responsable de la evolución temporal. Aquí resulta indispensable el álgebra (3.23) que nos hace la vida más fácil al permitirnos calcular las relaciones de conmutación necesarias para analizar la evolución de nuestros operadores. Estas relaciones son

$$\begin{aligned} [T, H] &= [T, \Delta(N)T + T^\dagger \Delta(N) + V(N)] \\ &= [T, \Delta(N)]T + T^\dagger [T, \Delta(N)] + [T, V(N)] \end{aligned} \quad (3.40)$$

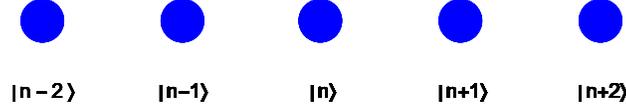


Figura 3.1: Cadena unidimensional. La cadena 1D consiste, por ejemplo, de una secuencia de átomos con acoplamientos a primeros vecinos. Curiosamente el cristal unidimensional nos recuerda a los multipletes del grupo $SU(2)$.

para T ,

$$\begin{aligned}
 [T^\dagger, H] &= [T^\dagger, \Delta(N)T + T^\dagger\Delta(N) + V(N)] \\
 &= [T^\dagger, \Delta(N)]T + T^\dagger[T^\dagger, \Delta(N)] + [T^\dagger, V(N)]
 \end{aligned} \tag{3.41}$$

para T^\dagger , que resulta redundante, y

$$\begin{aligned}
 [N, H] &= [N, \Delta(N)T + T^\dagger\Delta(N) + V(N)] \\
 &= \Delta(N)[N, T] + [N, T^\dagger]\Delta(N) = \Delta(N)T - T^\dagger\Delta(N),
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

para el operador de posición discreta, N . Notemos que podemos escribir nuestro sistema de ecuaciones diferenciales en forma matricial

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N \\ T \\ T^\dagger \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} N \\ T \\ T^\dagger \end{pmatrix}, H \right], \tag{3.43}$$

y, ya que queremos una evolución lineal, exigimos que se cumpla

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N \\ T \\ T^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \gamma \\ \alpha' & \beta' & \gamma' \\ \alpha'' & \beta'' & \gamma'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ T \\ T^\dagger \end{pmatrix}. \tag{3.44}$$

Aquí, aunque las entradas matriciales de (3.44) son elementos de \mathbb{C} , en general, veremos a continuación cuáles son las restricciones sobre ellas.

Para esto, analicemos por separado cada ecuación diferencial lineal de primer orden en el tiempo. Empecemos con la correspondiente al operador de posición discreta, tenemos

$$i\hbar \frac{dN}{dt} = \Delta(N)T - T^\dagger\Delta(N) = \alpha N + \beta T + \gamma T^\dagger, \tag{3.45}$$

ahora, notemos que el extremo izquierdo de la Ec. 3.45 es antihermitiano, entonces hacemos del mismo tipo al extremo derecho lo cual nos conduce a que $\gamma = -\beta^*$, es decir nuestra nueva ecuación es

$$i\hbar \frac{dN}{dt} = \Delta(N)T - T^\dagger\Delta(N) = \alpha N + \beta T - \beta^* T^\dagger, \tag{3.46}$$

de la cual podemos concluir que $\alpha = 0$ y que $\beta = \Delta(N) \in \mathbb{R}$, por la realidad de la función de acoplamiento.

En seguida, con el conocimiento de que $\Delta(N)$ es constante en la cadena (algo que se esperaba pues notemos que se trata de una situación correspondiente al modelo convencional de amarre fuerte), escribimos

$$i\hbar \frac{dT}{dt} = [T, \Delta(N)]T + T^\dagger [T, \Delta(N)] + [T, V(N)] = [T, V(N)], \quad (3.47)$$

donde, del hecho de que un número conmuta con lo que sea, hemos eliminado los primeros dos conmutadores. Calculando $[T, V(N)]$ e imponiendo linealidad, tenemos

$$i\hbar \frac{dT}{dt} = [T, V(N)] = [V(N-1) - V(N)]T = \alpha'N + \beta'T + \gamma'T^\dagger, \quad (3.48)$$

lo cual implica que $\alpha' = \gamma' = 0$ y que $\beta' = V(N-1) - V(N) \in \mathbb{R}$, es decir, que la diferencia de potencial es constante entre sitios vecinos. Esto último nos dice que el potencial es de la forma

$$V(N) = -\beta'N + V_0 \equiv V_{\text{ext}}(N) + V_0, \quad (3.49)$$

el cual difiere ya en algo al Hamiltoniano de amarre fuerte estándar, aquí podemos observar un campo externo con una dependencia lineal de la posición. De esta forma, hemos encontrado expresiones para $\Delta(N)$ y $V(N)$ correspondientes al álgebra de los operadores N , T y T^\dagger , (3.23). Hay que señalar que obtener la ecuación de movimiento para T^\dagger es trivial pues notamos la siguiente relación:

$$i\hbar \frac{dT^\dagger}{dt} = - \left(i\hbar \frac{dT}{dt} \right)^\dagger, \quad (3.50)$$

haremos uso de ella varias veces en lo que viene.

Ya para terminar esta parte, la evolución de nuestro vector de operadores está dada por

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N \\ T \\ T^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(N) & -\Delta(N) \\ 0 & V(N-1) - V(N) & 0 \\ 0 & 0 & V(N+1) - V(N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ T \\ T^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.51)$$

donde tanto el acoplamiento como la diferencia de potencial son constantes y no dependen realmente de la posición, i. e.,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N \\ T \\ T^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \beta & -\beta \\ 0 & \beta' & 0 \\ 0 & 0 & -\beta' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ T \\ T^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.52)$$

con β y $\beta' \in \mathbb{R}$. La solución de (3.52) es directa, como se puede observar, por ejemplo, para T , tenemos $T(t) = e^{-\frac{i\beta't}{\hbar}}T(0)$; damos la solución completa de una vez

$$\begin{aligned} N(t) &= N(0) + \frac{\beta}{\beta'} [e^{-\frac{i\beta't}{\hbar}} - 1]T(0) + \frac{\beta}{\beta'} [e^{\frac{i\beta't}{\hbar}} - 1]T^\dagger(0) \\ T(t) &= e^{-\frac{i\beta't}{\hbar}}T(0) \quad T^\dagger(t) = e^{\frac{i\beta't}{\hbar}}T^\dagger(0), \end{aligned} \quad (3.53)$$

o en forma matricial

$$\boxed{\begin{pmatrix} N(t) \\ T(t) \\ T^\dagger(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{\beta}{\beta'}[e^{-\frac{i\beta't}{\hbar}} - 1] & \frac{\beta}{\beta'}[e^{\frac{i\beta't}{\hbar}} - 1] \\ 0 & e^{-\frac{i\beta't}{\hbar}} & 0 \\ 0 & 0 & e^{\frac{i\beta't}{\hbar}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N(0) \\ T(0) \\ T^\dagger(0) \end{pmatrix}. \quad (3.54)}$$

Mas adelante, veremos cuál es el propagador correspondiente a (3.54) y discutiremos algunas de sus propiedades.

3.3.2. Solución a la Ecuación de Heisenberg lineal para tres operadores con coeficientes independientes del tiempo: N , A y A^\dagger

A continuación, mostraremos que, redefiniendo el producto de operadores en el Hamiltoniano de la ec. (3.37) a través de

$$A \equiv \Delta(N)T, \quad (3.55)$$

y considerando relaciones de conmutación más generales entre A y N , es posible hallar una nueva expresión para el acoplamiento que producirá, como veremos más adelante, nuevos efectos sobre la propagación de pulsos en la cadena. Utilizando la definición (3.55) el Hamiltoniano ahora es

$$H = A + A^\dagger + V(N), \quad (3.56)$$

esta definición sutil traerá consigo consecuencias bastante interesantes.

Nuevamente, nos interesa la evolución temporal de nuestro sistema cuántico por lo cual calculamos las ecuaciones de movimiento para A , A^\dagger y N

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix}, H \right], \quad (3.57)$$

imponiendo linealidad, tenemos

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha' & \beta' & -\beta'^* \\ \alpha & \beta & \gamma \\ -\alpha^* & -\gamma^* & -\beta^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.58)$$

donde hemos etiquetado a los coeficientes de las combinaciones lineales de esta forma porque resultará conveniente, y donde, de una vez, hemos hecho uso de (3.50). Calculemos los conmutadores necesarios.

Empezamos con el operador de posición discreta

$$[N, H] = \Delta(N)[N, T] + [N, T^\dagger]\Delta(N) = \Delta(N)T - T^\dagger\Delta(N) = A - A^\dagger, \quad (3.59)$$

observemos bien, esta relación de conmutación ya es lineal, los coeficientes resultan ser $\alpha' = 0$ y $\beta' = 1 = \beta'^*$. Continuamos con A , tenemos

$$[A, H] = [A, A + A^\dagger + V(N)] = [A, A^\dagger] + [A, V(N)], \quad (3.60)$$

de donde vemos que necesitamos los conmutadores $[A, A^\dagger]$ y $[A, V(N)]$, un calculo directo produce

$$\begin{aligned} [A, A^\dagger] &= \Delta^2(N) - \Delta^2(N + 1), \\ [A, V(N)] &= \Delta(N) [V(N - 1) - V(N)] T, \end{aligned} \quad (3.61)$$

que al sustituir en (3.60) nos da

$$\begin{aligned} [A, H] &= \Delta^2(N) - \Delta^2(N + 1) + \Delta(N) [V(N - 1) - V(N)] T \\ &= \Delta^2(N) - \Delta^2(N + 1) + [V(N - 1) - V(N)] \Delta(N) T \\ &= \Delta^2(N) - \Delta^2(N + 1) + [V(N - 1) - V(N)] A \\ &= \alpha N + \beta A + \gamma A^\dagger, \end{aligned} \quad (3.62)$$

pues las funciones de N conmutan. Lo anterior implica, por la independencia de los operadores, las siguiente relaciones

$$\begin{aligned} \alpha N &= \Delta^2(N) - \Delta^2(N + 1), \\ \beta &= V(N - 1) - V(N), \\ \gamma &= 0. \end{aligned} \quad (3.63)$$

El sistema de ecuaciones diferenciales ahora tiene coeficientes definidos lo que permite reescribirlo como

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ \alpha & \beta & 0 \\ -\alpha & 0 & -\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} \equiv \mathbf{M} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.64)$$

ya que tanto α como β son números reales. La solución de (3.64) es

$$\boxed{\begin{pmatrix} N(t) \\ A(t) \\ A^\dagger(t) \end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{M} t} \begin{pmatrix} N(0) \\ A(0) \\ A^\dagger(0) \end{pmatrix}}. \quad (3.65)$$

Por otra parte, de las relaciones (3.63) concluimos que el potencial está dado por $V(N) = -\beta N + V_0$. Para hallar una expresión correspondiente a $\Delta(N)$, dejemos que αN actúe sobre algún estado localizado $|n\rangle$, esto da

$$\alpha N |n\rangle = \alpha n |n\rangle = [\Delta^2(N) - \Delta^2(N + 1)] |n\rangle = [\Delta^2(n) - \Delta^2(n + 1)] |n\rangle, \quad (3.66)$$

para resolver esta relación de recurrencia, intentamos el *ansatz*

$$\Delta^2(n) = c_2 n^2 + c_1 n + c_0, \quad (3.67)$$

3.3. Problemas resolubles a través de linealización algebraica

con el cual obtenemos que el acoplamiento está dado por

$$\Delta^2(n) = -\frac{\alpha}{2}n^2 + \frac{\alpha}{2}n + c_0 \quad (3.68)$$

o bien

$$\Delta(n) = \pm \sqrt{-\frac{\alpha}{2}n^2 + \frac{\alpha}{2}n + c_0}. \quad (3.69)$$

Esto es muy importante pues vemos que el acoplamiento ahora sí depende de la posición. Por otro lado, el Hamiltoniano queda como

$$H = \sqrt{\frac{\alpha}{2}(N - N^2) + c_0} T + T^\dagger \sqrt{\frac{\alpha}{2}(N - N^2) + c_0} - \beta N + V_0, \quad (3.70)$$

y recalamos que el potencial resultó ser el mismo que para el problema tratado en la discusión precedente.

Resulta necesario señalar que aún queda generalidad por cubrir. Si a las ecuaciones de movimiento lineales les agregamos un término independiente extra de tal forma que el sistema de ecuaciones diferenciales ahora sea

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dN}{dt} &= \alpha' N + \beta' A + \gamma' A^\dagger + \delta' \\ i\hbar \frac{dA}{dt} &= \alpha N + \beta A + \gamma A^\dagger + \delta \\ i\hbar \frac{dA^\dagger}{dt} &= -\alpha^* N - \gamma^* A - \beta^* A^\dagger - \delta^*, \end{aligned} \quad (3.71)$$

este se puede reducir, mediante el procedimiento ya ensayado, a

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ \alpha & \beta & 0 \\ -\alpha & 0 & -\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}. \quad (3.72)$$

En general, para resolver algo del tipo (3.71), es decir, de la forma

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}, \quad (3.73)$$

escribimos

$$\left(i\hbar \frac{d}{dt} - \mathbf{M} \right) \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}, \quad (3.74)$$

que es equivalente a

$$i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{M} t} \frac{d}{dt} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{M} t} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} \right\} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \quad (3.75)$$

como se puede comprobar fácilmente. De la ecuación anterior, tenemos

$$i\hbar \frac{d}{dt} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{M}t} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} \right\} = e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{M}t} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}, \quad (3.76)$$

integrando

$$e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{M}t} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{i\hbar} \left\{ \int_0^t e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{M}t} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} dt + i\hbar \begin{pmatrix} N_0 \\ A_0 \\ A_0^\dagger \end{pmatrix} \right\} \quad (3.77)$$

y despejando, la solución finalmente es

$$\boxed{\begin{pmatrix} N(t) \\ A(t) \\ A^\dagger(t) \end{pmatrix} = \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{M}t}}{i\hbar} \left[\int_0^t e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{M}t} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} dt + i\hbar \begin{pmatrix} N(0) \\ A(0) \\ A^\dagger(0) \end{pmatrix} \right]}. \quad (3.78)$$

En adición, vale la pena enfatizar que, debido a que el conmutador entre A y A^\dagger ahora es

$$[A, A^\dagger] = \alpha N + \delta, \quad (3.79)$$

podemos mostrar que el acoplamiento correspondiente es

$$\Delta(N) = \pm \sqrt{\frac{\alpha}{2}(N - N^2) - \delta N + c_0}, \quad (3.80)$$

notando que ahora tenemos un término de control extra, y que el campo externo es igual al que ya hemos encontrado, o sea $V(N) = -\beta N + V_0$.

Como podemos notar, la solución de nuestras ecuaciones recae en el cálculo de la matriz exponencial $e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{M}t}$. Con \mathbf{M} definida por (3.64), un cálculo produce el siguiente resultado

$$\boxed{e^{-\frac{i\mathbf{M}t}{\hbar}} = \frac{1}{\omega^2} \begin{pmatrix} \omega^2 - 2\Xi & \Gamma^* & \Gamma \\ \alpha\Gamma^* & \Lambda^* & \Xi \\ \alpha\Gamma & \Xi & \Lambda \end{pmatrix}}, \quad (3.81)$$

donde hemos definido

$$\begin{aligned} \Gamma &= \Gamma(\alpha, \beta, t) \equiv \beta(\cos \theta - 1) + i\omega \sin \theta \\ \Lambda &= \Lambda(\alpha, \beta, t) \equiv (\alpha + \beta^2) \cos \theta + \alpha + i\omega\beta \sin \theta \\ \Xi &= \Xi(\alpha, \beta, t) \equiv \alpha(1 - \cos \theta) \end{aligned} \quad (3.82)$$

junto con $\theta = \frac{\omega t}{\hbar}$ y $\omega = \sqrt{2\alpha + \beta^2}$ para ahorrar espacio.

3.3.3. Solución a la Ecuación de Heisenberg lineal para tres operadores con coeficientes dependientes del tiempo: N , A y A^\dagger

Ahora consideremos el Hamiltoniano más general que cualquiera que hemos explorado hasta ahora: con dependencia temporal en todos sus coeficientes. El Hamiltoniano con el que trataremos a continuación nos debe recordar a (3.20), sin

embargo, notaremos que aquí nuestro Hamiltoniano tiene coeficientes dependientes del tiempo así como un término extra independiente, también dependiente del tiempo. Veamos de qué hablamos. Consideremos el Hamiltoniano dependiente del tiempo dado por

$$H = \alpha(t) A + \alpha^*(t) A^\dagger + \beta(t) N + \delta(t). \quad (3.83)$$

Este Hamiltoniano describe una cadena unidimensional en presencia de un campo que varía linealmente con la posición y es modulado en el tiempo por $\beta(t)$, también los acoplamientos son modulados, en este caso por $\alpha(t)$, el término independiente en realidad no aporta mucho. Para entender esto, observemos que $\delta(t)$ se puede absorber en la función de onda haciendo

$$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int^t \delta(t) dt} \phi(t), \quad (3.84)$$

con lo cual vemos que podemos prescindir de dicho término del Hamiltoniano. Además, podemos reparametrizar el tiempo, pues como podemos factorizar cantidades complejas como módulo por fase, tenemos que (3.83) es equivalente a

$$i\hbar \frac{1}{|\alpha(t)|} \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} \equiv i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial \tau} = \left\{ e^{i \arg \alpha} A + e^{-i \arg \alpha} A^\dagger + \frac{\beta(t)}{|\alpha(t)|} N \right\} |\psi\rangle, \quad (3.85)$$

donde hemos definido

$$\tau \equiv \int^t |\alpha(t')| dt', \quad (3.86)$$

y donde además, ya hemos omitido el término independiente $\delta(t)$. En seguida proponemos una transformación de norma de la forma

$$|\tilde{\psi}\rangle = e^{i\gamma N} |\psi\rangle, \quad (3.87)$$

y calculamos la siguiente cantidad

$$\begin{aligned} e^{i\gamma N} i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{d\tau} &= e^{i\gamma N} i\hbar \frac{d}{d\tau} (e^{-i\gamma N} |\tilde{\psi}\rangle) = e^{i\gamma N} i\hbar \left[e^{-i\gamma N} \frac{d|\tilde{\psi}\rangle}{d\tau} - i \frac{d\gamma}{d\tau} N e^{-i\gamma N} |\tilde{\psi}\rangle \right] \\ &= i\hbar \frac{d|\tilde{\psi}\rangle}{d\tau} + \hbar \frac{d\gamma}{d\tau} N |\tilde{\psi}\rangle = \left(i\hbar \frac{d}{d\tau} + \hbar \frac{d\gamma}{d\tau} N \right) |\tilde{\psi}\rangle. \end{aligned} \quad (3.88)$$

Premultiplicando (3.85) por $e^{i\gamma N}$ y haciendo uso de (3.88) tenemos

$$\begin{aligned} e^{i\gamma N} i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial \tau} &= \left(i\hbar \frac{d}{d\tau} + \hbar \frac{d\gamma}{d\tau} N \right) |\tilde{\psi}\rangle = e^{i\gamma N} \left\{ e^{i \arg \alpha} A + e^{-i \arg \alpha} A^\dagger + \frac{\beta(t)}{|\alpha(t)|} N \right\} |\psi\rangle \\ &= e^{i\gamma N} \left\{ e^{i \arg \alpha} A + e^{-i \arg \alpha} A^\dagger + \frac{\beta(t)}{|\alpha(t)|} N \right\} e^{-i\gamma N} |\tilde{\psi}\rangle. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Sin embargo, las siguientes relaciones son válidas:

$$\begin{aligned} e^{i\gamma N} A e^{-i\gamma N} &= e^{i\gamma} A, \\ e^{i\gamma N} A^\dagger e^{-i\gamma N} &= e^{-i\gamma} A^\dagger, \end{aligned} \quad (3.90)$$

como se puede demostrar, por lo que podemos escribir

$$\left(i\hbar\frac{d}{d\tau} + \hbar\frac{d\gamma}{d\tau}N\right)|\tilde{\psi}\rangle = \left\{e^{i\arg\alpha}e^{i\gamma}A + e^{-i\arg\alpha}e^{-i\gamma}A^\dagger + \frac{\beta(t)}{|\alpha(t)|}N\right\}|\tilde{\psi}\rangle. \quad (3.91)$$

Finalmente, si hacemos $\gamma = -\arg\alpha$ obtenemos

$$\left(i\hbar\frac{d}{d\tau} + \hbar\frac{d\gamma}{d\tau}N\right)|\tilde{\psi}\rangle = \left\{A + A^\dagger + \frac{\beta(t)}{|\alpha(t)|}N\right\}|\tilde{\psi}\rangle, \quad (3.92)$$

ahora sólo renombramos como $\bar{\beta}(t)$ a $\frac{\beta(t)}{|\alpha(t)|} - \hbar\frac{d\gamma}{d\tau}$ y escribimos

$$i\hbar\frac{d|\tilde{\psi}\rangle}{d\tau} = \{A + A^\dagger + \bar{\beta}(t)N\}|\tilde{\psi}\rangle = H|\tilde{\psi}\rangle. \quad (3.93)$$

Este desarrollo permite darnos cuenta de que (3.83) es equivalente a (3.93), es decir, a un Hamiltoniano que incluye solamente un campo que depende linealmente de la posición y es modulado en el tiempo mediante $\bar{\beta}(t)$, por lo tanto, de ahora en adelante trataremos sólo con él.

Como ya sabemos, las ecuaciones de movimiento están dadas por (3.57) y otra vez exigimos linealidad

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha' & \beta' & \gamma' \\ \alpha & \beta & \gamma \\ \alpha'' & \beta'' & \gamma'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.94)$$

esta vez notando que aquí sí permitimos dependencia temporal en todos los coeficientes. Los conmutadores que necesitamos son: el conmutador de N con H dado por

$$[N, H] = \Delta(N)[N, T] + [N, T^\dagger]\Delta(N) = \Delta(N)T - T^\dagger\Delta(N) = A - A^\dagger, \quad (3.95)$$

una expresión que ya habíamos encontrado y que notamos que implica que $\alpha' = 0$, $\beta' = 1 = -\gamma'$. En seguida, el conmutador de A con H es

$$[A, H] = [A, A + A^\dagger + \bar{\beta}(t)N] = [A, A^\dagger] + \bar{\beta}(t)[A, N], \quad (3.96)$$

y los conmutadores requeridos resultan ser

$$\begin{aligned} [A, A^\dagger] &= \Delta^2(N) - \Delta^2(N+1) \\ [A, N] &= -A, \end{aligned} \quad (3.97)$$

cuya sustitución en (3.96) produce

$$\begin{aligned} [A, H] &= \Delta(N)^2 - \Delta(N+1)^2 - \bar{\beta}(t)A \\ &= \alpha N + \beta A + \gamma A^\dagger. \end{aligned} \quad (3.98)$$

Analizando esta última ecuación, concluimos que $\alpha N = \Delta(N)^2 - \Delta(N+1)^2$, lo cual implica que $\Delta(N) = \pm\sqrt{-\frac{\alpha}{2}N^2 + \frac{\alpha}{2}N + c_0}$ sigue siendo la función de acoplamiento

3.3. Problemas resolubles a través de linealización algebraica

que ya habíamos encontrado, que $\beta = -\bar{\beta}(t)$, es decir, el coeficiente β de (3.94) resulta dependiente del tiempo, y que $\gamma = 0$. Para nuestra última ecuación de movimiento hacemos uso de (3.50). Con esto, hemos hallado la matriz que evoluciona al vector de operadores, a saber

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ \alpha & -\bar{\beta}(t) & 0 \\ -\alpha^* & 0 & \bar{\beta}(t)^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} \equiv \mathbf{M}(t) \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.99)$$

vemos que el sistema difiere del caso independiente del tiempo únicamente en que aquí $\beta = -\bar{\beta}(t)$. Note también que tanto α como $\bar{\beta}(t)$ son reales.

La solución al sistema de ecuaciones diferenciales $i\hbar \dot{\mathbf{v}}(t) = \mathbf{M}(t)\mathbf{v}(t)$ la obtenemos notando la dependencia temporal de la matriz $\mathbf{M} = \mathbf{M}(t)$ y escribiendo a $\mathbf{M}(t)$ en la base de Gell-Mann. La base de Gell-Mann consiste de las matrices de Gell-Mann dadas por

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \lambda_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_6 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \lambda_7 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_8 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}}. \end{aligned} \quad (3.100)$$

Todas son de traza cero y junto con la matriz identidad de 3×3 forman una base para el espacio de matrices de 3×3 .

En dicha base, \mathbf{M} se expresa como una combinación lineal de sus elementos, a saber

$$\mathbf{M}(t) = \sum_{i=0}^8 m_i(t) \lambda_i, \quad (3.101)$$

siendo los coeficientes de la combinación lineal cantidades dependientes de tiempo, además $\lambda_0 \equiv \mathbb{1}_{3 \times 3}$. Entonces, la ecuación diferencial vectorial es

$$i\hbar \left(\frac{d}{dt} - \frac{\mathbf{M}(t)}{i\hbar} \right) \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} = 0, \quad (3.102)$$

y sabemos que para una matriz que en general no conmuta a tiempos distintos, i. e. $[\mathbf{M}(t), \mathbf{M}(t')] \neq 0$, tenemos como solución a la serie de Dyson

$$\boxed{\begin{pmatrix} N(t) \\ A(t) \\ A^\dagger(t) \end{pmatrix} = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \mathbf{M}(t') dt' \right\} \begin{pmatrix} N_0 \\ A_0 \\ A_0^\dagger \end{pmatrix},} \quad (3.103)$$

vea el apéndice A para una derivación detallada de la solución. Ahí mostramos, con ayuda de la definición

$$\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \mathbf{M}(t') dt' \right\} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n} \mathbf{C}_n(t), \quad (3.104)$$

donde $\mathbf{C}_0(t) = 1$ y

$$\mathbf{C}_n(t) = \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathbf{M}(t_1) \cdots \mathbf{M}(t_n), \quad n \geq 1, \quad (3.105)$$

que la siguiente relación se cumple:

$$\mathbf{C}_n(t) = \int_{t_0}^t dt' \mathbf{M}(t') \mathbf{C}_{n-1}(t'), \quad (3.106)$$

una vez más, en el apéndice se encuentran los argumentos de la razón de ser de (3.106). Si queremos los elementos matriciales de $\mathbf{C}_n(t) \forall n$ escribimos (3.106) en la base de Gell-Mann

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_n(t) &= \int_{t_0}^t dt' m_i(t') \lambda_i [c_{n-1}(t')]_j \lambda_j \\ &= \int_{t_0}^t dt' m_i(t') [c_{n-1}(t')]_j \lambda_i \lambda_j, \end{aligned} \quad (3.107)$$

donde se suma sobre índices repetidos y donde la cantidad $m_i(t') [c_{n-1}(t')]_j$ sólo es un escalar. Además, de las relaciones de conmutación y anticonmutación de las matrices de Gell-Mann, tenemos

$$\lambda_i \lambda_j = \frac{1}{2} [\lambda_i, \lambda_j] + \frac{1}{2} \{\lambda_i, \lambda_j\} = i f_{ijk} \lambda_k + d_{ijk} \lambda_k \equiv e_{ijk} \lambda_k, \quad (3.108)$$

con $f_{ij0} = 0$ y $d_{ij0} = \frac{2}{3} \delta_{ij}$. De hecho, todos los demás coeficientes son conocidos y están tabulados en [35], p. 190. De esta forma, la expresión para $\mathbf{C}_n(t)$, Ec. (3.107), se puede reescribir como

$$\mathbf{C}_n(t) = c_n^k(t) \lambda_k \quad (3.109)$$

siendo los coeficientes de la combinación lineal

$$c_n^k(t) = \int_{t_0}^t dt' m_i(t') c_{n-1}^j(t') e_{ijk}. \quad (3.110)$$

Con esto queda determinada la solución del problema correspondiente al Hamiltoniano de la Ec. (3.93).

3.3.4. Acoplamientos y campos en función de la posición en el cristal

A continuación se resumen las expresiones obtenidas para los acoplamientos y campos en función de la posición en el cristal para cada uno de los problemas estudiados. Hacemos algunos comentarios sobre sus características. Comencemos por el problema correspondiente al Hamiltoniano (3.36), el acoplamiento y el campo resultaron ser

$$\begin{aligned}\Delta(N) &= \beta \\ V(N) &= -\beta'N + V_0 \equiv V_{\text{ext}} + V_0\end{aligned}\quad (3.111)$$

con $\beta, \beta' \in \mathbb{R}$. Entonces, cuando los operadores de red N, T y T^\dagger satisfacen el álgebra (3.23), resulta que el acoplamiento es constante como en el modelo convencional de amarre fuerte. Lo que es distinto a dicho modelo es la presencia del campo externo V_{ext} . Ahora nuestro sistema cuántico es más interesante pues la dinámica de las ondas debe responder a la presencia de este campo. Es claro que la elección particular $\beta' = 0$ resulta en el modelo convencional de amarre fuerte a primeros vecinos.

Al avanzar, lo siguiente que encontramos fue que, para el Hamiltoniano (3.56), las expresiones posibles para el acoplamiento y el campo son

$$\begin{aligned}\Delta(N) &= \pm \sqrt{-\frac{\alpha}{2}N^2 + \frac{\alpha}{2}N + c_0}. \\ V(N) &= -\beta N + V_0,\end{aligned}\quad (3.112)$$

donde el acoplamiento ahora ya depende de la posición discreta mientras que el campo es igual al caso anterior. Observemos que las propiedades de propagación de pulsos en la cadena depende directamente de las características del acoplamiento y el campo y que éstas se modifican a través de una variación adecuada de los parámetros de nuestro modelo. Este hecho tan importante tiene su origen en algo que quizás no enfatizamos en su momento. Procedamos a hacerlo ahora.

Si regresamos a la discusión del problema asociado con el Hamiltoniano (3.56) podemos notar, siendo algo observadores, que al calcular los conmutadores nos encontramos e hicimos uso, aunque quizás de forma un poco implícita, del álgebra de los operadores N, A y A^\dagger definida de manera general por

$$[A, A^\dagger] = \alpha N, \quad [N, A] = A, \quad \text{y} \quad [N, A^\dagger] = -A^\dagger, \quad (3.113)$$

la primera relación de conmutación, entre A y A^\dagger , se puede notar comparando (3.61) y (3.62) mientras que las dos últimas se calculan directamente. Esta observación es fundamental. Resulta que el álgebra (de Cartan) de los operadores que describen nuestro sistema definen los escenarios físicamente posibles.

Después, hemos considerado dependencia temporal, lo que resultó en las siguientes expresiones para el acoplamiento y el campo

$$\begin{aligned}\Delta(N) &= \pm \sqrt{-\frac{\alpha}{2}N^2 + \frac{\alpha}{2}N + c_0} \\ V(N) &= \bar{\beta}(t)N\end{aligned}\quad (3.114)$$

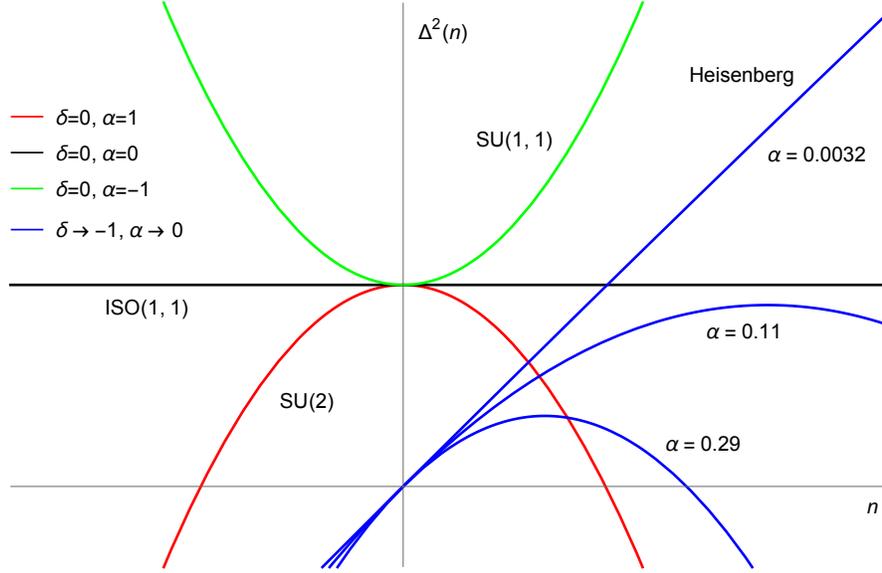


Figura 3.2: Acoplamiento en función de la posición según el valor de los parámetros alfa y delta. Los grupos dinámicos correspondientes se muestran. Vemos que las distintas combinaciones de valores definen el dominio de $\Delta(n)$. Cuatro casos son posibles, $\alpha = 0$ produce un dominio infinito, o semi-infinito, según el valor de δ , $\alpha = -1$ también permite infinitos valores propios de N , finalmente $\alpha = 1$ restringe a n entre $n_{\text{mín}}$ y $n_{\text{máx}}$, un intervalo finito.

notamos que, aunque tenemos una función para el acoplamiento idéntica al caso independiente del tiempo, el campo ahora depende del tiempo lo cual nos permitiría controlar las propiedades de propagación de pulsos en el cristal.

En cuanto a los operadores N , A y A^\dagger , tanto en el caso del Hamiltoniano con coeficientes dependientes e independientes del tiempo, una expresión más general es posible para el acoplamiento, a saber

$$\Delta(N) = \pm \sqrt{\frac{\alpha}{2}(N - N^2) - \delta N + c_0}, \quad (3.115)$$

cuando admitimos un parámetro independiente en nuestras ecuaciones de movimiento. El conmutador entre A y A^\dagger se ve modificado en este caso y está dado por la Ec. (3.79). Se prefiere esta expresión para el acoplamiento, (3.115), porque, trabajando con ella, los demás casos discutidos, con coeficientes independientes del tiempo, se pueden obtener al elegir los valores de α y δ adecuados. En cuanto al campo externo, la conclusión es que siempre se trata de una función lineal de la posición, como veremos en el siguiente capítulo, esta forma simple da lugar a fenómenos muy interesantes.

Para proseguir, discutiremos la expresión más general posible para los acoplamientos, i. e. (3.115). Una simple observación nos permite entender que de los po-

sibles valores para α podemos centrarnos en los valores representativos dados por $\alpha \in \{-1, 0, 1\}$ los cuales cubren las posibilidades de que α sea negativo, cero o positivo. Exploremos qué sucede en cada caso.

Empecemos por la izquierda de la recta real. Un valor negativo para α significa que la forma de nuestra función de acoplamiento al cuadrado, $\Delta^2(N)$ (elegimos esta presentación para el acoplamiento para evitar trabajar directamente con la raíz cuadrada), es la de una parábola que abre hacia arriba, como se observa en la Fig. 3.2.

Esta forma de los acoplamientos nos dice algunas cosas. Primero, que el dominio de nuestra función de acoplamiento es infinito, aquí hablamos de $\Delta(N)$, lo que nos lleva a entender que este acoplamiento describe una cadena unidimensional no homogénea de tamaño infinito. ¿Por qué?, recordemos que el acoplamiento debe ser real para todo n , y que la raíz cuadrada de un número positivo siempre es real. Podemos decir también que el acoplamiento, es más intenso a medida que nos alejamos del centro.

En seguida, el caso $\alpha = 0$ lo trataremos de una forma algo sofisticada en vez de simplemente imponer valores para los coeficientes en el acoplamiento, aunque resultaría equivalente. A primera vista, un valor nulo para α implica que el acoplamiento al cuadrado ahora depende linealmente de la posición discreta n , lo cual es cierto. Sin embargo, por razones que se expondrán más adelante nos gustaría aproximarnos a la recta que se observa en la Fig. 3.2 asegurando que su pendiente sea la unidad. Para lograr esto, consideremos el acoplamiento (3.115). Podemos escribirlo de la forma

$$\Delta^2(N) = \frac{\alpha}{2}(N - N^2) - \delta N + c_0, \quad (3.116)$$

ahora, eligiendo $c_0 = 0$ y factorizando, tenemos

$$\Delta^2(N) = -\frac{\alpha}{2}N(N - (\delta/\alpha - 1)) \equiv aN(N - b), \quad (3.117)$$

entonces, el límite que nos interesa es aquel en el que $a \rightarrow 0$ y $ab \rightarrow -1$. De hecho, observemos que

$$ab \rightarrow -1 \quad \text{implica} \quad a \rightarrow -\frac{1}{b}, \quad (3.118)$$

esto quiere decir que el límite se “alcanza” si alejamos mucho del origen a la raíz distinta de cero del polinomio que define al acoplamiento, i. e. $b \rightarrow \infty$, y a la vez disminuimos α acordemente, i. e. $a \rightarrow 0$. Este proceso se puede ver en la Fig. 3.2. La expresión resultante es

$$\Delta(N) = \pm\sqrt{N}. \quad (3.119)$$

Este acoplamiento varia como la raíz de la posición discreta y puesto que queremos amplitudes de salto reales observamos que el dominio ahora sólo incluye a los índices $n \geq 0$, i. e. la cadena es semi-infinita.

Finalmente, el caso $\alpha = 1$ corresponde, hablando del acoplamiento al cuadrado, a una parábola que abre hacia abajo, como se puede observar en la Fig. 3.2, las propiedades de la función de acoplamiento son un tanto claras, el dominio ahora está restringido a un intervalo finito, donde se garantiza que el acoplamiento sea real,

como lo venimos mencionando. Entonces, estamos ante lo que resulta ser una cadena de tamaño finito, definida por el valor positivo de α . En lo que sigue detallaremos más el rol de α y δ pues el álgebra de los operadores de red es de suma importancia y ésta queda definida por los parámetros aquí discutidos.

3.3.5. Ecuaciones de recurrencia en general

Ahora es el turno de hablar de nuestras Ecs. MM discretas, para esto, primero, a manera de ejemplo, damos las ecuaciones de Mello-Moshinsky discretas, y de una vez su solución, para el primer problema que tratamos, descrito por el Hamiltoniano (3.36). Recordemos que las ecuaciones de movimiento son

$$\begin{pmatrix} N(t) \\ T(t) \\ T^\dagger(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{\beta}{\beta'} [e^{-\frac{i\beta't}{\hbar}} - 1] & \frac{\beta}{\beta'} [e^{\frac{i\beta't}{\hbar}} - 1] \\ 0 & e^{-\frac{i\beta't}{\hbar}} & 0 \\ 0 & 0 & e^{\frac{i\beta't}{\hbar}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N(0) \\ T(0) \\ T^\dagger(0) \end{pmatrix}. \quad (3.120)$$

Además, sabemos que en la imagen de Heisenberg, la evolución de un sistema cuántico está dada por la Ec. de movimiento de Heisenberg

$$O^{(H)}(t) = U^\dagger O^H(0) U, \quad (3.121)$$

con esto, unas Ecs. MM discretas se pueden obtener de (3.120) al hacer uso de (3.121), escribamos (3.120) de la forma

$$\begin{aligned} N(0)U &= UN(0) + \frac{\beta}{\beta'} [e^{-\frac{i\beta't}{\hbar}} - 1] UT(0) + \frac{\beta}{\beta'} [e^{\frac{i\beta't}{\hbar}} - 1] UT^\dagger(0) \\ T(0)U &= e^{-\frac{i\beta't}{\hbar}} UT(0) \quad T^\dagger(0)U = e^{\frac{i\beta't}{\hbar}} UT^\dagger(0), \end{aligned} \quad (3.122)$$

donde hemos multiplicado por U por la derecha. Ensandwichando con estados atómicos, tenemos

$$\begin{aligned} mU_{mn} &= nU_{mn} + \frac{\beta}{\beta'} (e^{-\frac{i\beta't}{\hbar}} - 1) U_{m,n+1} + \frac{\beta}{\beta'} (e^{\frac{i\beta't}{\hbar}} - 1) U_{m,n-1} \\ U_{m-1,n} &= e^{-\frac{i\beta't}{\hbar}} U_{m,n+1} \quad U_{m+1,n} = e^{\frac{i\beta't}{\hbar}} U_{m,n-1}. \end{aligned} \quad (3.123)$$

Este problema ya ha sido tratado por Yellin [36], aunque de forma distinta. También es un caso particular de un Hamiltoniano con un campo dependiente del tiempo que fue profundamente estudiado por Sadurní [25], por lo que daremos la solución en pocos pasos. Como lo hizo Sadurní, notemos que

$$U_{mn} = e^{\frac{i\beta't}{\hbar}} U_{m-1,n-1} \quad (3.124)$$

implica

$$U_{mn} = e^{i\frac{(n+m)\beta't}{2\hbar}} V_{m-n}, \quad (3.125)$$

lo cual, al sustituir en la primera relación de recurrencia en (3.122), produce

$$(m-n)V_{m-n} = \frac{\beta}{\beta'}(e^{-\frac{i\beta't}{\hbar}} - 1)e^{\frac{i\beta't}{2\hbar}}V_{m-n-1} + \frac{\beta}{\beta'}(e^{\frac{i\beta't}{\hbar}} - 1)e^{-\frac{i\beta't}{2\hbar}}V_{m-n+1}, \quad (3.126)$$

o puesto de otra forma

$$(m-n)V_{m-n} = \frac{\beta}{\beta'}(e^{-\frac{i\beta't}{2\hbar}} - e^{\frac{i\beta't}{2\hbar}})V_{m-n-1} + \frac{\beta}{\beta'}(e^{\frac{i\beta't}{\hbar}} - e^{-\frac{i\beta't}{2\hbar}})V_{m-n+1}, \quad (3.127)$$

que inmediatamente nos permite utilizar funciones trigonométricas

$$(m-n)V_{m-n} = \frac{\beta}{\beta'}2e^{-\frac{i\pi}{2}}\sin(\beta t/2\hbar)V_{m-n-1} + \frac{\beta}{\beta'}2e^{\frac{i\pi}{2}}\sin(\beta t/2\hbar)V_{m-n+1}. \quad (3.128)$$

Definiendo $\nu = m - n$, finalmente tenemos

$$\frac{\nu}{2\sin(\beta t/2\hbar)\beta/\beta'}V_{\nu} = e^{-\frac{i\pi}{2}}V_{\nu-1} + e^{\frac{i\pi}{2}}V_{\nu+1}. \quad (3.129)$$

La solución es familiar

$$\begin{aligned} U_{mn} &= e^{-i(m-n)\pi/2}e^{i(m+n)\frac{\beta}{2\hbar}t}J_{m-n}\left(\frac{\beta\sin(\frac{\beta}{2\hbar}t)}{\beta'}\right) \\ &= i^{n-m}e^{i(m+n)\frac{\beta}{2\hbar}t}J_{m-n}\left(\frac{\beta\sin(\frac{\beta}{2\hbar}t)}{\beta'}\right), \end{aligned} \quad (3.130)$$

donde J es la función de Bessel del primer tipo. Mencionemos que el problema corresponde a un sistema cuántico que consiste en una cadena unidimensional con acoplamiento constante, igual a β , y en presencia de un campo externo que varía linealmente con la posición discreta, (3.49). La escalera de Stark guarda una relación directa con dicho Hamiltoniano. Este caso particular lo presentamos solamente por propósitos ilustrativos y referimos a [25] para una discusión profunda de un resultado más general. En lo que sigue nos concentraremos en el Hamiltoniano (3.56) y obtendremos sus Ecs. de Mello-Moshinsky discretas correspondientes al caso independiente del tiempo.

Centremos nuestra atención de nuevo en las ecuaciones de movimiento, esta vez correspondientes al Hamiltoniano (3.56). Lo que haremos en lo que sigue será escribir nuestras ecuaciones de Mello-Moshinsky discretas, en forma de relaciones de recurrencia, para el operador de evolución temporal, responsable de la evolución de los operadores en la imagen de Heisenberg.

Se sabe que la solución para el caso de la ec. de Heisenberg lineal con coeficientes independientes del tiempo, para los operadores N , A y A^\dagger , es la matriz exponencial $e^{-\frac{i\mathbf{M}t}{\hbar}}$, con \mathbf{M} definida por (3.64). Recordando la solución

$$\begin{pmatrix} N(t) \\ A(t) \\ A(t)^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{\omega^2} \begin{pmatrix} \omega^2 - 2\Xi & \Gamma^* & \Gamma \\ \alpha\Gamma^* & \Lambda^* & \Xi \\ \alpha\Gamma & \Xi & \Lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_0 \\ A_0 \\ A_0^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.131)$$

sabemos que representa el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned}
 N(t) &= \frac{1}{\omega^2} [(\omega^2 - 2\Xi)N(0) + \Gamma^*A(0) + \Gamma A^\dagger(0)] \\
 A(t) &= \frac{1}{\omega^2} [\alpha\Gamma^*N(0) + \Lambda^*A(0) + \Xi A^\dagger(0)] \\
 A^\dagger(t) &= \frac{1}{\omega^2} [\alpha\Gamma N(0) + \Xi A(0) + \Lambda A^\dagger(0)].
 \end{aligned} \tag{3.132}$$

A continuación se escriben las ecuaciones de Mello-Moshinsky discretas para los operadores N , A y A^\dagger mediante el procedimiento ya discutido, tenemos para el operador de posición discreta

$$\begin{aligned}
 [N(0)U]_{m'm} &= \langle m' | N(0)U | m \rangle = m' U_{m'm} \\
 &= \frac{1}{\omega^2} \langle m' | U [(\omega^2 - 2\Xi)N(0) + \Gamma^*A(0) + \Gamma A^\dagger(0)] | m \rangle \\
 &= \frac{1}{\omega^2} [m(\omega^2 - 2\Xi)U_{m'm} + \Delta(m+1)\Gamma^*U_{m',m+1} + \Delta(m)\Gamma U_{m',m-1}],
 \end{aligned} \tag{3.133}$$

donde se ha hecho uso de la definición de A y A^\dagger . Para estos últimos tenemos las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned}
 [A(0)U]_{m'm} &= \langle m' | A(0)U | m \rangle = \Delta(m')U_{m'-1,m} \\
 &= \frac{1}{\omega^2} \langle m' | U (\alpha\Gamma^*N(0) + \Lambda^*A(0) + \Xi A^\dagger(0)) | m \rangle \\
 &= \frac{1}{\omega^2} (m\alpha\Gamma^*U_{m'm} + \Delta(m+1)\Lambda^*U_{m',m+1} + \Delta(m)\Xi U_{m',m-1})
 \end{aligned} \tag{3.134}$$

para A , y

$$\begin{aligned}
 [A(0)^\dagger U]_{m'm} &= \frac{1}{\omega^2} (m\alpha\Gamma U_{m'm} + \Delta(m+1)\Xi U_{m',m+1} + \Delta(m)\Lambda U_{m',m-1}) \\
 &= \Delta(m'+1)U_{m'+1,m},
 \end{aligned} \tag{3.135}$$

para A^\dagger . En su presentación final, factorizando al complejo Γ , las relaciones de recurrencia adquieren la siguiente forma

$$\boxed{U_{m'm} \left[\frac{m'\omega^2 - m(\omega^2 - 2\Xi)}{|\Gamma|} \right] = \Delta(m+1)e^{-i\arg\Gamma}U_{m',m+1} + \Delta(m)e^{i\arg\Gamma}U_{m',m-1}} \tag{3.136}$$

$$\boxed{\omega^2\Delta(m')U_{m'-1,m} = m\alpha\Gamma^*U_{m'm} + \Delta(m+1)\Lambda^*U_{m',m+1} + \Delta(m)\Xi U_{m',m-1}} \tag{3.137}$$

$$\boxed{\omega^2\Delta(m'+1)U_{m'+1,m} = m\alpha\Gamma U_{m'm} + \Delta(m+1)\Xi U_{m',m+1} + \Delta(m)\Lambda U_{m',m-1}.} \tag{3.138}$$

Estas relaciones de recurrencia conectan las entradas contiguas de la matriz que representa al operador de evolución temporal en la base de estados localizados y su solución nos da directamente el propagador mediante la definición (3.32). El conjunto de relaciones de recurrencia para U : (3.136), (3.137) y (3.138) son nuestras Ecuaciones de Mello-Moshinsky discretas para el operador de evolución temporal correspondiente al Hamiltoniano (3.56). Un camino hacia la solución de estas relaciones de recurrencia se traza con la teoría que revisaremos a continuación. La solución la damos más adelante.

3.4. Teoría de grupos semisimples SU(2) y SU(1,1)

Una observación interesante es que el conjunto de operadores $\{A, A^\dagger, N\}$ tiene una estructura de grupo. De hecho, esto es lo que ha permitido obtener diversas expresiones analíticas para los propagadores, como ejemplo [2], [25] así como el presente trabajo. En efecto, hemos visto que varias relaciones de conmutación son posibles, todas codificadas en la expresión general $[A, A^\dagger] = \alpha N + \delta$. Más aún, es el grupo al que estos operadores pertenecen lo que define las propiedades físicas de las cadenas tales como el tamaño y los acoplamientos. Por lo tanto, vemos necesario un estudio detallado de teoría de grupos. En la presente sección describimos las propiedades de los grupos semisimples de rango uno así como el caso degenerado que encarna el álgebra de Heisenberg. Se presenta una descripción sistemática de sus propiedades algebraicas.

3.4.1. Constantes de estructura, álgebra de Cartan y forma de Killing

Empecemos motivando físicamente la discusión. Recordemos que en mecánica cuántica el momento angular es definido como el generador de las rotaciones. Como es bien sabido, las rotaciones forman el grupo conocido como SO(3). Se puede mostrar que las relaciones de conmutación entre las componentes del operador de momento angular en mecánica cuántica son

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}J_k. \quad (3.139)$$

Resulta que SU(2), uno de los grupos en los que estamos interesados, es localmente isomorfo a SO(3), como se puede probar, por lo que el álgebra de Lie su(2) es isomorfa al álgebra del momento angular so(3), esto significa que las constantes de estructura del álgebra de SU(2) están dadas por el símbolo de Levi-Civita ϵ_{ijk} , el cual es totalmente antisimétrico con $\epsilon_{123} = 1$, multiplicado por i .

Además, tomando la siguientes combinaciones lineales

$$J_+ \equiv J_1 + iJ_2 \quad \text{y} \quad J_- \equiv J_1 - iJ_2, \quad (3.140)$$

podemos mostrar que estos nuevos operadores satisfacen las relaciones de conmuta-

ción

$$\begin{aligned} [J_+, J_-] &= 2J_3 \\ [J_3, J_\pm] &= \pm J_\pm. \end{aligned} \quad (3.141)$$

El conjunto (3.141) se conoce como el álgebra de Cartan de SU(2) y consiste en operadores de subida, J_+ , de bajada, J_- y de “peso”, J_3 .

La forma de Killing para su(2) se obtiene con ayuda de sus constantes de estructura y da

$$g_{\sigma\lambda} = -\epsilon_{\sigma jk} \epsilon_{\lambda kj}, \quad (3.142)$$

mientras que de la relación entre el símbolo de Levi-Civita y la delta de Kronecker se sigue que (3.142) se reduce a

$$g_{\sigma\lambda} = 2\delta_{\sigma\lambda}, \quad (3.143)$$

esta última ecuación nos permite saber que el determinante de $g_{\sigma\lambda}$ es

$$\det g_{\sigma\lambda} = \det 2\delta_{\sigma\lambda} = 8 \neq 0. \quad (3.144)$$

Por lo tanto, el álgebra su(2) es semisimple, de acuerdo al criterio de Cartan.

El operador de Casimir para grupos compactos se define como la suma de los cuadrados de los generadores del grupo. Para SU(2) tenemos el operador de Casimir

$$\mathbf{J}^2 = \sum_{n=1}^3 J_n^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2, \quad (3.145)$$

el cual conmuta con cualquier generador de SU(2)

$$[\mathbf{J}^2, J_k] = 0, \quad k = 1, 2, 3, \quad (3.146)$$

lo anterior implica que \mathbf{J}^2 y, digamos, J_3 se pueden diagonalizar simultáneamente y permite identificar a sus vectores propios mediante dos etiquetas, j y m , que cumplen las ecuaciones de valores propios

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 |j, m\rangle &= j(j+1) |j, m\rangle \\ J_3 |j, m\rangle &= m |j, m\rangle. \end{aligned} \quad (3.147)$$

Las representaciones unitarias irreducibles que se obtienen al elegir alguno de los J_k son equivalentes.

En esta base, $\{|j, m\rangle\}$, en la que J_3 es diagonal, los elementos matriciales de los operadores de subida y bajada, $J_\pm = J_1 \pm iJ_2$, son

$$\langle j', m' | J_\pm |j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \delta_{j'j} \delta_{m', m \pm 1}, \quad (3.148)$$

donde m y m' van de $-j$ a j en pasos enteros, y donde $j = \frac{N}{2}$, con $N \in \mathbb{N}_0$. Los de J_3 son

$$\langle j', m' | J_3 |j, m\rangle = m \delta_{j', j} \delta_{m', m}. \quad (3.149)$$

3.4. Teoría de grupos semisimples SU(2) y SU(1,1)

Para proseguir, consideremos el grupo no compacto SU(1,1). Sus generadores, K_i , $i = 0, 1, 2$, satisfacen las relaciones de conmutación

$$\begin{aligned} [K_1, K_2] &= -iK_0, \\ [K_2, K_0] &= iK_1, \\ [K_0, K_1] &= iK_2. \end{aligned} \tag{3.150}$$

Vale la pena notar que las relaciones de conmutación de su(1,1) difieren de aquellas de su(2) por un signo, a saber, el de K_0 . Explícitamente, las constantes de estructura distintas de cero son

$$C_{120} = -C_{210} = -1, \quad C_{201} = -C_{021} = 1, \quad C_{012} = -C_{102} = 1. \tag{3.151}$$

La base de Cartan-Weyl para SU(1,1) se obtiene al definir las siguientes combinaciones lineales

$$\begin{aligned} K_+ &\equiv K_1 + iK_2 \\ K_- &\equiv K_1 - iK_2, \end{aligned} \tag{3.152}$$

que junto con K_0 cumplen las nuevas relaciones de conmutación

$$\begin{aligned} [K_+, K_-] &= -2K_0 \\ [K_0, K_{\pm}] &= \pm K_0, \end{aligned} \tag{3.153}$$

de nueva cuenta, estas relaciones de conmutación difieren de las de SU(2) por el signo correspondiente a K_0 . Las relaciones (3.153) se conocen como el álgebra de Cartan de SU(1,1). Esta base vectorial define de forma única a SU(1,1), como lo hace el álgebra de Lie (3.150). De esta forma, nuevamente hemos puesto al álgebra en una forma estándar que consiste en operadores de escalera, K_+ y K_- , y de peso, K_0 .

La semisimplicidad de SU(1,1) se verifica con ayuda de la forma de Killing, que para SU(1,1) da

$$g_{\sigma\lambda} = 2 \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{3.154}$$

con lo que es fácil ver que el determinante de (3.154) es $\det g_{\sigma\lambda} = 8 \neq 0$, lo cual prueba que SU(1,1) es un grupo semisimple.

Finalmente, el operador de Casimir para el grupo SU(1,1) se define como

$$\mathbf{K}^2 \equiv K_1^2 + K_2^2 - K_0^2 \tag{3.155}$$

que recuerda a un producto interno de Minkowski, con la convención de tipo espacio. Además, conmuta con todo K_i , es decir

$$[\mathbf{K}^2, K_i] = 0, \quad i = 0, 1, 2. \tag{3.156}$$

Contrario a SU(2), para SU(1,1) existen diversas representaciones unitarias irreducibles inequivalentes todas de dimension infinita, por tratarse de un grupo no

compacto, según sea el valor de k , el cual, en general, es elemento de \mathbb{C} . Se tienen las ecuaciones de valores propios

$$\begin{aligned} \mathbf{K}^2 |k, n\rangle &= k(1-k) |n, k\rangle, \\ K_0 |k, n\rangle &= n |k, n\rangle, \end{aligned} \quad (3.157)$$

donde $n = n' + \epsilon$ con $n' \in \mathbb{Z}$ y $\epsilon \in (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$. De especial interés para nosotros son los valores $\epsilon = 0, 1/2$, que definen las representaciones unitarias irreducibles C_q^0 y $C_q^{1/2}$, denominadas por Bargmann como las representaciones de la clase continua entera y medio entera [37]. En la base definida por (3.157), los elementos matriciales de los operadores K_{\pm} son

$$\langle k', n' | K_{\pm} |k, n\rangle = \sqrt{(n \pm k)(n \mp k \pm 1)} \delta_{k',k} \delta_{n',n \pm 1}, \quad (3.158)$$

donde n puede ser entero o medio entero, según el valor de ϵ y $k = \frac{1}{2} + i\rho$, con $\rho \in \mathbb{R}/\{0\}$. Esta representación, la de la clase continua, de dimensión infinita, puede ser pensada como una generalización de la representación finita del álgebra de momento angular y de espín, descritos por SU(2) [38]. De esta forma, hemos presentado los únicos operadores de Casimir que existen tanto para SU(2) como para SU(1,1) tal y como lo garantiza el rango igual a 1 de estos grupos semisimples.

3.4.2. Álgebra de Heisenberg como caso degenerado

Otra álgebra de Lie muy importante en física la conforman los operadores de posición, x , de momento en la dirección x , que denotaremos simplemente como p , y el operador identidad, $\mathbb{1}$, ellos satisfacen las relaciones de conmutación bien conocidas

$$[x, p] = i\hbar\mathbb{1}, \quad [x, \mathbb{1}] = 0, \quad [p, \mathbb{1}] = 0, \quad (3.159)$$

el álgebra (3.159) es conocida como álgebra de Heisenberg, a su vez dicha álgebra posee una subálgebra abeliana generada por $\mathbb{1}$ y x con las relaciones de conmutación triviales dadas por

$$[x, \mathbb{1}] = [x, x] = [\mathbb{1}, \mathbb{1}] = 0. \quad (3.160)$$

Por lo tanto, el álgebra de Heisenberg no es simple pues contiene un ideal, una subálgebra invariante que consiste de $\mathbb{1}$ y x , ni semisimple, pues además de ser un ideal, la subálgebra $\{\mathbb{1}, x\}$ es abeliana, también $\{\mathbb{1}, p\}$ lo es, así que el álgebra de Heisenberg se clasifica como un caso degenerado, de acuerdo a [35].

Como antes, consideremos las combinaciones lineales

$$a = \frac{2^{-1/2}}{x_0} \left(x + i \frac{p}{m\omega} \right), \quad a^\dagger = \frac{2^{-1/2}}{x_0} \left(x - i \frac{p}{m\omega} \right), \quad (3.161)$$

donde $x_0 = \sqrt{mw/\hbar}$. Junto con $\mathbb{1}$, los operadores definidos en (3.161) conforman el álgebra del oscilador armónico

$$[a, a^\dagger] = \mathbb{1}, \quad [a, \mathbb{1}] = 0, \quad [a^\dagger, \mathbb{1}] = 0. \quad (3.162)$$

a^\dagger y a son conocidos como los operadores de creación y aniquilación, respectivamente. Sobre estados de oscilador armónico, los operadores de creación y aniquilación actúan de la forma

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad (3.163)$$

y se puede demostrar que $n \in \mathbb{N}_0$. Un operador de peso también existe en este contexto y se define como $N = a^\dagger a$. Es claro que se cumple

$$N |n\rangle = n |n\rangle, \quad (3.164)$$

con las nuevas relaciones de conmutación

$$[a^\dagger, a] = \mathbb{1}, \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger, \quad [N, a] = -a \quad (3.165)$$

que se parecen más a (3.141) y (3.153).

3.4.3. Aplicación a las cadenas de amarre fuerte

Habiendo revisado la teoría de grupos semisimples de rango uno, surge la pregunta de cómo nos puede ayudar a resolver el problema de la propagación de pulsos en un cristal. Para responder a tal pregunta veamos qué podemos decir de los conmutadores para casos específicos definidos por nuestros parámetros. Es importante recordar que los operadores N , A y A^\dagger satisfacen las relaciones de conmutación más generales

$$[A, A^\dagger] = \alpha N + \delta, \quad [N, A] = A, \quad [N, A^\dagger] = -A^\dagger, \quad (3.166)$$

de donde es posible observar que los valores de α y δ definen al álgebra al que corresponden. Esta observación nos lleva a terrenos que pueden ser explorados con nuestros conocimientos algebraicos, es decir, los parámetros α y δ definen completamente al álgebra de Cartan para los operadores N , A y A^\dagger así como definen la intensidad del acoplamiento en la cadena, Ec. (3.115), y por tanto las propiedades de propagación de pulsos en ésta. Esta asociación entre física y matemática nos permite controlar la dinámica en la cadena que puede ser construida con ayuda de técnicas de ingeniería como se detalló en el capítulo 2.

Observemos qué pasa para diversos valores representativos de α y δ . Primero tratemos el caso $\delta = 0$; ante esto recordemos que los valores representativos de α son elementos del conjunto $\{-1, 0, 1\}$. Empezando con el valor positivo de $\alpha = 1$, tenemos que las relaciones de conmutación (3.166) toman la forma

$$[A, A^\dagger] = N, \quad (3.167)$$

Estas relaciones de conmutación pueden ser identificadas con (3.141) de tal forma que concluimos que para $\alpha = 1$, los operadores N , A , y A^\dagger son generadores de $SU(2)$. Como se puede imaginar ahora, el valor $\alpha = -1$, permite identificar, en base a las relaciones de conmutación

$$[A, A^\dagger] = -N, \quad (3.168)$$

a A , A^\dagger y a N como generadores de SU(1,1) como se puede notar de (3.153). Finalmente, para el caso $\alpha = 0$, tenemos

$$[A, A^\dagger] = 0, \quad (3.169)$$

que además implica que el acoplamiento es constante, por lo que la definición de $A = \Delta(N)T = \Delta T$, nos lleva a las relaciones equivalentes

$$[T, T^\dagger] = 0, \quad [N, T] = T \quad [N, T^\dagger] = -T^\dagger, \quad (3.170)$$

las cuales, como bien recordamos, son justamente las relaciones de conmutación (3.23), discutidas desde nuestro punto de partida. Considerando las combinaciones lineales

$$Q = \frac{1}{2}(T^\dagger + T), \quad Q^* = \frac{1}{2}(T^\dagger - T) \quad (3.171)$$

obtenemos como resultado las relaciones de conmutación

$$[Q, Q^*] = 0, \quad [N, Q] = -Q^* \quad [N, Q^*] = -Q, \quad (3.172)$$

del álgebra conocida como iso(1,1). Como hemos mencionado, este último problema ya ha sido estudiado [36].

De hecho, para el caso de la ec. de Heisenberg lineal para los operadores N , A y A^\dagger con coeficientes dependientes del tiempo y $\delta = 0$, al tener el sistema de ec.

$$\begin{pmatrix} N(t) \\ A(t) \\ A^\dagger(t) \end{pmatrix} = \mathbf{E}(t) \begin{pmatrix} N(0) \\ A(0) \\ A^\dagger(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{11}N + E_{12}A + E_{13}A^\dagger \\ E_{21}N + E_{22}A + E_{23}A^\dagger \\ E_{21}^*N + E_{23}^*A + E_{22}^*A^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.173)$$

obligamos que se cumpla $\forall t$

$$\begin{aligned} [A(t), A^\dagger(t)] &= \alpha N(t), \\ [N(t), A(t)] &= A(t), \\ [N(t), A^\dagger(t)] &= -A^\dagger(t) \end{aligned} \quad (3.174)$$

con lo cual obtenemos el conjunto de condiciones sobre las entradas de la matriz $\mathbf{E}(t)$

$$\begin{aligned} E_{11} &= |E_{22}|^2 + |E_{23}|^2, \\ E_{12} &= E_{21}E_{23}^* - E_{21}E_{22}^*, \\ E_{13} &= E_{21}E_{23}^* - E_{23}E_{21}^*, \\ E_{21} &= \alpha(E_{12}E_{23}^* - E_{22}E_{13}^*), \\ E_{22} &= E_{11}E_{22} - E_{21}E_{12}, \\ E_{23} &= E_{21}E_{13}^* - E_{11}E_{23}^*, \\ E_{31} &= E_{21}^*, \quad E_{32} = E_{23}^*, \quad E_{33} = E_{22}^*, \end{aligned} \quad (3.175)$$

con $\alpha \neq 0$, correspondiente a los grupos semisimples SU(2) y SU(1,1), para que el álgebra se preserve $\forall t$.

3.4. Teoría de grupos semisimples SU(2) y SU(1,1)

Cuando $\delta \neq 0$, la expresión que tiene sentido es aquella en la que $\alpha = 0$ y $\delta = -1$, i. e.

$$[A, A^\dagger] = -1, \quad (3.176)$$

esto es justamente (3.165), el álgebra del oscilador armónico. Los signos de los conmutadores difieren un poco debido a la definición $A = \Delta(N)T$, quedará más claro cuando calculemos el propagador de la cadena de Heisenberg.

3.4.4. Solución a las recurrencias con la función D de Wigner

Hasta ahora solamente hemos revisado algo de teoría sobre grupos semisimples, no obstante, el momento inminente de resolver nuestras recurrencias ha llegado. En esta sección describimos la motivación así como los pasos a seguir para probar que la solución a nuestras Ecs. MM discretas es la conocida función D de Wigner.

En nuestra teoría de propagadores cristalinos, la cadena finita queda descrita por el álgebra $\mathfrak{su}(2)$. Una forma de apreciar esto es recordando que podemos identificar

$$A \rightarrow J_+, \quad A^\dagger \rightarrow J_-, \quad (3.177)$$

esto no es otra cosa que restringir el tamaño de la cadena a uno finito pues, como bien sabemos, j define el tamaño de las representaciones de $\mathfrak{su}(2)$, de tal forma que m vaya de $-j$ a j , es decir m , que ahora es posición en la cadena, sólo puede tomar $2j + 1$ valores distintos, o en otras palabras, la cadena tiene un tamaño de $2j + 1$. Con esta identificación, la relación de conmutación entre A y A^\dagger implica

$$N = \frac{2\hbar}{\alpha} J_z - \frac{\delta}{\alpha}, \quad (3.178)$$

donde δ/α es una constante irrelevante en H . La expresión para N se obtuvo al notar que

$$\begin{aligned} \alpha N + \delta &= [A, A^\dagger] = [J_+, J_-] = [J_x + iJ_y, J_x + iJ_y] \\ &= -i[J_x, J_y] + i[J_y, J_x] = -i(i\hbar J_z) + i(-i\hbar J_z) = 2\hbar J_z \end{aligned} \quad (3.179)$$

y despejar a N en términos de J_z . Es así que el Hamiltoniano de amarre fuerte (3.56) ahora es

$$H = J_x + iJ_y + J_x - iJ_y + c\left(\frac{2\hbar}{\alpha} J_z - \frac{\delta}{\alpha}\right) = 2J_x + \frac{2\hbar c}{\alpha} J_z - \frac{c\delta}{\alpha}, \quad (3.180)$$

que puede ser reescrito como

$$H = \mathbf{n} \cdot \mathbf{J} + \text{cte}, \quad (3.181)$$

con ayuda del vector $\mathbf{n} := (2, 0, \frac{2\hbar c}{\alpha})$, donde el vector unitario $\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{n}/|\mathbf{n}|$ es

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{(2, 0, \frac{2\hbar c}{\alpha})}{\sqrt{4 + 4c^2\hbar^2/\alpha^2}}. \quad (3.182)$$

Si \mathbf{n} es independiente de t , entonces el operador de evolución temporal está dado por la exponencial del Hamiltoniano (3.181), esto es

$$U = \exp\left(-\frac{i\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}t}{\hbar}\right) \cdot e^{i\delta(t)}, \quad (3.183)$$

por lo que concluimos que U es un rotación, ésta es nuestra motivación para resolver nuestras Ecs. MM discretas como sigue.

A continuación probaremos que, en efecto, la solución a nuestras ecuaciones de Mello-Moshinsky discretas (3.136), (3.137) y (3.138) es una rotación. Procedamos a calcular las recurrencias para D , el operador de rotación en mecánica cuántica. En ángulos Eulerianos, la función D de Wigner es

$$D_{mm'}^j(\phi, \theta, \psi) = e^{-im\phi - im'\psi} d_{mm'}^j(\theta), \quad (3.184)$$

donde la única parte no trivial es la llamada función de Wigner reducida

$$d_{mm'}^j(\theta) = \langle jm | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_y \theta\right) | jm' \rangle. \quad (3.185)$$

La elección de la convención de rotación $z - y - z$ se hace pues con ésta la realidad del exponencial complejo está garantizada. Trabajemos entonces con recurrencias para d pequeña, primero calculemos

$$\begin{aligned} \langle jm | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_y \theta\right) J_z | jm' \rangle &= \hbar m' d_{mm'}^j(\theta) \\ &= \langle jm | D_y(\theta) J_z D_y^\dagger(\theta) D_y(\theta) | jm' \rangle \\ &= \langle jm | (\cos \theta J_z + \sin \theta J_x) D_y(\theta) | jm' \rangle \\ &= (*), \end{aligned} \quad (3.186)$$

donde hemos hecho uso de (3.147) y donde $D_y(\theta) J_z D_y^\dagger(\theta)$ es justamente J_z rotado. Como truco ingenioso se ha introducido $D_y^\dagger(\theta) D_y(\theta) = 1$. Nos detenemos un momento poniendo un asterisco que indica pausa para mostrar por qué la última línea es cierta, las rotaciones infinitesimales dan

$$\begin{aligned} \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} J_y \theta\right) J_z \left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} J_y \theta\right) &\approx J_z - \frac{i\theta}{\hbar} [J_y, J_z] = J_z - \frac{i\theta}{\hbar} i\hbar \epsilon_{231} J_x \\ &= J_z + \theta J_x, \end{aligned} \quad (3.187)$$

donde identificamos las aproximaciones para ángulos pequeños de las funciones trigonométricas $\sin \theta$ y $\cos \theta$ a primer orden en θ , lo cual muestra que al final, para una rotación finita, J_z rotado alrededor del eje y toma la forma

$$D_y(\theta) J_z D_y^\dagger(\theta) = \cos \theta J_z + \sin \theta J_x. \quad (3.188)$$

Podemos continuar

$$\begin{aligned}
 (*) &= \langle jm | (\cos \theta J_z + \sin \theta J_x) D_y(\theta) | jm' \rangle \\
 &= \langle jm | \left(\cos \theta J_z + \sin \theta \left(\frac{J_+ + J_-}{2} \right) \right) D_y(\theta) | jm' \rangle \\
 &= \hbar \frac{\sqrt{(j+m)(j-m+1)}}{2} \sin \theta \langle j, m-1 | D_y(\theta) | jm' \rangle \\
 &\quad + \hbar \frac{\sqrt{(j-m)(j+m+1)}}{2} \sin \theta \langle j, m+1 | D_y(\theta) | jm' \rangle \\
 &\quad + \hbar m \langle jm | D_y(\theta) | jm' \rangle \cos \theta,
 \end{aligned} \tag{3.189}$$

donde se ha puesto a J_x en términos de los operadores de escalera de SU(2) y después se ha usado (3.148). Vemos de (3.186) y (3.189) que lo anterior es cierto si y sólo si

$$\begin{aligned}
 m' d_{mm'}^j(\theta) &= \frac{\sqrt{(j+m)(j-m+1)}}{2} \sin \theta d_{m-1,m'}^j(\theta) \\
 &\quad + \frac{\sqrt{(j-m)(j+m+1)}}{2} \sin \theta d_{m+1,m'}^j(\theta) \\
 &\quad + m \cos \theta d_{mm'}^j(\theta),
 \end{aligned} \tag{3.190}$$

donde hemos hecho $\hbar = 1$. Esta es nuestra primera relación de recurrencia, que también se puede escribir como

$$\begin{aligned}
 2d_{mm'}^j(\theta) \frac{m' - m \cos \theta}{\sin \theta} &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)} d_{m-1,m'}^j(\theta) \\
 &\quad + \sqrt{(j-m)(j+m+1)} d_{m+1,m'}^j(\theta).
 \end{aligned} \tag{3.191}$$

Ahora, utilizando J_+ y J_- , en lugar de J_z , tenemos

$$\begin{aligned}
 \langle jm | D_y(\theta) J_{\pm} | jm' \rangle &= \hbar \langle jm | D_y(\theta) \sqrt{(j \mp m')(j \pm m' + 1)} | j, m' \pm 1 \rangle \\
 &= \hbar \sqrt{(j \mp m')(j \pm m' + 1)} d_{m, m' \pm 1}^j(\theta) \\
 &= \langle jm | D_y(\theta) J_{\pm} D_y^{-1}(\theta) D_y(\theta) | jm' \rangle = (**).
 \end{aligned} \tag{3.192}$$

Calculemos el resultado de rotar a los operadores de escalera

$$\begin{aligned}
 D_y(\theta) J_{\pm} D_y^{-1}(\theta) &= D_y(\theta) J_x D_y^{-1}(\theta) \pm D_y(\theta) i J_y D_y^{-1}(\theta) \\
 &= \cos \theta J_x - \sin \theta J_z \pm i J_y \\
 &= \cos \theta \frac{J_+ + J_-}{2} - \sin \theta J_z \pm i \frac{J_+ - J_-}{2i} \\
 &= \frac{\cos \theta \pm 1}{2} J_+ + \frac{\cos \theta \mp 1}{2} J_- - \sin \theta J_z,
 \end{aligned} \tag{3.193}$$

aquí hemos usado (3.140) para poner a J_{\pm} en términos de J_x y J_y . Note que la expresión para J_x rotado se ha calculado como antes se ha hecho para J_z , vea

(3.187), también note que J_y no rota, algo obvio, por lo tanto

$$\begin{aligned}
 (**) &= \langle jm | \left(\frac{\cos \theta \pm 1}{2} J_+ + \frac{\cos \theta \mp 1}{2} J_- - \sin \theta J_z \right) D_y(\theta) |jm' \rangle \\
 &= \frac{\cos \theta \pm 1}{2} \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \langle j, m-1 | D_y(\theta) |jm' \rangle \\
 &+ \frac{\cos \theta \mp 1}{2} \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \langle j, m+1 | D_y(\theta) |jm' \rangle \\
 &- \sin \theta \hbar m \langle jm | D_y(\theta) |jm' \rangle,
 \end{aligned} \tag{3.194}$$

o bien, resumiendo (3.192) y (3.194)

$$\begin{aligned}
 &\sqrt{(j \mp m')(j \pm m' + 1)} d_{m, m' \pm 1}^j(\theta) \\
 &= \frac{\cos \theta \pm 1}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} d_{m-1, m'}^j(\theta) \\
 &+ \frac{\cos \theta \mp 1}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} d_{m+1, m'}^j(\theta) \\
 &- m \sin \theta d_{mm'}^j(\theta),
 \end{aligned} \tag{3.195}$$

en unidades en las que $\hbar = 1$, completando así nuestra segunda recurrencia para d .

En general, si queremos las relaciones de recurrencia para $D_{mm'}^j(\phi, \theta, \psi)$, simplemente multiplicamos las ecuaciones (3.191) y (3.195) por $e^{-im\phi - im'\psi}$ y así obtenemos las relaciones de recurrencia en su presentación final, a saber

$$\boxed{2D_{mm'}^j \frac{m' - m \cos \theta}{\sin \theta} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} e^{-i\phi} D_{m-1, m'}^j + \sqrt{(j-m)(j+m+1)} e^{i\phi} D_{m+1, m'}^j,} \tag{3.196}$$

donde la dependencia explícita de los ángulos de Euler ha sido omitida para optimizar el espacio. Haciendo $-m' \rightarrow -(m' \pm 1 \mp 1)$, (3.195) queda de la siguiente forma

$$\boxed{\begin{aligned}
 &\sqrt{(j \mp m')(j \pm m' + 1)} e^{\pm i\psi} D_{m, m' \pm 1}^j(\phi, \theta, \psi) \\
 &= \frac{\cos \theta \pm 1}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} e^{-i\phi} D_{m-1, m'}^j(\phi, \theta, \psi) \\
 &+ \frac{\cos \theta \mp 1}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} e^{i\phi} D_{m+1, m'}^j(\phi, \theta, \psi) \\
 &- m \sin \theta D_{mm'}^j(\phi, \theta, \psi),
 \end{aligned}} \tag{3.197}$$

vemos que estas relaciones de recurrencia son bastante similares a (3.136) y (3.137), como se esperaba. Procedamos a identificar las cantidades equivalentes.

Para el caso de la Ec. de Heisenberg lineal con coeficientes independientes del tiempo para los operadores N , A y A^\dagger , podemos comparar las ecuaciones (3.136), (3.137) con las relaciones de recurrencia de las matrices D de Wigner (3.196), (3.197) notando que la siguiente identificación es posible

$$\Delta(m) = \sqrt{\frac{\alpha}{2} (m - m^2) + c_0} \rightarrow \bar{\Delta}(m) := \sqrt{(j+m)(j-m+1)}, \tag{3.198}$$

3.4. Teoría de grupos semisimples SU(2) y SU(1,1)

para hacer esto, es necesario factorizar el acoplamiento obtenido en nuestro modelo de tal forma que

$$\Delta(m) = \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \bar{\Delta}(m), \quad (3.199)$$

donde sólo hemos extraído el factor $\sqrt{\alpha/2}$; por supuesto, esto implica

$$\frac{2c_0}{\alpha} = j(j+1). \quad (3.200)$$

Sustituyendo (3.199) en la primera de las ecuaciones de Mello-Moshinsky discretas, (3.136), tenemos

$$U_{m'm} \left[\frac{m'\omega^2 - m(\omega^2 - 2\Xi)}{\sqrt{\frac{\alpha}{2}} |\Gamma|} \right] = \bar{\Delta}(m) e^{i \arg \Gamma} U_{m',m-1} + \bar{\Delta}(m+1) e^{-i \arg \Gamma} U_{m',m+1}, \quad (3.201)$$

mientras que al hacer lo mismo en la segunda relación de recurrencia, (3.137), produce

$$\omega^2 \bar{\Delta}(m') U_{m'-1,m} = m \sqrt{2\alpha} \Gamma^* U_{m'm} + \bar{\Delta}(m+1) \Lambda^* U_{m',m+1} + \bar{\Delta}(m) \Xi U_{m',m-1}. \quad (3.202)$$

El resultado es que los ángulos de Euler ahora son funciones de nuestros parámetros α , β y t ; las siguientes ecuaciones los definen

$$\boxed{\sin \theta = \frac{\sqrt{2\alpha} |\Gamma|}{\omega^2}}, \quad (3.203)$$

$$\boxed{\cos \theta = \frac{\omega^2 - 2\Xi}{\omega^2}}, \quad (3.204)$$

$$\boxed{\phi = -\arg \Gamma, \quad \phi - \psi = (2n+1)\pi, \quad n \in \mathbb{N}_0.} \quad (3.205)$$

Finalmente, la solución de las Ecuaciones Mello-Moshinsky discretas (3.136), (3.137) y (3.138), es

$$\boxed{U_{m'm} = D_{mm'}^j(\phi, \theta, \psi)}, \quad (3.206)$$

i. e., la representación en el espacio discreto del operador de evolución temporal es la función D de Wigner. Abundaremos en la discusión de este resultado en el siguiente capítulo y veremos que aunque la motivación original fue la cadena finita SU(2), D también describe a la cadena SU(1,1) por continuación analítica. De hecho, en los límites apropiados puede describir la cadena homogénea ISO(1,1) o la cadena de Heisenberg. La generalidad de la solución es extraordinaria.

Capítulo 4

Análisis de propagación de pulsos

En el presente capítulo se analizan las propiedades de propagación de pulsos en cadenas no homogéneas de distintos tamaños retomando lo que hemos construido hasta el momento. Veremos que la cadena finita se describe con el álgebra $su(2)$, que la cadena infinita se describe con el álgebra $su(1,1)$ y que el álgebra de Heisenberg da cuenta del comportamiento de una cadena semi-infinita. Detallaremos cada una de las propiedades que se obtienen de los propagadores cristalinos para cada cristal, tanto para la cadena libre como para la cadena con un campo externo, i. e. para cuando sobre un electrón, por ejemplo, actúa una fuerza constante. Esto nos llevará al sorprendente fenómeno de oscilaciones de Bloch en cadenas inhomogéneas.

4.1. Cadena finita $SU(2)$

Nuestro punto de partida es la cadena descrita por $\alpha > 0$ correspondiente al álgebra de $SU(2)$. Varios puntos son claros pero vale la pena mencionarlos por la relevancia de su significado físico. Sabemos que los multipletes de $SU(2)$ quedan definidos por el valor del “espín” j que puede ser entero o medio entero, de esto se sigue que la cadena, puede ser de tamaño par o impar. Esto da como resultado $2j + 1$ valores distintos para n , el cual, de acuerdo a (3.178) no es otra cosa que el valor propio de N . Así que n puede ir de $-j$ a j . En otras palabras, la cadena es finita. En lo que sigue, estudiaremos qué sucede cuando en la cadena tenemos un pulso localizado a tiempo cero en diversas posiciones iniciales representativas.

Otro punto importante, para lograr una mejor comprensión en nuestra investigación, consiste en señalar cuál es el papel de β en nuestro modelo. Hemos visto que el valor de β cuantifica la intensidad del campo externo, vea (3.112), por lo que resulta intrigante conocer los efectos de su presencia sobre la dinámica del sistema. Analizaremos cada uno de estos puntos en lo que sigue.

4.1.1. Partícula libre $SU(2)$

Empezaremos estudiando la evolución de un paquete de ondas localizado en algún sitio dentro de una cadena $SU(2)$ cuyas características son simplemente su finitud y la función de acoplamiento o amplitud de salto, la cual hemos graficado en color

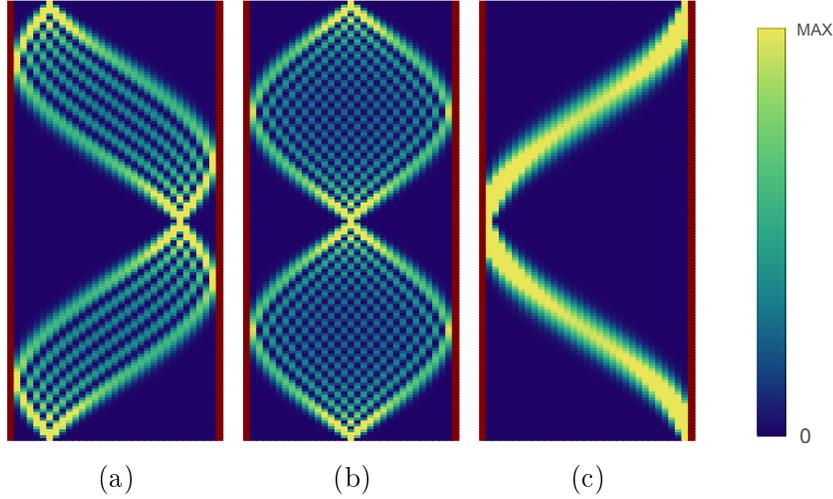


Figura 4.1: Dinámica de pulsos en un cristal SU(2) libre. Propagación de pulsos en un cristal finito sin campo externo desde diversas posiciones iniciales: (a) desde el lado negativo, con $n_i = -10$, (b) desde el centro de la cadena, (c) desde el extremo positivo de la cadena. Específicamente, el tamaño de la cadena es 31, o sea de “espín” $j = 15$. En todas las figuras que involucran al cristal finito SU(2) el tiempo va de 0 a $2\pi/\sqrt{2}$.

rojo en la Fig. 3.2. Esta función de acoplamiento explicará la mayor parte de las características de propagación que observaremos así que es una buena idea repasar sus características. El acoplamiento, de forma general, es una parábola que abre hacia abajo, como ya lo hemos dicho, la forma de esta función de acoplamiento delimita el espectro de N , por lo que efectivamente describe a la cadena finita, además, es una función par. Haremos más comentarios sobre cómo esta forma particular de la amplitud de salto explica el comportamiento de propagación observado.

El formalismo general de los propagadores cristalinos nos dice que, dado un estado inicial, digamos $\psi_n(0)$, podemos escribir el estado a tiempo t como

$$\psi_m(t) = \sum_n U_{mn}(t) \psi_n(0). \quad (4.1)$$

Un estado inicial de especial interés es aquel que consta de un pulso en, digamos, el sitio n' , esto es, una condición inicial de la forma $\psi_n(0) = \delta_{nn'}$. La sustitución de tal condición en (4.1) produce

$$\psi_m(t) = U_{mn'}(t), \quad (4.2)$$

esto es, la amplitud de probabilidad de encontrar a la partícula en el sitio m dado que inicialmente se encontraba en el sitio n' es el propagador cristalino, para $t \geq 0$. De esta forma, la distribución de probabilidad se obtiene elevando al cuadrado al propagador.

De la solución a las Ecs. MM discretas sabemos que el propagador es

$$K_{nm'}(t) = \Theta(t) D_{n'n}^j. \quad (4.3)$$

Una característica de nuestro propagador de SU(2) que se puede anticipar se deduce de una de las relaciones de simetría de la función D de Wigner, para entender esto, basta con notar que, al final, las distribuciones de probabilidad sólo dependen de la matriz de Wigner reducida, la d , i. e. $|D_{mm'}^j|^2 = |d_{mm'}^j|^2$, así que la identidad

$$\boxed{d_{mm'}^j(\theta) = (-1)^{m-m'} d_{-m, -m'}^j(\theta)}, \quad (4.4)$$

p. 79 de [39], muestra que $|d_{mm'}^j|^2 = |d_{-m, -m'}^j|^2$, i. e. las distribuciones de probabilidad que involucran a estos índices, con m de $-j$ a j , han de ser la imagen especular una de la otra. En la Fig. 4.1 hemos graficado las distribuciones de probabilidad para ciertas posiciones iniciales representativas. Hemos elegido un tamaño de cadena impar para presentar distribuciones simétricas, aunque una elección distinta (tamaño par) es posible. A continuación hacemos algunos comentarios.

La explicación de lo que se observa en los paneles recae principalmente en los siguientes elementos: el principio de superposición, la función de acoplamiento entre los sitios de cadena y la finitud del cristal. Una observación interesante es que en cada uno de los paneles 4.1a, 4.1b y 4.1c se da algo que se conoce como el renacimiento o reconstrucción del paquete de ondas. Abundaremos en la discusión de este resultado más adelante. Procederemos a discutir, de forma ordenada, los principales elementos que dan cuenta del comportamiento del paquete localizado en la cadena SU(2), de tamaño finito y con acoplamientos dependientes de la posición como una parábola que abre hacia abajo.

Como lo hemos mencionado, la superposición de ondas, en general, electromagnéticas, o de probabilidad en mecánica cuántica, etc., juega un papel muy importante en la dinámica del sistema. De hecho, es bien sabido que la superposición explica la interferencia, esto es, contesta la pregunta de por qué en ciertos sitios las ondas se refuerzan y en otros, al contrario, se anulan. Pero en este caso, ¿superposición de qué exactamente? bien, sabemos que un paquete de ondas altamente localizado en el espacio de posición está compuesto de un número infinito de componentes monocromáticas, cada una de las cuales es dispersada según lo dicta la relación de dispersión del cristal correspondiente. Por lo tanto, esperamos que cuando estudiemos la propagación de ondas monocromáticas, tema que será discutido más tarde, ganemos un entendimiento más profundo del comportamiento observado.

Por otro lado, la viabilidad de un enfoque de suma sobre caminos en el espacio discreto ha sido analizada de forma rigurosa en [2] para la cadena homogénea, no obstante, una formulación análoga en este contexto luce complicada puesto que las composiciones infinitesimales, fundamentales para un planteamiento de esta naturaleza, no son “bien comportadas”.

Aquí entra otro elemento importante. Puesto que el cristal es finito, cuando el pulso alcanza a propagarse hasta los extremos del cristal, el frente de ondas rebota de las paredes para dirigirse al sitio simétrico especular que corresponde a la posición en la que inicialmente se encontraba, ahí el estado inicial se reconstruye, las condiciones para el renacimiento en una posición distinta a la inicial, o transporte, como es llamado el fenómeno, las expondremos más adelante. También notamos que

medio ciclo después el sistema vuelve a su estado original, con el pulso reconstruido en el sitio de partida.

Finalmente, un aspecto relevante que debe ser señalado, y que nos permite discutir otro elemento imprescindible, es la velocidad de propagación en la cadena, la cual está directamente relacionada con la amplitud de salto [40], como se puede intuir. Empezando por el centro, distribución simétrica 4.1b, es claro que la velocidad de propagación disminuye con el paso del tiempo, i. e. tenemos una desaceleración. Recorremos una distancia cada vez menor en el mismo intervalo de tiempo. Esto le da el aspecto de una V ligeramente curvada, hasta antes del rebote. Esta propiedad se entiende si uno toma en cuenta que la amplitud de salto es máxima en el centro y mínima en las orillas, por lo que la propagación en el centro es más rápida mientras que en las orillas es más lenta. Después del rebote estas características se invierten y ahora el frente de ondas acelera hasta reconstruir el estado inicial.

Este principio se sigue respetando incluso en puntos distintos al centro. Tal es el caso de las Fig. 4.1a y 4.1c. En 4.1a, por ejemplo, el pulso comienza en un sitio en el que estamos más cerca del mínimo que del máximo de la función de acoplamiento, esto se refleja en su propagación. Del lado izquierdo, el pulso se propaga cada vez más despacio. Es necesario señalar que, en nuestros diagramas, el eje horizontal representa la posición discreta, mientras que el vertical denota al tiempo, continuo. Siguiendo con 4.1a, del lado derecho la propagación del pulso se da a una velocidad cada vez mayor: ¡el frente de ondas acelera!. En el sitio inicial, que para 4.1a es $n_i = -10$, donde el 0 está en el centro de la cadena (al ser ésta de tamaño impar), el valor de la amplitud de salto es intermedio. De ahí hacia la derecha, crece, hasta el centro, del centro hacia el borde derecho el acoplamiento nuevamente es decreciente. La coincidencia de esta función con las propiedades de propagación es la anticipada. En efecto, en 4.1a, vemos que la velocidad de propagación aumenta desde $n_i = -10$ hasta $n = 0$, una vez ahí, en el origen, el frente de ondas se propaga sufriendo desaceleración.

El último panel, donde el sitio inicial es un extremo del cristal, Fig. 4.1c, se explica en los mismos términos. Vale la pena resaltar que aquí se observa, al igual que en 4.1a, la aceleración y el frenado del frente de ondas delatando nuevamente la forma de los acoplamientos. Queremos enfatizar que la inequivalencia de la evolución para condiciones iniciales puntuales partiendo de sitios distintos se puede entender por la inhomogeneidad provocada por la dependencia espacial que tiene la función de acoplamiento. No es lo mismo comenzar en el centro que en sitios distintos.

Uno debe ser cauto en atribuir el comportamiento observado a la naturaleza “puramente cuántica” del pulso pues esto no es cierto. De hecho, los resultados que aquí presentamos valen para toda clase de sistemas equivalentes, “ondas clásicas” moviéndose en arreglos similares, que igualmente pueden superponerse e interferir. Una descripción puramente cuántica nos permitiría explotar propiedades sin análogo clásico como el entrelazamiento. Esta descripción general es posible por la equivalencia de las ecuaciones de onda en la aproximación de amarre fuerte de varios sistemas, como la que presentamos para el cristal fotónico del Cap. 2. Por lo tanto, lo fundamental en estos sistemas es más bien la naturaleza ondulatoria en el sentido amplio de la palabra.

Ahora, discutamos lo que hemos pospuesto a lo largo de esta exposición, a saber, por qué el pulso se reconstruye o renace después de cierto tiempo. Las condiciones de división perfecta (balanceada) y reconstrucción de un paquete de ondas en una cadena finita han sido estudiadas en [41], por ejemplo. Como señalan, para que se dé el renacimiento de un estado inicial, se deben de cumplir algunas cosas: primero, que el Hamiltoniano goce de simetría especular [42], i. e. que el acoplamiento entre sitios sea una función tal que $\Delta_{L-n} = \Delta_n$, en términos de nuestra notación, donde L es el tamaño de la cadena, en este caso, $L = 2j + 1$, con n de 1 a $2j + 1$, o equivalentemente, $\Delta_{j-n} = \Delta_{j+n+1}$ con n de $-j$ a j . Un Hamiltoniano de este tipo también impone restricciones sobre el campo externo, a saber $V_{j+1+n} = V_{j+1-n}$. Ciertamente este es el caso del Hamiltoniano de la cadena finita SU(2) sin campo, donde la función de acoplamiento está dada por (3.112) y donde la condición sobre V_n se cumple trivialmente pues $V_n = 0$ para todo n . A continuación se discuten las condiciones para el transporte de estados en términos más intuitivos.

Para explicar esto, recuerde que D es una rotación, por lo que cuando actúa sobre un estado inicial localizado, digamos $|n\rangle$, éste es rotado. Esta operación sobre el estado inicial da cuenta del transporte del pulso, del sitio inicial m al sitio final $-m$, cuando $\theta = (2n + 1)\pi$ y una reconstrucción en la posición inicial cuando $\theta = 2n\pi$, con $n \in \mathbb{N}_0$. Por lo tanto, en términos simples nuestra condición para que el pulso se reconstruya es que el estado inicial rote. Esto es bastante claro ya que el propagador es la D de Wigner. Las siguientes relaciones garantizan que el pulso se reconstruya:

$$\boxed{d_{mm'}^j((2n + 1)\pi) = (-1)^{(2n+1)j-m'} \delta_{m,-m'},} \quad (4.5)$$

$$\boxed{d_{mm'}^j(2\pi n) = (-1)^{2nj} \delta_{mm'},} \quad (4.6)$$

p. 80 de [39], válidas para posiciones iniciales y tamaños de cadena arbitrarios, m' y j . La primera da cuenta del transporte de la distribución inicial, en general, i. e. cuando el pulso inicialmente en m' se reconstruye en su sitio opuesto $-m'$ mientras que la segunda igualdad significa que después de un tiempo de $t = 2\pi n/\omega$ el pulso se reconstruye donde inicialmente se liberó, al notar que $\theta = \omega t$, con $\hbar = 1$. Estos puntos son observados en los paneles de la Fig. 4.1; $\omega = \sqrt{2\alpha + \beta^2} = \sqrt{2 + 0} = \sqrt{2}$. Habiendo dicho lo anterior, ahora es claro que cualquier distribución inicial que se propague en el cristal finito SU(2) se reconstruirá periódicamente.

Nuestra expresión para el propagador de SU(2) en forma cerrada nos da la oportunidad de discutir sobre lo que sucede cuando varios pulsos se colocan en la red. Con este fin observe la Fig. 4.2. Compare 4.2b con la Fig. 3 de [41], donde se grafica el número de ocupación al cuadrado medio de dos bosones que no interactúan para la cadena de pseudoespín $j = 39/2$ y nuestro resultado. La principal diferencia, o mejor dicho, la única diferencia que se observa entre las distribuciones de probabilidad referidas es que en la nuestra la interferencia de los pulsos produce un desbalance en la distribución como se puede constatar en el centro de la cadena así como en las orillas, esto se inhibe en el trabajo antes citado mediante una modificación ligera a la ley de acoplamientos para los sitios cercanos al centro, condición a la que los autores llegan de forma numérica, sin embargo, la necesidad de tal enfoque se pone en duda

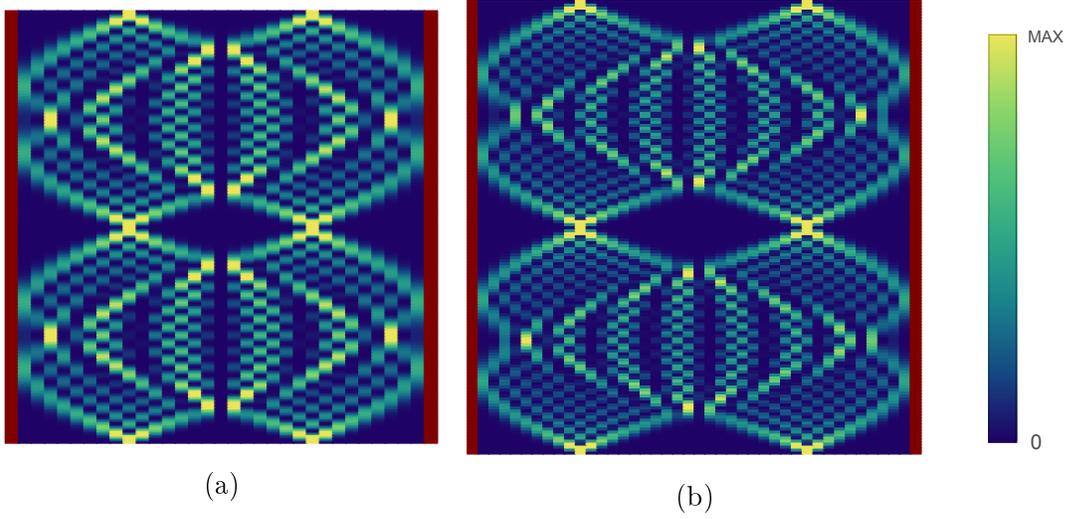


Figura 4.2: Dos partículas en un cristal SU(2). Propagación de dos pulsos en un cristal finito sin campo desde posiciones simétricas. (a) Propagación desde $|n| = 7$ con $j = 15$ y (b) desde $|n| = 21/2$ con $j = 39/2$. Los pulsos se reconstruyen a tiempo $t = \pi/\sqrt{2}$ en los sitios opuestos a aquellos en que se encontraban inicialmente, provocando el patrón de interferencia que se observa en la región en la que sus caminos se cruzan.

con la Fig. 4.2a, la cual muestra que incluso en el Hamiltoniano con simetría SU(2) es posible obtener distribuciones balanceadas en una cadena de tamaño impar.

Algo que hay que aclarar es que el transporte a tiempo $t = n\pi/\sqrt{2}$ permite que los paquetes de ondas se reconstruyan en posiciones distintas a la inicial, de hecho hemos visto que un único pulso que comienza en el sitio m se reconstruye a medio ciclo en el sitio $-m$, con m de $-j$ a j , como es bien sabido [42] y como lo hemos mostrado en este trabajo mediante las identidades (4.5) y (4.6), por lo que las distribuciones 4.2a, 4.2b deben ser interpretadas como tal, i. e. a medio ciclo, el pulso alimentado en el lado derecho se reconstruye en el lado izquierdo y viceversa; tenemos la distribución original medio ciclo después. De hecho, las distribuciones pueden ser más elaboradas y adquirir más detalles si consideramos más pulsos así como cadenas de mayor tamaño. Muestra de ello es el panel 4.3 donde presentamos algunas distribuciones de probabilidad para cuando más de dos pulsos se propagan en la cadena, los patrones de interferencia observados han llegado a ser llamados alfombras cuánticas o de luz [43] y se entenderán mejor a continuación al considerar la evolución de otro tipo de paquetes de ondas: los Gaussianos.

Otro tipo de distribución inicial de interés, que complementa nuestra discusión y que se puede evaluar de forma exacta, es la correspondiente a paquetes de ondas Gaussianos de la forma

$$\psi_n(0) = c \exp[ik_0(n - n_i) - \gamma(n - n_i)^2], \quad (4.7)$$

específicamente, nos interesan paquetes cuya distribución en el espacio de cuasimomento sea justamente como la de los pulsos en el espacio de posición, i. e. con cuasi-

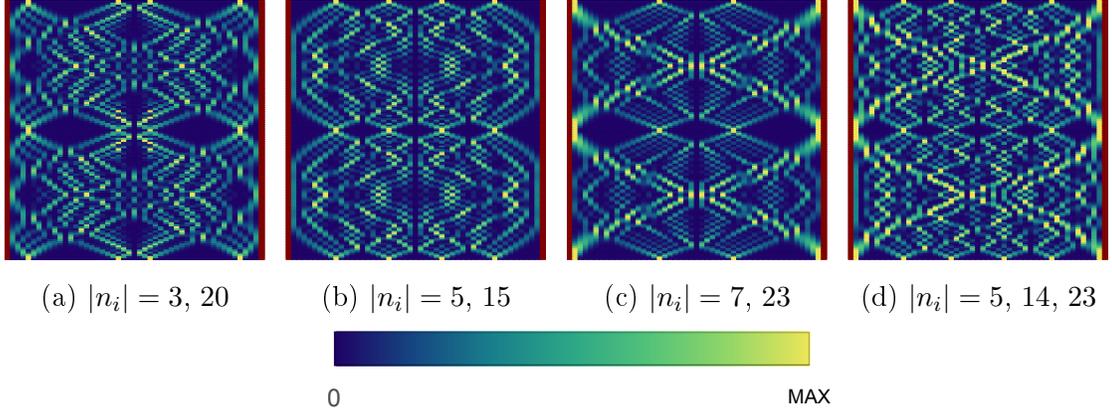


Figura 4.3: Tapices sobre espacio-tiempo SU(2). Patrones de interferencia resultantes cuando varios pulsos se dejan propagar desde distintas posiciones iniciales. En todas las figuras de este panel la cadena es de tamaño 46. Siempre se respeta la reconstrucción (el transporte) del pulso, inicialmente en m , en su opuesto $-m$, con m de $-j$ a j . Estos patrones de interferencia pueden ser producidos por luz evanescentemente acoplada en un cristal fotónico como el que se describió en el capítulo 2.

momento bien definido, k_0 , esto es, consideraremos paquetes Gaussianos para los que $\gamma \ll 1$. Hemos graficado la evolución de varios paquetes de este tipo en la Fig. 4.4. Los resultados son esclarecedores si entendemos lo que pasa en la cadena homogénea, por ejemplo. Con una relación de dispersión del tipo $E(k) = \Delta \cos(k)$ la velocidad de grupo es $v_g(k) = -\Delta \sin(k)$, ahora, en el caso libre el cuasimomento es constante, $\dot{k} = 0$, por lo que la “posición de grupo” es simplemente $x_g(t) = x_g(0) - \Delta \sin(k_0)t$ lo cual produce los conocidos conos de luz efectivos en espacio tiempo [2]. En efecto, la velocidad de grupo máxima se da para Gaussianas con cuasimomento $|k| = \pi/2$ y las “trayectorias” correspondientes delimitan las regiones de propagación. Es la superposición de este tipo de ondas, con k en el intervalo de $-\pi$ a π lo que compone a un paquete altamente localizado en el espacio de posición así que se entiende el patrón de interferencia resultante: un pulso en una cadena ISO(1,1) se propaga balísticamente pues sus constituyentes monocromáticas son dispersadas en distintas direcciones en el cristal con velocidad de a lo más $|v_g| = \Delta$ lo cual produce el patrón de interferencia pseudo-relativista. Aunque no es una exposición rigurosa, hemos decidido hacer estos comentarios porque iluminan la física del problema.

De forma similar para la cadena finita SU(2), donde la evolución de las componentes monocromáticas de un pulso se pueden evaluar de forma exacta mediante

$$\psi_m(t) = \sum_{n=-j}^j U_{mn} c \exp[ik_0(n - n_i) - \gamma(n - n_i)^2], \quad (4.8)$$

vemos que las ondas “de un sólo color” son dispersadas por el cristal de una forma un tanto más compleja que como lo hace el cristal homogéneo infinito. En la Fig. 4.4 hemos graficado la evolución de ondas con cuasimomento en lo que llamamos

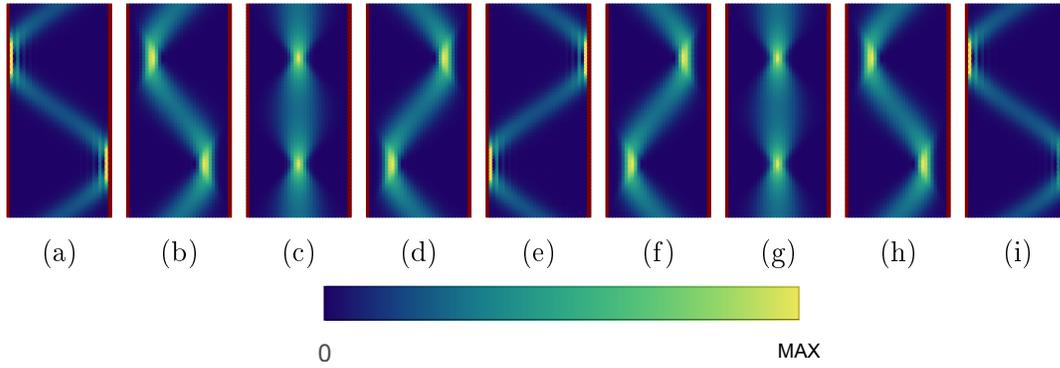


Figura 4.4: Dispersión de ondas Gaussianas monocromáticas en la cadena SU(2) libre. Propagación de ondas Gaussianas con cuasimomento dentro de la primera zona de Brillouin. Los valores de k van de $-\pi$ a π , para ser claros: (a) $-\pi$, (b) $-7\pi/10$, (c) $-\pi/2$, (d) $-\pi/5$, (e) 0; para las figuras (f)-(i) los valores de k son las contrapartes positivas de los valores negativos antes mencionados; γ vale 0,01.

la primera zona de Brillouin del cristal SU(2). Los resultados se parecen a lo que sucede en la cadena ISO(1,1) en el sentido de que la dispersión de cada componente monocromática nos da una idea de lo que sucede en el cristal cuando un pulso se propaga. Es bien sabido que una relación de dispersión no lineal como la de ISO(1,1), SU(2), etc., hacen que la velocidad de grupo y la velocidad de fase difieran. Ingenuamente, se podría decir que aquí parece válida una relación del tipo $\dot{x}_g = f(x_g, k)|_{k_0}$ en una aproximación semiclásica. La solución a esta ecuación diferencial no lineal en x , hipotética, describiría las trayectorias de los paquetes Gaussianos mientras que la integral de $f(x, k)$ a lo largo de la primera zona de Brillouin nos daría la relación de dispersión, o eso es lo que nos gustaría. Hay que enfatizar que se ha mostrado que dicho enfoque es inconsistente, destacando las observaciones vertidas sobre el tema inicialmente por Zak [44]. Esto muestra la importancia del formalismo de propagadores cristalinos dado que resuelve el debate en torno a la formulación rigurosa de la dinámica de paquetes de ondas en la aproximación a una banda. Lo que sí podemos decir es que un pulso, hecho de una superposición de componentes monocromáticas, las cuales son dispersadas de la forma en que se muestra en la Fig. 4.4, se propaga como lo hace puesto que corresponde a la evolución de la superposición de dichas ondas que al final producen la distribución 4.1b. También es claro que las Gaussianas con velocidad máxima corresponden a $|k| = \pi$ y a $k = 0$ mientras que las de velocidad mínima a $|k| = \pi/2$ dando una mejor idea de la relación de dispersión del cristal SU(2). Como en ISO(1,1) [25], en SU(2) las ondas de velocidad máxima parecen definir en buena medida la forma de las cáusticas.

Para concluir esta sección, queremos decir que aunque uno podría estar tentado en catalogar lo que se observa en 4.1b como una oscilación de Bloch, esto no tiene sentido en este contexto, nos reservaremos el nombre para el caso en el que un campo externo actúa sobre la cadena. De hecho, otro de los resultados importantes de este trabajo, es el hallazgo de oscilaciones de Bloch en cristales inhomogéneos, como

veremos a continuación.

4.1.2. Partícula en presencia de un campo externo SU(2)

A continuación, veremos qué sucede cuando, aparte de la inhomogeneidad de la cadena, tenemos un campo externo, el cual puede ser un campo eléctrico para el caso de un electrón, un campo gravitacional para el caso de un condensado de Bose-Einstein, o una variación adecuada del ancho de las cortinas dieléctricas de un cristal fotónico, como el que caracterizamos en el capítulo 2, etcétera. Mostraremos que, aún en el caso de una cadena inhomogénea, el fenómeno de oscilaciones de Bloch se presenta. Este descubrimiento tiene un gran significado: la generalización del fenómeno a una cadena inhomogénea. De esta forma, mostraremos que incluso en cristales inhomogéneos finitos (en este caso), un electrón oscilará, como se sabe que lo hace en la cadena infinita homogénea [25]. La Fig. 4.5 muestra lo que sucede cuando un campo externo se enciende y variamos su intensidad mediante β . En seguida hacemos algunos comentarios.

Lo que podemos observar de inmediato en los paneles es que se da un fenómeno de confinamiento de la propagación del pulso. El influyente trabajo de Bloch [3] da pistas para explicar lo que hemos encontrado. Como un punto de referencia importante recuerde que, en el mundo clásico, es bien sabido que una partícula (en el espacio continuo) bajo la acción de una fuerza constante acelera uniformemente. Inesperadamente, Bloch descubrió que este no era el caso para un electrón dentro de un cristal. Un fondo periódico fue suficiente para que la dinámica de una partícula desafiara nuestra intuición. En realidad, el electrón describe una trayectoria oscilatoria en la red, cuya amplitud va como $1/\beta$ y cuya frecuencia es directamente proporcional a β , con β la intensidad del campo. Esto se puede “obtener”, por ejemplo, para el caso de la cadena de amarre fuerte homogénea a través de su relación de dispersión (una función trigonométrica), integrando la velocidad para obtener la posición como función del tiempo, una derivación que satisface las expectativas físicas pero carece de justificación matemática.

Note que el arreglo del que se obtuvo la conclusión anterior consiste de un cristal homogéneo infinito mientras que lo que tenemos aquí es un escenario notoriamente distinto. En primer lugar, el cristal es finito, y además, no se trata de un cristal homogéneo sino que los acoplamientos dependen de la posición en la cadena, contrario al modelo de amarre fuerte estándar. Esto produce un comportamiento singular del pulso, como la reconstrucción del estado inicial que ya hemos señalado en la sección previa.

En la cadena SU(2) sometida al campo externo, un fenómeno interesante se presenta cuando el campo es débil, distribuciones 4.5a-4.5c de la Fig. 4.5. En ellas se puede ver que el efecto de un campo tenue sobre la cadena consiste en transformar las distribuciones no perturbadas. En 4.5a, por ejemplo, notamos que, aún cuando alcanzamos el tiempo de transporte libre, que definimos como $t = \pi/\omega$, ya no se da más la reconstrucción del pulso sino hasta un momento más tarde. Los paneles restantes, 4.5d a 4.5g, muestran que, incluso en un cristal de este tipo, el resultado de Bloch sigue siendo válido en cuanto a que la amplitud de las oscilaciones es cada

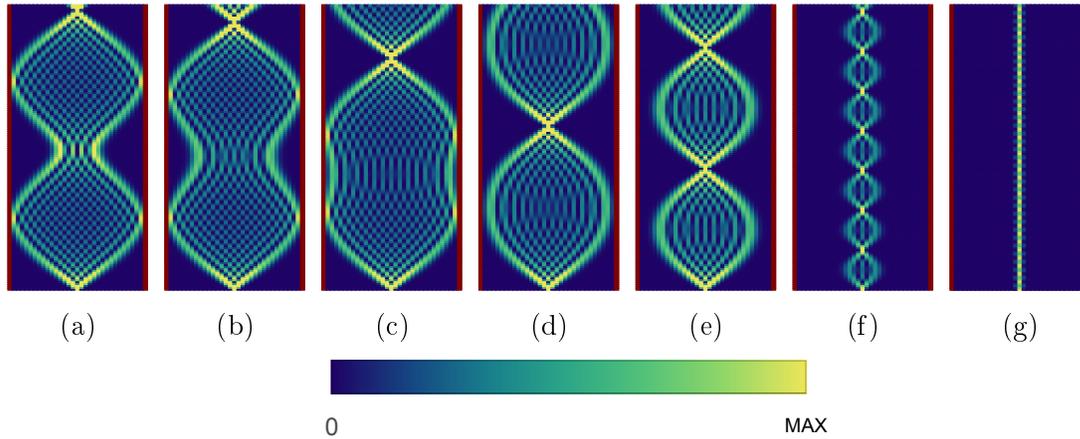


Figura 4.5: Emergencia de oscilaciones de Bloch. Propagación de pulsos en una cadena finita SU(2) en presencia de un campo externo. La presencia de una fuerza constante confina las oscilaciones ya que disminuye su amplitud, además aumenta la frecuencia de oscilación. Los valores de la intensidad del campo externo son (a) $\beta = 0,25$, (b) $\beta = 0,5$, (c) $\beta = 1$, (d) $\beta = 2$, (e) $\beta = 3$, (f) $\beta = 10$, (g) $\beta = 50$.

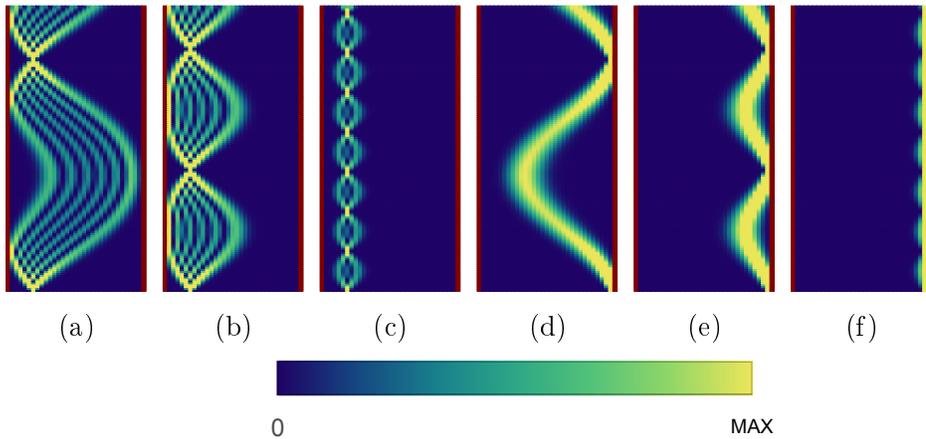


Figura 4.6: Oscilaciones de Bloch asimétricas SU(2). El campo produce oscilaciones de Bloch del paquete de ondas en esta cadena finita inhomogénea incluso para posiciones distintas al centro resultando en oscilaciones asimétricas. Aquí un pulso se propaga desde una posición inicial $n_i = -10$ con intensidad de campo externo (a) $\beta = 1$, (b) $\beta = 3$, (c) $\beta = 10$, y desde $n_i = 15$ con los mismos valores de β .

vez más pequeña a medida que el campo es más intenso y que la frecuencia aumenta como lo hace el campo. En el último panel podemos notar que, en esta aproximación a una banda y en el límite de β muy grande, el pulso es obligado a permanecer en su posición inicial. Más adelante veremos que la validez del fenómeno de oscilaciones de Bloch no solamente es aplicable al cristal SU(2), sino que la cadena infinita SU(1,1) y la semi-infinita de Heisenberg también lo comparten.

Puesto que la posición inicial no se limita al origen, en la Fig. 4.6 mostramos lo que denominamos oscilaciones de Bloch asimétricas. Los paneles muestran que las

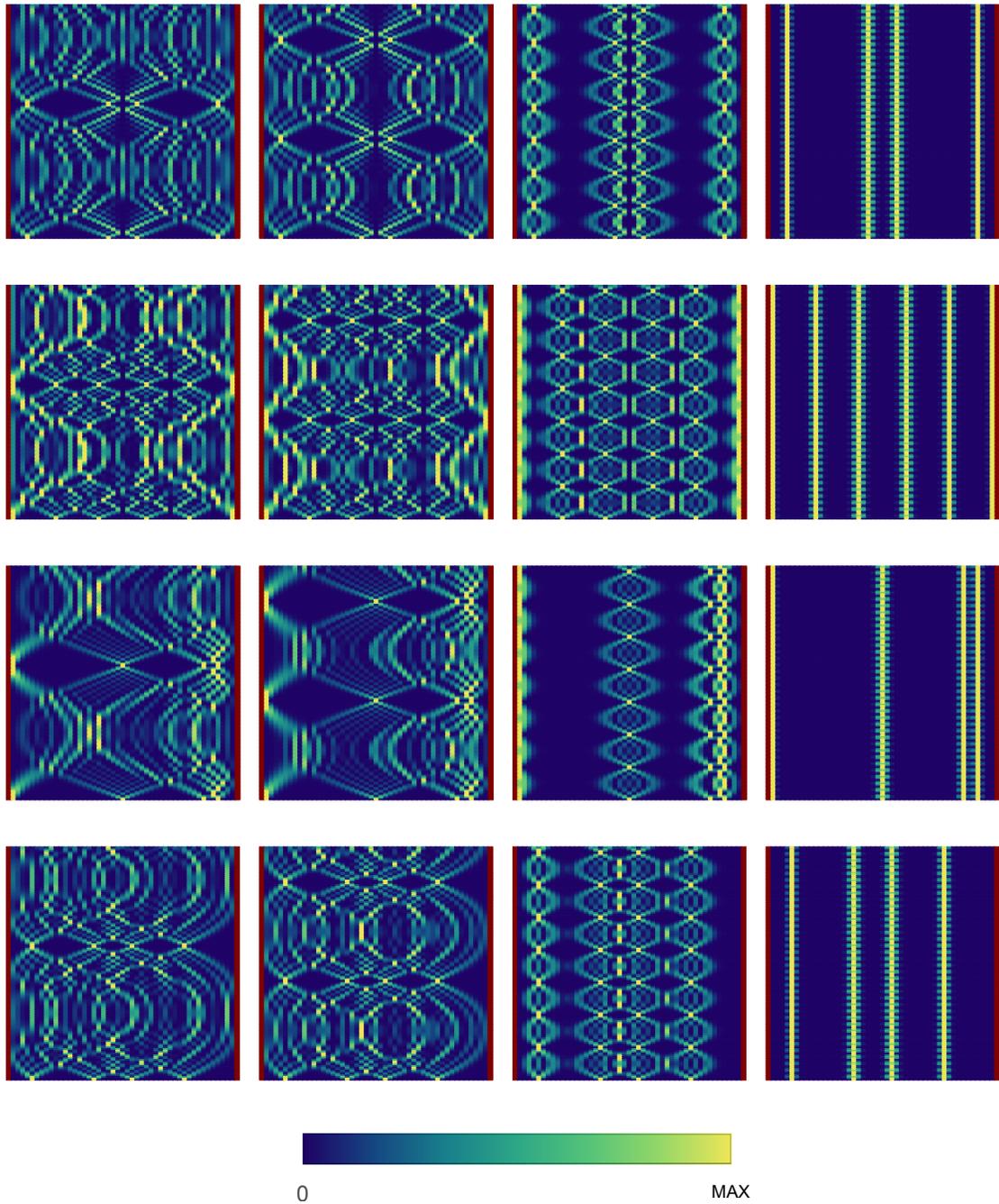


Figura 4.7: Tapices de oscilaciones de Bloch sobre espacio-tiempo en cristal SU(2). La intensidad del campo externo toma los valores representativos $\beta = 2, 3, 10$ y 50 de izquierda a derecha. En el primer renglón los pulsos se ubican en $|n_i| = 20, 3$, en el segundo en $|n_i| = 23, 5, 14$, en $n_i = -23, 0, 17$ y 20 para el tercer renglón y finalmente en $n_i = -19, -6, 2$ y 13 para el último.

oscilaciones de Bloch, en posiciones distintas a $n_i = 0$ se ajustan al entorno de propagación, respetando las restricciones de velocidad impuestas por los acoplamientos entre sitios. Esto sugiere que una riqueza de patrones de interferencia pueden ser

creados, prueba de ello son los tapices de oscilaciones de Bloch, vea la Fig. 4.7. Hasta donde sabemos, los patrones de interferencia 4.7 parecen ser de las primeras alfombras cuánticas o de luz con campo externo. El punto clave para entender lo que se observa está en que cada pulso lleva a cabo oscilaciones de Bloch independientes pero su naturaleza ondulatoria causa interferencia.

Para terminar, la propagación de Gaussianas se estudia de nuevo, ahora con campo externo, Fig. 4.8. Es de suma importancia señalar las coincidencias entre las propiedades de propagación para este tipo de paquetes en el cristal SU(2) y el ISO(1,1) bajo las mismas condiciones. Es bien sabido que las Gaussianas en ISO(1,1) con campo externo pasan de propagarse linealmente a hacerlo de forma oscilatoria, aquí también se nota que la “trayectoria” de propagación es de tipo sinusoidal, con esto es claro que su superposición produce oscilaciones de Bloch. Esto ayuda a vislumbrar un poco más del funcionamiento interno del cristal al alimentar un pulso. La distribución que resulta por superposición corresponde a la Fig. 4.5e.

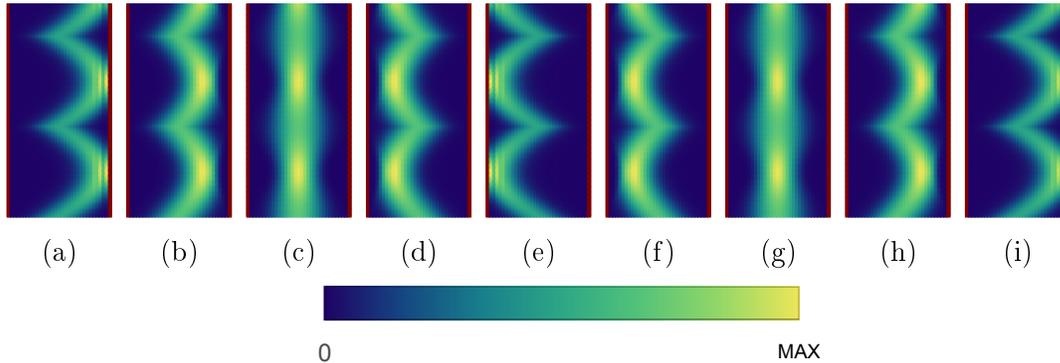


Figura 4.8: Dispersión de ondas Gaussianas monocromáticas en una cadena SU(2) con campo externo. Los valores de cuasimomento y de γ son los mismos que se especificaron en la Fig. 4.4. El efecto de un campo externo consiste en disminuir la amplitud y aumentar la frecuencia de oscilación, lo cual puede ser tomado como una oscilación de Bloch del paquete Gaussiano. Todas las distribuciones inicialmente están centradas alrededor de $n_i = 0$ y $\beta = 3$.

Recapitulando, vimos que en el caso libre un pulso siempre se reconstruye después de cierto tiempo sin importar su posición inicial y que esto sucede porque el Hamiltoniano evoluciona al sistema de tal forma que el estado inicial rota en el tiempo. La velocidad del frente de ondas siempre se puede entender con ayuda de la amplitud de salto, observando que el frente de ondas puede acelerar o frenar debido a la inhomogeneidad del espacio. Además, los paquetes Gaussianos monocromáticos son dispersados por el cristal y su superposición explica las distribuciones que se obtienen para los pulsos. También vimos que un campo externo produce oscilaciones de Bloch, tal y como sucede en la cadena homogénea libre, resultando en una generalización de este fenómeno a un cristal finito SU(2) (inhomogéneo). En general, la propagación de muchos pulsos tiene por principio rector la reconstrucción de la distribución inicial después del tiempo $t(\beta) = 2\pi/\omega(\beta)$.

4.2. Cadena infinita SU(1,1)

Hemos visto lo que sucede en la cadena finita SU(2) comprobando que, en efecto, se presentaron fenómenos muy interesantes. Toca el turno de considerar una cadena infinita inhomogénea la cual se caracteriza por tener como grupo dinámico a SU(1,1). Procederemos como lo hemos hecho hasta ahora, comenzando por estudiar el caso de la cadena en ausencia de campo externo. Veremos que el acoplamiento define en buena medida las propiedades de propagación. La acción de un campo externo que varía linealmente con la posición es considerada en la segunda subsección. Ahí, descubriremos que el campo, una vez más, produce oscilaciones de Bloch, un resultado fascinante.

4.2.1. Partícula libre SU(1,1)

La dinámica de una partícula libre en un cristal infinito SU(1,1) difiere sustancialmente de aquella de SU(2). La descripción teórica de este problema hace uso de los operadores de red, como en todos los problemas que aquí tratamos, aprovechando que estos tienen una estructura de grupo que hace posible parametrizar los acoplamientos con ayuda de α cuyo valor define el escenario físico. De hecho, hemos dedicado parte de este trabajo a explicar la relación de este parámetro con los acoplamientos. En lo que sigue, investigaremos el comportamiento de un pulso liberado en un cristal unidimensional infinito de acoplamientos crecientes, con ley parabólica. El cuadrado de esta función es una parábola que abre hacia arriba asegurando que el espectro de valores propios del operador de posición discreta consista de todos los elementos de $\mathbb{Z}/2$.

Un punto de partida natural consiste en sentenciar las condiciones sobre los parámetros de nuestro modelo que hacen que lo que describamos sea una cadena infinita. Lo expuesto en la sección 3.4.1 debería bastarnos para dar una respuesta. La condición de que la cadena sea infinita significa que el dominio del acoplamiento ha de ser infinito, entonces nos preguntamos por alguna manera de lograrlo. Una primera idea es considerar el polinomio cuadrático que lo define y hacer que sea mayor a cero para todo n , de este razonamiento vemos que la única forma de que esto suceda es que el “espín” sea complejo. Explicaremos esto a continuación.

Consideremos la expresión para los acoplamientos, Ec. 3.112, que obtuvimos anteriormente. Esta vez elijamos $\alpha < 0$ de tal forma que el grupo dinámico sea SU(1,1). Factorizando la constante tenemos

$$\Delta(n) = \pm \sqrt{\frac{|\alpha|}{2}} \sqrt{n^2 - n - \frac{2c_0}{\alpha}}. \quad (4.9)$$

Previamente hemos identificado $\frac{2c_0}{\alpha}$ con $j(j+1)$ para SU(2). Podemos hacer lo mismo para SU(1,1), lo importante es que garanticemos que Δ siempre sea real y que el espectro de N sea un conjunto infinito. Siguiendo [38], notamos que la condición de cadena infinita se traduce en exigir que $\frac{2c_0}{\alpha} \leq n^2 - n$. Por otro lado, el mínimo de la función $n^2 - n$ se da para $n = 1/2$, de donde se sigue que $\frac{2c_0}{\alpha} \leq -1/4$. Esta condición se cumple si j es de la forma $j = -1/2 + i\rho$ pues si es así obtenemos $j(j+1) =$

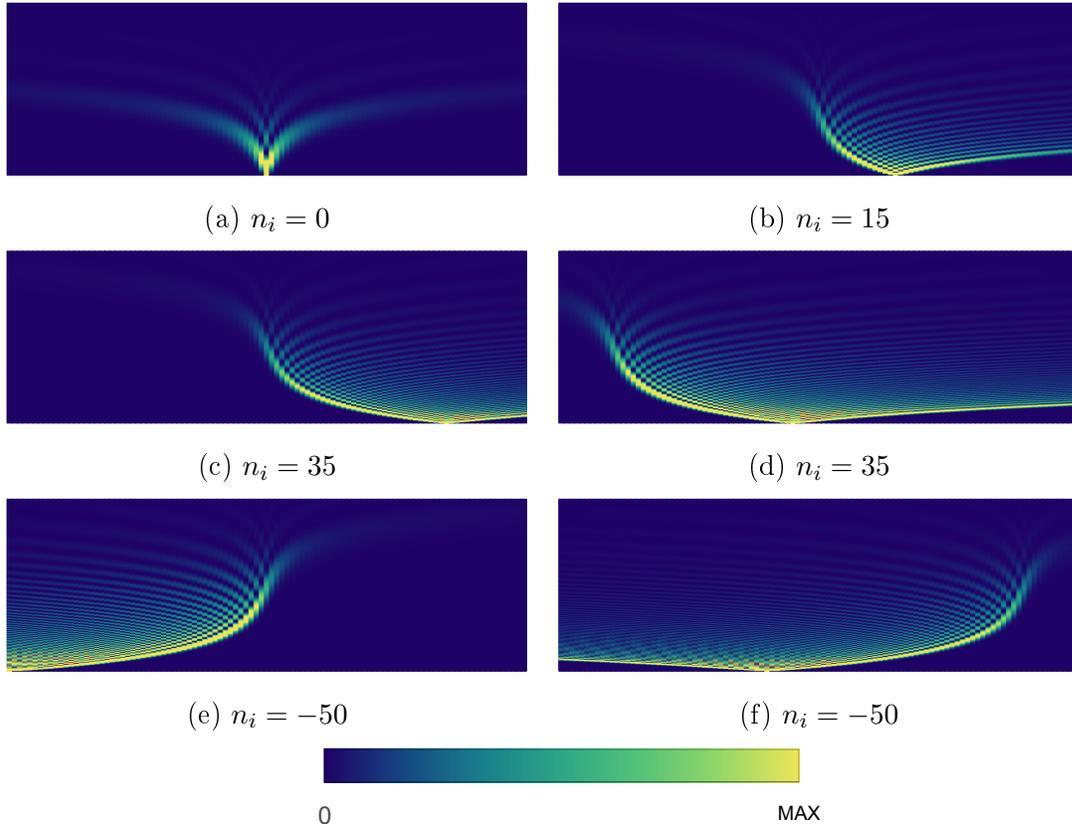


Figura 4.9: Propagación de pulsos en una cadena infinita SU(1,1) en ausencia de campo externo. Evolución espacio-temporal de un pulso inicialmente localizado (a) en el origen de la cadena, (b) en el sitio 15. (c) El comportamiento es similar para un pulso más alejado del centro, posición inicial $n_i = 35$. (d) Mostramos otro rango de posiciones para el mismo pulso, $n_i = 35$, se puede observar que el frente de ondas acelera en la región de acoplamientos crecientes. En (e) y (f) tenemos lo propio para el lado negativo de la cadena. El tiempo ahora va de 0 a 2π .

$-1/4 - \rho^2$, logrando así que $\Delta(n) \in \mathbb{R}$ para todo n en $\mathbb{Z}/2$, o sea, que $j(j+1) \leq -1/4$. De hecho, una condición equivalente es obtenida si tomamos $j \rightarrow k-1$, de tal forma que el invariante de Casimir ahora es $k(k-1)$, lo cual implica $k = 1/2 + i\rho$, el valor sugerido en (3.158). Observe que hemos elegido $|\alpha| = -\alpha$ dentro del radical en (4.9) así que todo es consistente. Además, es bien sabido que los índices, aunque ahora ya no guardan una relación directa con el “espín”, sí siguen siendo enteros o medio enteros, i. e. valores propios del operador de posición. Recordemos que para SU(2), el espín acotaba los valores que los sitios de cadena podían tomar, aquí el “espín” complejo hace posible que los índices no estén acotados. Este razonamiento concuerda bien con la teoría de SU(1,1) que hemos revisado anteriormente.

Con esto en mente, hemos graficado la solución de las Ecs. de Mello-Moshinsky discretas para espín complejo de la forma $j = -1/2 + i\rho$, $\alpha < 0$ y $\beta = 0$ en los

paneles de la Fig. 4.9. Es decir, el propagador para la cadena SU(1,1) es:

$$K_{mn}(t) = \Theta(t) D_{nm}^{-1/2+i\rho}. \quad (4.10)$$

Los rasgos observados son más que interesantes. Para comenzar con su análisis, consideremos el caso más simple correspondiente a un pulso alimentado en el centro de la cadena, panel 4.9a. Aunque uno imaginaria que una cadena infinita no tiene un centro, eso sólo sucede si el espacio es homogéneo; aquí, la presencia del acoplamiento entre sitios con dependencia espacial permite definir uno. En la Fig. 3.2 hemos graficado en color verde a la función de acoplamientos correspondiente a SU(1,1) según la cual el acoplamiento es mínimo, más distinto de cero, justo en el origen de la cadena. Dicho acoplamiento aumenta sin límite superior desde el centro hacia afuera. Como veremos en lo que sigue, esta función explica muchos de los rasgos que se observan en nuestras figuras.

Para empezar, es importante tener en mente el resultado de la cadena de amarre fuerte infinita unidimensional homogénea (de acoplamientos constantes) estudiada en [2] ya que la diferencia entre aquella y la cadena que aquí estudiamos consiste únicamente en que los acoplamientos aquí dependen de la posición. Sabemos de esta referencia que en la cadena homogénea existe una velocidad de propagación máxima, un resultado que nos recuerda a la dinámica relativista. Respecto a lo que nos concierne, lo que observamos en la Fig. 4.9a es que ¡el frente de ondas acelera!. En efecto, el pulso en su posición inicial está rodeado de un medio que propicia un aumento de la velocidad del frente de ondas puesto que la amplitud de salto siempre es creciente hacia ambos lados, justo por lo que hemos mencionado unas líneas arriba: partiendo del centro, el acoplamiento es simétrico y siempre crece hacia los “extremos” del cristal. Este paisaje provoca el efecto observado. Note que el principio de conservación de la probabilidad se cumple para cada rebanada de tiempo por ser una evolución unitaria. O sea que sumando sobre todos los sitios para cualquier tiempo t , deberíamos obtener la unidad. Una característica interesante de la propagación es que el esparcimiento de la probabilidad es tan rápido que no alcanzamos a ver más al pulso después de cierto tiempo, tanto porque la probabilidad se ha repartido ya entre muchos sitios, para tiempos crecientes, como porque la cadena es muy grande, para posiciones alejadas.

A estas alturas hemos sido testigos del peculiar comportamiento de los pulsos en medios cristalinos. Ondas acopladas evanescentemente, como la luz en cristales fotónicos, producirían estos patrones de interferencia. El tamaño de la cadena igual es relevante ya que, por la forma de la función de acoplamiento, el pulso tiende a propagarse muy lejos del centro en un lapso de tiempo pequeño. Note que, como en la cadena finita SU(2), la amplitud de salto también explica el cambio en la velocidad del frente de ondas en la cadena infinita SU(1,1).

En el siguiente panel, Fig. 4.9b, hemos considerado un pulso inicialmente localizado en $n_i = 15$. El patrón de interferencia obtenido es muy llamativo. Observe la asimetría en la propagación del frente de ondas, una consecuencia de la inhomogeneidad de la cadena. No tenemos más propagación balística como se obtuvo en [2]. Particularmente, si estamos en $n_i = 15$, la amplitud de salto crece hacia la derecha;

hacia la izquierda disminuye hasta $n = 0$ para volver a crecer hacia menos infinito. Esto se refleja en las propiedades de propagación. Desde $n_i = 15$, el frente de ondas acelera hacia la derecha, movimiento caracterizado por la curva cóncava hacia abajo. Hacia la izquierda, el frente de ondas desacelera hasta llegar al centro desde donde nuevamente acelera hacia la izquierda, aunque la intensidad ya es muy tenue para que el efecto pueda ser observado. Esto se repite para cada punto del frente de ondas produciendo el tapiz de interferencia.

Los siguientes paneles, 4.9c-4.9d, muestran lo que sucede cuando un pulso comienza a propagarse desde el sitio número 35. Tenga en cuenta que en nuestros paneles mostramos 101 sitios que se enumeran de -50 a 50 , para las figuras 4.9a-4.9c y 4.9e, mientras que para 4.9d y 4.9f, aunque mostramos una porción de la cadena del mismo tamaño, los sitios que se muestran van de -10 a 90 y de -90 a 10 , respectivamente, esto con el fin de mostrar la evolución desde otra toma. Continuando con la segunda fila de figuras, aún podemos ver la asimetría en la propagación además de que el patrón de interferencia ahora es más fino.

Finalmente, en los paneles 4.9e y 4.9f comprobamos que la función de acoplamiento es par pues las propiedades de propagación son parecidas a las del lado positivo de la cadena. El frente de ondas acelera hacia el lado donde la función es creciente y desacelera hacia el lado contrario hasta alcanzar el valor mínimo de la amplitud de salto, desde donde acelera de nuevo. Contrario a SU(2), para SU(1,1) no podemos evaluar de forma exacta la evolución de Gaussianas monocromáticas, no obstante, intuimos que aquellas con velocidad cuya magnitud sea máxima describen la forma de las cáusticas.

4.2.2. Partícula en presencia de un campo externo SU(1,1)

La presencia de un campo externo naturalmente modificará la dinámica del pulso. Como veremos a continuación, el campo asume el mismo papel que para el cristal finito SU(2) y la cadena de amarre fuerte homogénea ISO(1,1): el de confinar al pulso y producir oscilaciones de Bloch. Estudiaremos estos fenómenos notables en seguida.

Empecemos nuestro estudio partiendo de una cadena infinita SU(1,1) con un campo de intensidad débil. Resulta que el campo puede tomar valores en dos intervalos desconectados, en uno de ellos la evolución libre es modificada ligeramente mientras que en el otro encontramos oscilaciones de Bloch. El origen de estos intervalos de valores que β puede asumir se puede entender con ayuda de la expresión para el ángulo θ de la función D de Wigner con $\alpha < 0$. Lo que tenemos son dos intervalos para el campo externo relacionados directamente con el propagador de SU(1,1) y separados por una discontinuidad para el caso $\omega = 0$, con ω definida por $\omega = \sqrt{2\alpha + \beta^2}$. De hecho, de (3.203) y (3.204) encontramos que

$$\tan \theta = \frac{\sqrt{2\alpha}|\Gamma|}{\omega^2 - 2\Xi}, \quad (4.11)$$

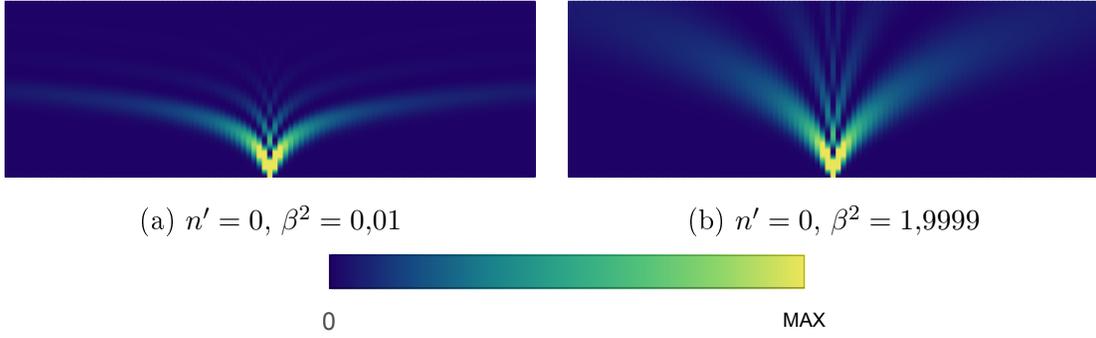


Figura 4.10: Campo en el intervalo $(0, \sqrt{2|\alpha|})$ sobre la cadena infinita SU(1,1). Propagación de pulsos desde el origen en una cadena infinita en presencia de un campo externo de baja intensidad. Específicamente, la magnitud del campo toma un valor en el intervalo $(0, \sqrt{2|\alpha|})$. Por simplicidad, se muestran los valores de β^2 ; $\alpha = -1$. El efecto resultante consiste en disminuir la magnitud de la aceleración del frente de ondas. El tiempo va de 0 a 2π .

con Γ y Ξ dados por (3.82). Esto da la siguiente expresión para θ :

$$\theta = \tan^{-1} \left\{ \frac{\sqrt{2\alpha[\beta^2(\cos \omega t - 1)^2 + \omega^2 \sin^2 \omega t]}}{\beta^2 + 2\alpha \cos \omega t} \right\}. \quad (4.12)$$

Es con ayuda de (4.12) que imponemos las condiciones sobre α y β tanto para la cadena finita SU(2) como para la cadena infinita SU(1,1) implementando así las restricciones necesarias. De hecho, el parámetro definitivo es j como ya lo hemos explicado.

El problema es que la ecuación $\omega = 0$ tiene dos soluciones que en principio, describen escenarios físicos totalmente distintos. Efectivamente, la solución de $2\alpha + \beta^2 = 0$ es, en términos de α , $\beta = \pm\sqrt{-2\alpha}$, lo cual tiene sentido simultáneamente para $\alpha \leq 0$. Esto parece conducir a una ambigüedad. Es decir, $\omega = 0$ contiene los escenarios físicos de cadena de Heisenberg libre ($\alpha = 0, \beta = 0$) y cadena SU(1,1) con campo ($\alpha = -|\alpha|, \beta = \pm\sqrt{2|\alpha|}$). En la siguiente sección calcularemos, otra vez con métodos algebraicos, el propagador de la cadena de Heisenberg con y sin campo. Por ahora, concentrémonos en SU(1,1). En lo que sigue veremos que si $\beta \in (0, \sqrt{2|\alpha|})$ no encontramos oscilaciones de Bloch aunque, como es de esperarse, la propagación sí se ve alterada. En contraste, cuando β supera el valor de $\sqrt{2|\alpha|}$, i. e. cuando se encuentra en el intervalo $(\sqrt{2|\alpha|}, +\infty)$ las oscilaciones de Bloch se muestran incluso de forma asimétrica debido a la inhomogeneidad de la cadena infinita SU(1,1). El comportamiento resultante se entiende claramente: para el intervalo no oscilatorio la “frecuencia” es imaginaria produciendo funciones hiperbólicas; por otro lado, para $\beta > \sqrt{2|\alpha|}$, ω es real, manteniendo las funciones trigonométricas de las que emerge el comportamiento oscilatorio.

Para un campo con magnitud en el intervalo $(0, \sqrt{2|\alpha|})$ tenemos los gráficos que se muestran en la Fig. 4.10. Varios comentarios son pertinentes. En 4.10a a 4.10b notamos que el efecto de confinamiento es apreciable teniendo en cuenta que la

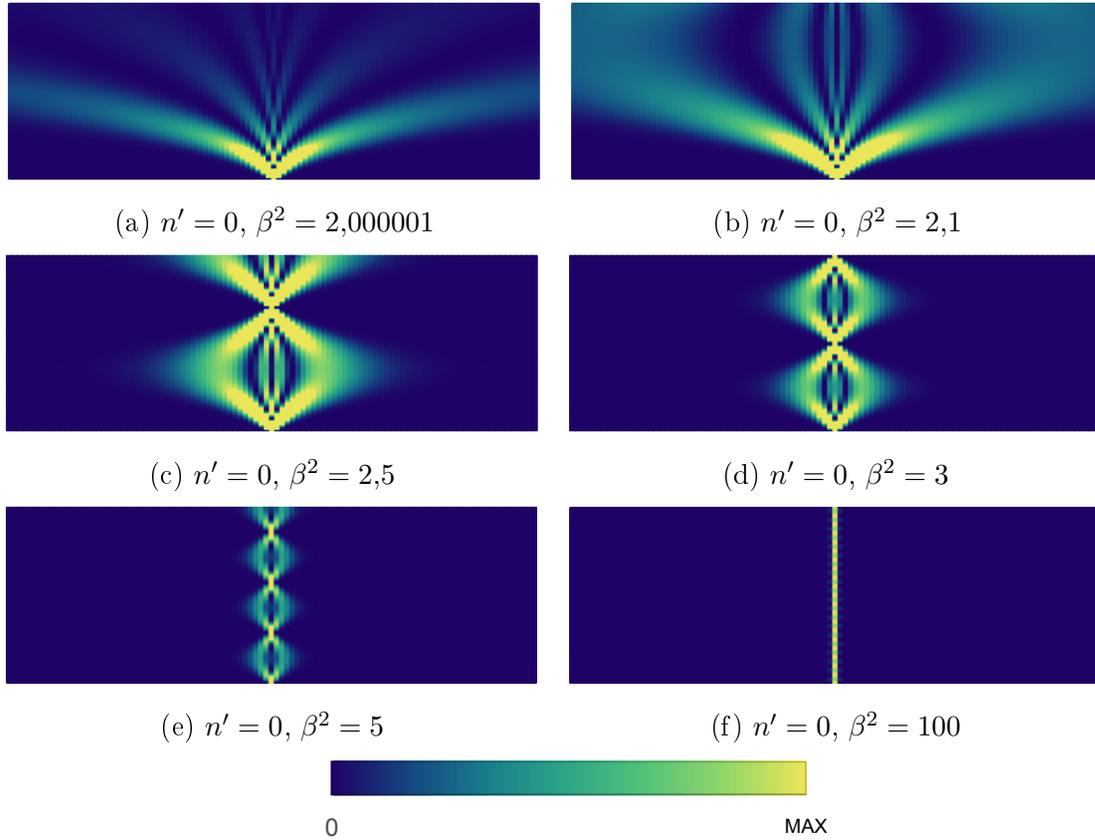


Figura 4.11: Oscilaciones de Bloch SU(1,1). Propagación de pulsos en una cadena infinita en presencia de un campo externo cuya magnitud está en el intervalo $(\sqrt{2|\alpha|}, +\infty)$. Un resultado fantástico es la aparición de las conocidas oscilaciones de Bloch a medida que aumentamos la intensidad del campo externo. Note que $t \in [0, 4\pi]$.

cadena es infinita. Podemos ver que el pulso comienza a ser limitado respecto a la región en la que puede propagarse. De hecho, la aceleración del frente de ondas es menor.

Un resultado más impresionante se presenta cuando el campo supera el valor de $\sqrt{2|\alpha|}$. En la Fig. 4.11 se puede observar lo que sucede. Sin duda, los resultados son asombrosos. ¡Encontramos oscilaciones de Bloch en la cadena infinita SU(1,1)!. Haremos algunos comentarios sobre nuestros hallazgos. Empecemos con el primer panel, 4.11a. En este caso, el campo es tan tenue que aún se alcanza a percibir cómo el frente de ondas acelera desde el centro de la cadena. Es decir, este valor del campo no alcanza como para hacer visible modificaciones drásticas en la dinámica de la cadena, al menos para posiciones cercanas al centro, que es mucho pedir considerando que la cadena es infinita. Sin embargo, en posiciones más alejadas ya se da una diferencia enorme, aunque también es seguro que sigue siendo difícil de visualizarla por lo pequeño que son los valores no nulos de la distribución en zonas apartadas del origen. Aclaremos que esto sí es una oscilación de Bloch por lo expuesto con respecto a ω .

4.2. Cadena infinita SU(1,1)

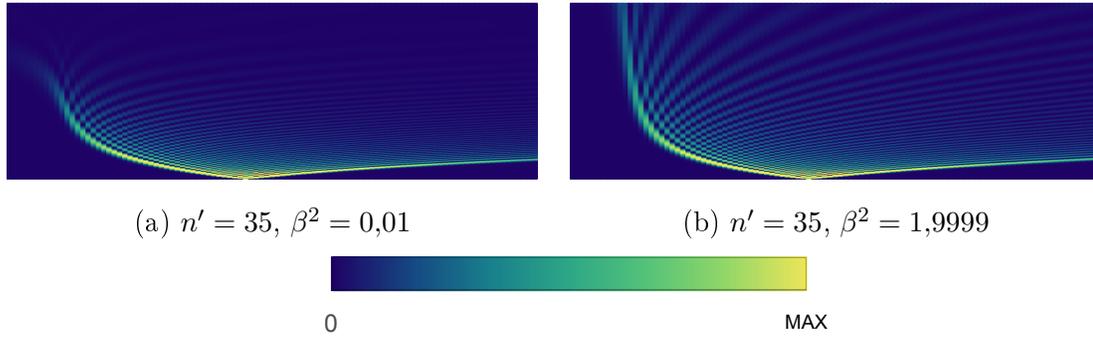


Figura 4.12: Propagación de pulsos en una cadena SU(1,1) bajo un campo en el intervalo no oscilatorio $(0, \sqrt{2|\alpha|})$. Mostramos los valores de β^2 cuando $\alpha = -1$. Hemos elegido por posición inicial al sitio número 35. Vemos que la región de propagación es limitada. $t \in [0, 2\pi]$.

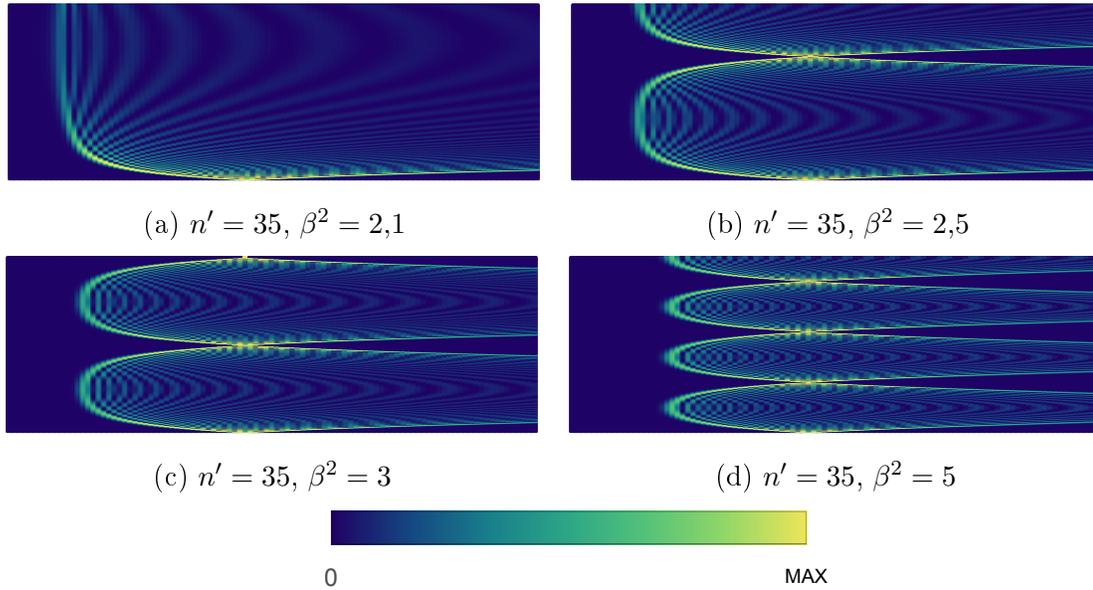


Figura 4.13: Oscilaciones de Bloch asimétricas SU(1,1). Propagación de pulsos en una cadena infinita en presencia de un campo externo. Aquí mostramos lo que pasa cuando el pulso se localiza inicialmente en posiciones distintas al origen, específicamente el sitio inicial es $n_i = 35$. El tiempo va de 0 a 4π .

Continuando, el siguiente valor del campo externo que hemos elegido es $\beta^2 = 2,1$ y se presenta en la Fig. 4.11b, dicho valor difiere por muy poco del valor anterior, sin embargo, hace observables las oscilaciones de Bloch en nuestro rango de visión. Esto muestra lo sensible que es el sistema ante un pequeño incremento de la magnitud del campo externo. Notamos que lo que emerge es el perfil de una oscilación cuyo ancho parece exceder los 101 sitios que se muestran. Las siguientes figuras, 4.11c-4.11e, nos enseñan que el resultado ya conocido de atenuación de amplitud y aumento de la frecuencia de oscilación siguen vigentes, mostrando que al igual que en el cristal

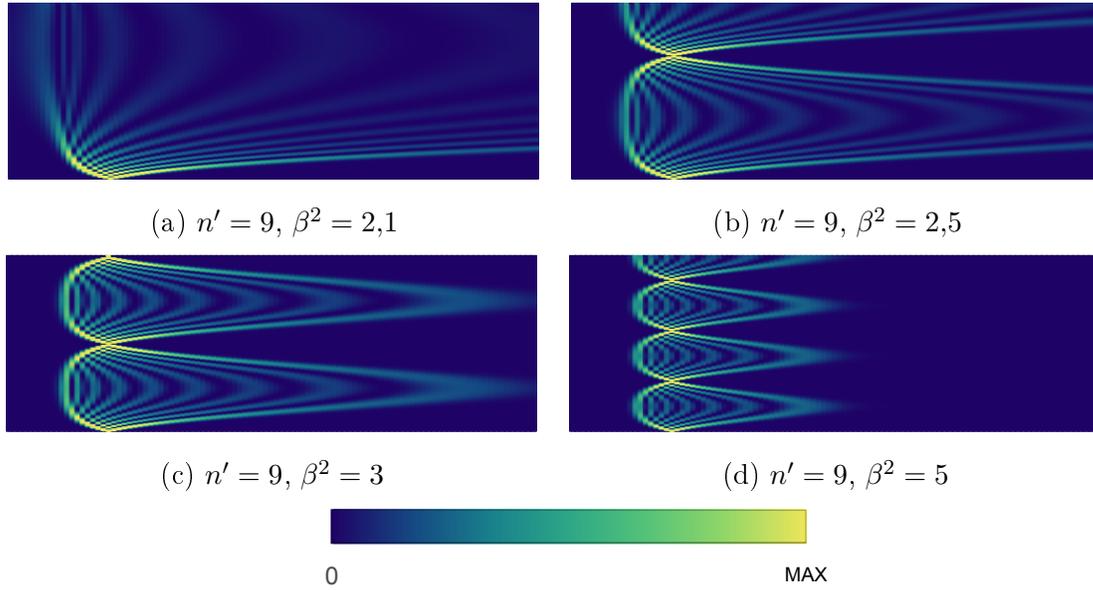


Figura 4.14: Oscilaciones de Bloch asimétricas SU(1,1) desde una posición más cercana al origen. Propagación de pulsos en una cadena infinita en presencia de un campo externo. Aquí mostramos lo que pasa cuando el pulso se localiza inicialmente en posiciones más cercanas al origen. Esto deja claro que la amplitud de las oscilaciones es proporcional al acoplamiento entre sitios.

finito SU(2), en el cristal infinito SU(1,1) el resultado de Bloch también es válido.

Es maravilloso que todavía podamos distinguir los efectos provocados por la inhomogeneidad de la cadena. Observe que en el panel 4.11b aún se nota que el frente de ondas acelera antes de llevar a cabo la oscilación. Finalmente, para un campo de magnitud $\beta = 10$, el pulso permanece fuertemente localizado en su posición inicial, vea la Fig. 4.11f. Compare este valor del campo con aquel con el que se alcanza el mismo estado para SU(2), éste es menor para SU(1,1) pero cambia si la ubicación del pulso es otra. Hasta aquí sólo hemos explorado el caso de una cadena bajo la acción de un campo externo con una partícula localizada en el origen. A continuación observaremos lo que sucede cuando el sitio inicial es distinto de cero.

Diríjase a las Figs. 4.12 y 4.13 para observar lo que sucede cuando un pulso se libera en posiciones distintas al origen en la cadena infinita SU(1,1) y cuando un campo externo actúa sobre el sistema. La primera figura muestra el intervalo de valores de β que no produce oscilaciones de Bloch. Por otro lado, la Fig. 4.13 es más interesante. ¡Las oscilaciones de Bloch resultantes son asimétricas!. Esto obedece, claramente, a la inhomogeneidad de la cadena. Cabe señalar que en estos cristales inhomogéneos la forma de las oscilaciones depende tanto de la posición inicial como de la magnitud del campo, como se puede constatar en la Fig. 4.14. Así, vemos que, al igual que en SU(2), el campo confina cada vez más al pulso, sin embargo, la magnitud necesaria para confinar al pulso aumenta a medida que el pulso comienza a propagarse desde un sitio más alejado del origen, donde el acoplamiento entre sitios es mayor. Cada panel muestra un total de 101 sitios, explícitamente, se muestran

los sitios del -10 al 90 . La paridad de $\Delta(n)$ garantiza una dinámica similar del lado negativo de la cadena.

En resumen, la cadena infinita $SU(1,1)$ ha mostrado ser muy interesante. La dinámica de un pulso en un cristal de este tipo es gobernada, principalmente, por la función de amplitud de salto. Vimos que, por su forma, dicha función propicia una propagación simétrica cuando se empieza en el origen. Una característica sobresaliente de un pulso en un cristal $SU(1,1)$ es la aceleración del frente de ondas. Además, en presencia de un campo externo, se presentan oscilaciones de Bloch. Estas oscilaciones se ven afectadas por la inhomogeneidad del cristal de tal forma que en sitios distintos al origen las oscilaciones son asimétricas.

4.3. Cadena semi-infinita Heisenberg

Hasta ahora hemos discutido las propiedades de propagación en una cadena finita $SU(2)$ y una infinita $SU(1,1)$. Es turno de hablar sobre la cadena semi-infinita Heisenberg. En esta sección calcularemos los propagadores de la cadena de Heisenberg tanto para una partícula libre como para una bajo la acción de una fuerza constante. En seguida, estudiaremos las propiedades de propagación de pulsos en esta cadena.

4.3.1. Partícula libre Heisenberg

Previamente, hemos mostrado que el álgebra de Heisenberg conduce a un acoplamiento que depende como la raíz cuadrada de la posición, la gráfica se observa en color azul, la de pendiente unitaria, en la Fig. 3.2. Esto nos motiva a considerar el siguiente límite:

$$\sqrt{an^2 + bn + c} \rightarrow \sqrt{n + c}, \quad (4.13)$$

esto es, cuando $a \rightarrow 0$ y $b \rightarrow 1$. La función de partida en (4.13) representa bien nuestro acoplamiento general (3.115). El límite lo expusimos en la discusión de acoplamientos y, como se puede notar, nos obliga a requerir que $n \geq n_{\text{mín}}$, donde $n_{\text{mín}}$ representa el valor propio más pequeño de N , de tal forma que $n + c \geq 0$, con lo que evitamos raíces de cantidades negativas o acoplamientos complejos. Además, $n = n_{\text{mín}}$ debe cancelar el coeficiente para que las recurrencias se satisfagan, i. e.

$$\Delta_n^2 - \Delta_{n+1}^2 = \Theta_n(a'n + b'), \quad (4.14)$$

con

$$\Theta_n = \begin{cases} 1, & n \geq n_{\text{mín}} \\ 0, & \text{de otra forma} \end{cases} \quad (4.15)$$

y donde hemos definido $\Delta_n \equiv \Delta(n)$.

Para lograrlo, no perdemos generalidad en trasladar el origen de la cadena, de manera que

$$n - n_{\text{mín}} \geq 0 \quad n - n_{\text{mín}} \rightarrow n, \quad (4.16)$$

eligiendo e. g. $c = -n_{min}$. Con ello, el operador A se representa, en la base del oscilador, como

$$A \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \sqrt{n} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = a^\dagger, \quad (4.17)$$

la cual es justamente la representación del operador de creación. Análogamente, resulta que $A^\dagger = a$. Podemos ver que

$$[A, A^\dagger] = [a^\dagger, a] = \alpha N + \delta = -1 \quad (4.18)$$

sería como elegir $\alpha = 0, \delta = -1$.

Ahora, recordemos que x (el operador de posición) es de espectro continuo y en términos de los operadores de creación y aniquilación se escribe de la siguiente forma:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger) = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger), \quad (4.19)$$

mientras que un estado propio de x es

$$|x\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n|x\rangle |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^*(x) |n\rangle, \quad (4.20)$$

donde hemos hecho uso de la relación de completitud de la base del oscilador y donde ψ_n es la función de onda del n -ésimo estado excitado del oscilador dada por

$$\psi_n(x) = c_n e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right), \quad (4.21)$$

con H_n los polinomios de Hermite. En la base del oscilador, el operador de posición se representa por

$$x \doteq \frac{x_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \ddots & \vdots & \ddots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \ddots & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \ddots & \sqrt{n-1} & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \sqrt{n} & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

4.3. Cadena semi-infinita Heisenberg

y se diagonaliza con vectores del tipo

$$(\psi_0(x), \psi_1(x), \psi_2(x), \dots)^T, \quad (4.23)$$

siendo x el índice continuo de eigenvalores.

Habiendo revisado lo anterior, tomemos

$$H = \varepsilon_0(a + a^\dagger), \quad (4.24)$$

donde ε_0 tiene unidades de energía. En otras palabras, escribamos al Hamiltoniano para la partícula libre en una cadena de Heisenberg con ayuda de los operadores de creación y aniquilación pues lo que hemos explicado hasta ahora nos permite hacer esta identificación. Recuerde que el Hamiltoniano general es (3.56), por lo que la elección (4.24) efectivamente corresponde al caso libre. El operador de evolución temporal es simplemente:

$$U = e^{-\frac{i\varepsilon_0 t}{\hbar}(a+a^\dagger)} \quad (4.25)$$

y el propagador está dado por (3.32). Para encontrar su representación en la base de número podemos hacerlo con integrales, a saber

$$\begin{aligned} \langle n|U|n'\rangle &= \int d\varepsilon' \langle n|\varepsilon'\rangle \langle \varepsilon'| e^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}} |n'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' e^{-\frac{i\varepsilon' t}{\hbar}} \psi_n^*(\varepsilon') \psi_{n'}(\varepsilon') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' c_n c_{n'} e^{-\frac{\varepsilon'^2}{\varepsilon_0}} H_n\left(\frac{\varepsilon'}{\varepsilon_0}\right) H_{n'}\left(\frac{\varepsilon'}{\varepsilon_0}\right) e^{-i\frac{\varepsilon' t}{\hbar}} \end{aligned} \quad (4.26)$$

donde hemos hecho uso de la relación de completitud $\int d\varepsilon' |\varepsilon'\rangle \langle \varepsilon'|$ ya que ε es de espectro continuo; note que $\varepsilon \equiv \varepsilon_0(a + a^\dagger)$. La integral (4.26) se puede evaluar fácilmente.

El otro método, para calcular $U_{nn'}$, es el algebraico. Podemos hallar el propagador notando que la siguiente factorización es válida:

$$\exp\left\{-\frac{i\varepsilon_0 t}{\hbar}(a + a^\dagger)\right\} = \exp\left(-\frac{i\varepsilon_0 t}{\hbar}a^\dagger\right) \exp\left(-\frac{i\varepsilon_0 t}{\hbar}a\right) e^{-\frac{\varepsilon_0^2 t^2}{2\hbar^2}}, \quad (4.27)$$

esto se logra con la fórmula de Zanssenhaus ($e^{t(X+Y)} = e^{tX} e^{tY} e^{-\frac{t^2}{2}[X,Y]} + \dots$) y con los conmutadores

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad [a, [a, a^\dagger]] = [a^\dagger, [a, a^\dagger]] = 0. \quad (4.28)$$

Además, sobre un estado de posición discreta, un factor produce

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i\varepsilon_0 t}{\hbar}a\right) |n'\rangle &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\left(-\frac{i\varepsilon_0 t}{\hbar}\right)^m}{m!} a^m |n'\rangle \\ &= \sum_{m=0}^{n'} \frac{\left(-\frac{i\varepsilon_0 t}{\hbar}\right)^m}{m!} \sqrt{\frac{n!}{(n'-m)!}} |n' - m\rangle, \end{aligned} \quad (4.29)$$

donde hemos hecho uso de (3.163). Con estos resultados ya podemos calcular $U_{nn'}$, para esto, tomemos U como (4.27) y hagamos uso de (4.29), obtenemos

$$\langle n|U|n'\rangle = e^{-\frac{\epsilon_0^2 t^2}{2\hbar^2}} \sum_{m'=0}^n \sum_{m=0}^{n'} \frac{\left(-\frac{i\epsilon_0 t}{\hbar}\right)^{m+m'}}{m'!m!} \sqrt{\frac{n'!n!}{(n'-m)!(n-m)!}} \langle n-m'|n'-m\rangle, \quad (4.30)$$

donde $\langle n|e^{-\frac{i\epsilon_0 t a^\dagger}{\hbar}}$ es simplemente el bra correspondiente al ket (4.29). Definiendo

$$P_{nn'}(t) \equiv \sum_{m'=0}^n \sum_{m=0}^{n'} \frac{\left(-\frac{i\epsilon_0 t}{\hbar}\right)^{m+m'}}{m'!m!} \sqrt{\frac{n'!n!}{(n'-m)!(n-m)!}} \langle n-m'|n'-m\rangle, \quad (4.31)$$

finalmente tenemos la expresión para el propagador de Heisenberg para una partícula libre, a saber

$$K_{nn'}(t) = \Theta(t) e^{-\frac{\epsilon_0^2}{2\hbar^2} t^2} P_{nn'}(t), \quad (4.32)$$

siendo $|K_{nn'}(t)|^2$ la probabilidad de pasar de un sitio de la cadena a otro.

Para evaluar el núcleo, podemos obtener una expresión para $P_{nn'}$ con ayuda de la definición de los polinomios generalizados de Laguerre ya que, partiendo de (4.31) y definiendo $\xi := \frac{\epsilon_0 t}{\hbar}$, tenemos

$$\begin{aligned} P_{nn'}(t) &= \begin{cases} \sqrt{\frac{n'!}{n!}} (-i\xi)^{n-n'} \sum_{m=0}^{n'} (-1)^m \binom{n}{n-m} \frac{(\xi)^{2m}}{m!} & \text{si } n \geq n' \\ \sqrt{\frac{n!}{n'!}} (-i\xi)^{n'-n} \sum_{m'=0}^n (-1)^{m'} \binom{n'}{n-m'} \frac{(\xi)^{2m'}}{m'!} & \text{si } n' \geq n \end{cases} \\ &= \begin{cases} \sqrt{\frac{n'!}{n!}} (-i\xi)^{n-n'} L_{n'-n}^{n-n'}(\xi^2) & \text{si } n \geq n' \\ \sqrt{\frac{n!}{n'!}} (-i\xi)^{n'-n} L_n^{n'-n}(\xi^2) & \text{si } n' \geq n, \end{cases} \end{aligned} \quad (4.33)$$

donde $L_n^\alpha(x)$ es el n -ésimo polinomio generalizado de Laguerre. Podemos utilizar esta expresión para evaluar numéricamente las distribuciones correspondientes. En la Fig. 4.15 se puede observar la dinámica de pulsos en la cadena de Heisenberg.

Ahora hacemos algunos comentarios acerca de lo que se observa en la Fig. 4.15. Como para las otras cadenas, las figuras 4.15a-4.15d se caracterizan principalmente por la aceleración del frente de ondas. Aunque esto parezca cliché, la aceleración del frente de ondas es una característica central de la propagación en cristales inhomogéneos, en contraste con el cristal homogéneo ISO(1,1) donde la propagación es balística [2]. Esto es claro ya que en cadenas inhomogéneas, donde los acoplamientos varían (como las que estudiamos aquí), se producen cambios en la velocidad de propagación. Además, note que la magnitud de la aceleración en la cadena de Heisenberg es menor a aquellas que encontramos en SU(2) y SU(1,1) por el simple hecho de que la función de acoplamiento es la raíz cuadrada de una expresión lineal de la posición mientras que en los otros casos tenemos la raíz de un polinomio cuadrático.

la parte no trivial de (4.34), donde en general hemos considerado $\epsilon \in \mathbb{C}$. Notemos que la siguiente factorización es posible:

$$\begin{aligned} H &= (\sqrt{u}A + \frac{\epsilon^*}{\sqrt{u}})(\sqrt{u}A^\dagger + \frac{\epsilon}{\sqrt{u}}) - \frac{|\epsilon|^2}{u} \\ &= u(A + \frac{\epsilon^*}{u})(A^\dagger + \frac{\epsilon}{u}) - \frac{|\epsilon|^2}{u}, \end{aligned} \quad (4.36)$$

i. e., el Hamiltoniano se puede escribir como el producto de los operadores A y A^\dagger trasladados por una constante. Este efecto se puede lograr con ayuda del operador de traslación unitaria que definiremos como sigue

$$G := \exp[bA - b^*A^\dagger] = e^{bA}e^{-b^*A^\dagger}e^{-\frac{|b|^2}{2}} = e^{-b^*A^\dagger}e^{bA}e^{\frac{|b|^2}{2}}, \quad (4.37)$$

para entender por qué, calculemos el conmutador de G con A , éste da

$$[G, A] = e^{-\frac{|b|^2}{2}}e^{bA}[e^{-b^*A^\dagger}, A] = e^{-\frac{|b|^2}{2}}e^{bA}(-b^*e^{-b^*A^\dagger}) = -b^*G \quad (4.38)$$

de donde vemos que

$$G^{-1}AG = (A + b^*). \quad (4.39)$$

De esta forma hemos mostrado que, en efecto, G traslada en b^* al operador A . Igualmente, se puede mostrar que G traslada en b a A^\dagger .

Lo anterior nos permite escribir al Hamiltoniano (4.36) con ayuda de G mediante una elección adecuada de b (de hecho $b = \epsilon/\sqrt{u}$, con $u \in \mathbb{R}$), por lo tanto tenemos

$$H = u(G^{-1}AG)(G^{-1}A^\dagger G) - |b|^2 = G^{-1}(uN - |b|^2)G, \quad (4.40)$$

así que ahora podemos escribir

$$U = \exp\left[-\frac{it}{\hbar}G^{-1}(uN - |b|^2)G\right] = G^{-1}\exp\left[-\frac{it}{\hbar}(uN - |b|^2)\right]G \quad (4.41)$$

pues notemos que $(G^{-1}\chi G)^n = G^{-1}\chi^n G$, de tal forma que

$$U_{mn} = \langle m|G^{-1}\exp\left[-\frac{it}{\hbar}(uN - |b|^2)\right]G|n\rangle. \quad (4.42)$$

Insertando la relación de completitud $\sum_{k=0}^{\infty} |k\rangle\langle k|$ obtenemos

$$U_{mn} = \sum_{k=0}^{\infty} \exp\left[-\frac{it}{\hbar}(uk - |b|^2)\right] \langle m|G^{-1}|k\rangle \langle k|G|n\rangle. \quad (4.43)$$

Los elementos de G se calculan fácilmente en la base del oscilador con la ya familiar fórmula de Zassenhaus, vea (4.37), escribimos

$$\begin{aligned} G_{kn} &= \langle k|G|n\rangle = \langle k|e^{bA}e^{-b^*A^\dagger}e^{-\frac{|b|^2}{2}}|n\rangle \\ &= e^{-\frac{|b|^2}{2}} \sum_{l'=0}^k \sum_{l=0}^n \frac{b^{l'}}{l'!} \frac{(-b^*)^l}{l!} \sqrt{\frac{k!n!}{(k-l')!(n-l)!}} \delta_{k-l', n-l} \end{aligned} \quad (4.44)$$

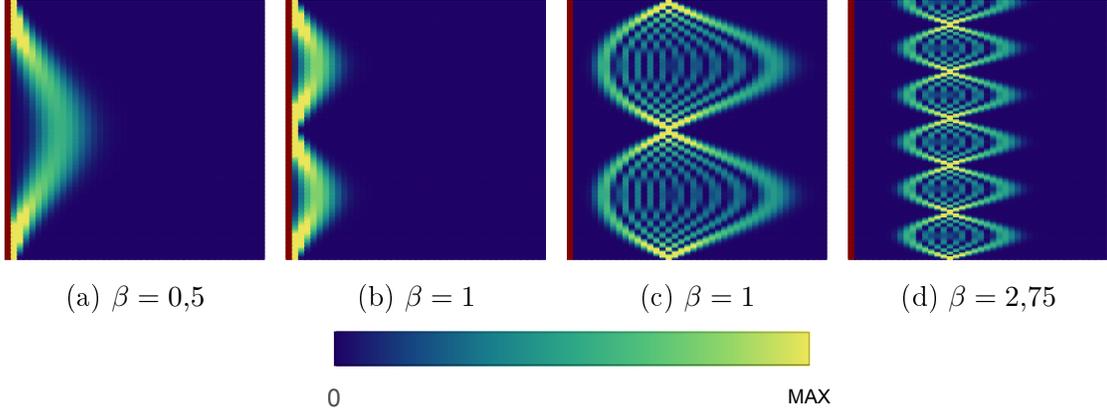


Figura 4.16: Oscilaciones de Bloch-Heisenberg. Propagación de pulsos en una cadena semi-infinita inhomogénea con campo externo. Las distribuciones de probabilidad resultantes exhiben oscilaciones de Bloch asimétricas debido a la ley de acoplamiento de la cadena de Heisenberg. El comportamiento característico, de reducción de la amplitud y aumento de la frecuencia de oscilación, se observa. Los pulsos se ubican inicialmente en $n_i = 0$ y $n_i = 15$. Hay 40 sitios de red en cada panel y el intervalo temporal es de tamaño 4π .

Una propiedad importante de G es que $G^{-1}(b) = G(-b)$, por lo que los elementos $\langle m|G^{-1}|k\rangle$ se obtienen fácilmente de los de G .

Una expresión común para los elementos de G se obtiene de (4.44) notando lo siguiente:

$$\begin{aligned}
 G_{kn}(b) &= e^{-\frac{|b|^2}{2}} \left\{ \begin{array}{l} \sum_{l=0}^n \frac{\sqrt{k!n!}}{(k-n+l)!l!(n-l)!} b^{k-n+l} (-b^*)^l \\ \sum_{l'=0}^k \frac{\sqrt{k!n!}}{l'!(n-k+l')!(k-l')!} b^{l'} (-b^*)^{n-k+l'} \end{array} \right. \\
 &= e^{-\frac{|b|^2}{2}} \left\{ \begin{array}{l} b^{k-n} \sqrt{\frac{n!}{k!}} \sum_{l=0}^n (-1)^l \binom{k}{n-l} \frac{|b|^{2l}}{l!} \\ (-b^*)^{n-k} \sqrt{\frac{k!}{n!}} \sum_{l'=0}^k (-1)^{l'} \binom{n}{k-l'} \frac{|b|^{2l'}}{l'!} \end{array} \right. \quad (4.45) \\
 &= e^{-\frac{|b|^2}{2}} \left\{ \begin{array}{l} b^{k-n} \sqrt{\frac{n!}{k!}} L_n^{k-n}(|b|^2) \quad \text{si } k \geq n \\ (-b^*)^{n-k} \sqrt{\frac{k!}{n!}} L_k^{n-k}(|b|^2) \quad \text{si } n \geq k \end{array} \right.
 \end{aligned}$$

donde hemos diferenciado entre $k \geq n$ y $n \geq k$, con L_n^α los polinomios generalizados de Laguerre. Todo esto nos permite escribir el propagador para una partícula en una cadena de Heisenberg bajo la acción de un campo externo, a saber

$$\boxed{K_{mn}(t) = \Theta(t) \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{it}{\hbar}(uk-|b|^2)} G_{mk}^{-1}(b) G_{kn}(b)} \quad (4.46)$$

donde, de acuerdo a nuestra convención, $u = -\beta$. Finalmente, en la Fig. 4.16 presentamos las distribuciones de probabilidad resultantes para diversos valores de β y a continuación hacemos algunos comentarios.

El comportamiento característico se observa: las oscilaciones de Bloch se modulan mediante la magnitud del campo; vemos que las oscilaciones son asimétricas debido al medio inhomogéneo y tanto en 4.16a como en 4.16b, por ejemplo, se logra observar que el frente de ondas acelera en el lado de acoplamientos crecientes mientras que hace lo opuesto en el otro lado.

Ahora, aunque hemos dado una descripción cualitativa de nuestros resultados, procederemos a explicar un detalle sutil que se observó para las tres cadenas que hemos estudiado en el presente trabajo: la relación entre la intensidad del campo y la modulación en amplitud y frecuencia del paquete de ondas. Primero, señalemos que las oscilaciones de Bloch se han “explicado” en distintos términos, lejos de estar bien, uno de ellos es mediante la relación de dispersión. Por ejemplo, es común encontrarse con el siguiente argumento: para la red homogénea tenemos una relación de dispersión trigonométrica (en la base de Bloch) de tal forma que, en una aproximación semiclásica, la ecuación de movimiento, con $\hbar = a = 1$, para un paquete de ondas en un cristal es

$$\frac{dk}{dt} = \beta \quad (4.47)$$

cuya solución es $k(t) = k_0 + \beta t$. Ahora, la velocidad de grupo $v_g = \frac{dE(k)}{dk}$, con $E(k) = \Delta \cos k$, implica $\frac{dx_g}{dt} = -\Delta \sin(k)$, o sea

$$x_g(t) = x_g(0) + \frac{\Delta}{\beta} \cos(\beta t) \quad (4.48)$$

i. e. la trayectoria es oscilante con amplitud que va como $1/\beta$ y cuya frecuencia es directamente proporcional a β , con β la magnitud del campo. No obstante, uno debe tener en cuenta que esto sólo es “válido” para la cadena ISO(1,1) y no es un argumento riguroso, de hecho, como lo hemos señalado previamente, esta “explicación” carece de justificación matemática, aún así, da una idea intuitiva de por qué un paquete de ondas en la cadena homogénea se comporta de la forma en que lo hace, lo cual explica en parte su popularidad a pesar de su falta de veracidad; de aquí se inspira nuestra discusión de la propagación de Gaussianas en el cristal SU(2) cuando hicimos alusión a esta ecuación.

Otro argumento común sobre por qué se producen oscilaciones de Bloch (OB) es que existe una relación entre las OB y la idea de que el espectro es “equiespaciado” (en la base de Wannier) [45]. Esto es justo lo que sucede en la cadena homogénea ISO(1,1) de distribución de Bessel de donde es bien conocida la escalera de Stark, $E_m = \epsilon + m\beta$, $m \in \mathbb{Z}$, la cual se dice que se relaciona con la reconstrucción del paquete de ondas pues ésta sucede al tiempo de Bloch $t_B = 2\pi/\beta$. Algo similar ocurre en cada una de las cadenas inhomogéneas que hemos estudiado. De hecho, en [46] han mostrado que las cadenas con simetrías SU(2), SU(1,1) y Heisenberg tienen

una relación de dispersión del tipo escalera de Stark. En nuestra notación:

$$\begin{aligned}
 E_m^{\text{SU}(2)} &= m\sqrt{2\alpha + \beta^2} = m\omega, & m \in \{-j, \dots, j\} \\
 E_m^{\text{SU}(1,1)} &= m\sqrt{-2|\alpha| + \beta^2} = m\omega, & m \in \mathbb{Z} \\
 E_m^{\text{Heisenberg}} &= m\beta - \frac{\epsilon_0^2}{\beta}, & m \in \mathbb{N}_0
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

con $\omega = \sqrt{2\alpha + \beta^2}$, lo cual confirma la existencia de escaleras de Stark para cristales inhomogéneos. De esto notamos que dichas escaleras se relacionan con la periodicidad de las oscilaciones a tiempo $t_B = 2\pi/\omega$. Infortunadamente, la veracidad de este argumento también ha sido cuestionada, principalmente por Zak [44].

Hasta donde el autor de este trabajo sabe, explicar de forma rigurosa el origen o incluso probar la existencia de las oscilaciones de Bloch ha sido un tema de gran controversia, en este sentido, el formalismo de propagadores cristalinos asegura que el tiempo de Bloch sí está dado por $t_B = 2\pi/\omega$, lo cual se puede mostrar teniendo en cuenta que los propagadores para las cadenas SU(2) y SU(1,1) quedan en términos de funciones trigonométricas (vea (3.82)), las cuales tienen por argumento al producto ωt , con $\hbar = 1$, implicando un periodo característico dado por $t_B = 2\pi/\omega$, para SU(2), y para SU(1,1) cuando el campo está en el intervalo que llamamos oscilatorio. Esto también se cumple para el Hamiltoniano de amarre fuerte estándar e incluso se ha ido más allá de las oscilaciones de Bloch al grado de diseñar la forma de las cáusticas a través de la introducción de un campo externo dependiente del tiempo [25]. El propagador de la cadena de Heisenberg con campo externo también contiene información de esta naturaleza en el factor dado por la exponencial imaginaria. Por lo tanto, el origen de las oscilaciones de Bloch, en la aproximación a una banda, se puede atribuir a la representación espacial de transformaciones canónicas en cristales [26].

Otro punto que se aclara a continuación es el límite de la función de acoplamiento de SU(2) que ha sido mencionado en repetidas ocasiones, i. e., el límite donde la parábola se aproxima a una recta que interseca al origen (acoplamiento de la cadena de Heisenberg) al trasladar la parábola de tal forma que una de sus raíces sea $n = 0$ a la vez que la hacemos cada vez más grande ($j \rightarrow \infty$) de tal forma que cerca del origen la parábola luce como una recta de pendiente unitaria, esto se discutió en la sección 3.3.4 y se ilustró con las curvas de color azul en la Fig. 3.2. Este límite fue originalmente previsto para hacer notar que la dinámica de la cadena de Heisenberg se puede conocer con ayuda del propagador de la cadena SU(2), solución de las Ecs. de Mello-Moshinsky discretas generales (3.136)-(3.138). Para entender esto, compare la dinámica de la cadena de Heisenberg sin campo externo con aquella de SU(2) en la porción negativa de la cadena, Fig. 4.1a, hasta antes de que el frente de ondas rebote de la pared a la derecha, de esta manera no es difícil imaginar el resultado de alejar dicha pared prestando atención a lo que sucede junto a la pared izquierda (las “paredes” del cristal SU(2) se han representado como bordes de color sepia en los costados de las distribuciones). Así, al mover la pared derecha cada vez más lejos, tomando cadenas cada vez más grandes ($j \rightarrow \infty$) pero permaneciendo en

las cercanías de la pared izquierda, la dinámica cerca de esta pared, donde el primer sitio desde la izquierda ahora se toma como un nuevo origen, es idéntica a la de la cadena de Heisenberg. Matemáticamente, esto es uno de los límites asintóticos de la función D de Wigner, vea la ec. (4), p. 298 de [47], donde se muestra que, en este límite, dicha función se comporta como un polinomio generalizado de Laguerre, siendo este último característico del propagador de Heisenberg. Otro de los límites asintóticos de la D de Wigner está dado por la ec. (1) de la misma página de la referencia antes citada, en éste la D se comporta como una función de Bessel del primer tipo y tiene que ver con el siguiente escenario físico: cuando uno se ubica en el centro de la cadena $SU(2)$, Fig. 4.1b, y esta vez se alejan, no sólo una, sino las dos paredes, i. e. nuevamente consideramos una cadena muy grande, entonces la dinámica cerca del centro luce como la de la cadena $ISO(1,1)$ caracterizada por la propagación balística del pulso, dando lugar al cono de luz efectivo en espacio-tiempo [2]. Para entenderlo mejor, hay que percatarse de que en los alrededores del centro de la cadena de $SU(2)$ la parábola luce como una función constante cuando las raíces de ese polinomio cuadrático se alejan cada vez más, dicha función constante corresponde a los acoplamientos de la cadena de amarre fuerte estándar y se graficó en color negro en la Fig. 3.2, este límite se puede ilustrar, como se hizo para la cadena de Heisenberg, graficando parábolas cada vez más anchas pero manteniendo la ubicación del vértice, de esta forma se podría notar que dicho límite conduce a la función constante. En favor de la brevedad, se omite una discusión más detallada de estos límites, no obstante, la idea central se ha expuesto en estas líneas.

Para terminar este capítulo queremos mencionar que, al concluir este trabajo, hemos notado que en [46] y en las referencias ahí citadas ya han estudiado la dinámica de cristales fotónicos unidimensionales explotando las simetrías subyacentes. De hecho, en dicho estudio se han considerado los mismos grupos de simetría que en el presente trabajo. Sin embargo, es muy importante enfatizar que nuestro trabajo generaliza de forma clara los resultados ahí reportados a través de la introducción de un campo externo dependiente del tiempo cuyas ecuaciones de movimiento fueron resueltas haciendo uso de la base de Gell-Mann (3.103), (3.104), (3.109). Además, para obtener el propagador de los cristales $SU(2)$ y $SU(1,1)$ hemos recurrido a las Ecs. de Mello-Moshinsky discretas, evitando el método estándar de encontrar el operador de evolución temporal exponenciando el Hamiltoniano o escribiendo la serie de Dyson, métodos que sólo cubren ciertos casos. Esto muestra la relevancia de las Ecs. MM discretas ya que, resolviendo las relaciones de recurrencia, fuimos capaces de obtener la representación espacial del operador de evolución temporal de forma clara, general y elegante para la cadena no homogénea unidimensional. Otra novedad presentada en esta investigación es que hemos estudiado las representaciones de la clase continua entera de $SU(1,1)$ por lo que este trabajo constituye un ejemplo de aplicación de dicha clase de representaciones, que, en la opinión del autor de este trabajo, ha encontrado pocas aplicaciones en la literatura, mientras que en [46] hacen uso de la representación de la serie discreta positiva. Por si fuera poco, en el siguiente capítulo damos un vistazo a la propagación de paquetes de ondas en cristales bidimensionales inhomogéneos.

Capítulo 5

Hacia redes bidimensionales

En este último capítulo se cimientan las bases que nos permitirán construir los propagadores de redes bidimensionales no homogéneas que tienen por grupos dinámicos a $SU(3)$ y $SO(4)$. Discutiremos el álgebra de Cartan de los grupos semisimples de rango dos, escribiremos el Hamiltoniano de una red bidimensional no homogénea, hablaremos sobre los multipletes de $SU(3)$ y su relación con las redes triangulares así como sobre el álgebra $so(4)$. Finalmente, en la última sección daremos las Ecs. de Mello-Moshinsky discretas que resultan de resolver las ecuaciones de movimiento para los operadores involucrados, al menos para el cristal $SO(4)$. Así, presentaremos el conjunto de relaciones que definen la representación en el espacio discreto del operador de evolución temporal que corresponde a dicha red y cuya solución da la expresión del propagador cristalino asociado. Para finalizar, se da una idea sobre cómo proceder para hallar el propagador del cristal $SU(3)$.

5.1. Álgebra de Cartan para grupos semisimples de rango 2

A continuación se describen las propiedades de los grupos semisimples de rango 2. El estudio de estos grupos nos permitirá entender las simetrías que aparecen en la descripción de amarre fuerte de ciertos cristales bidimensionales no homogéneos y con ello abrir la puerta hacia el estudio de la propagación de paquetes de ondas en este tipo de redes. En estas cuestiones algebraicas seguimos de cerca la referencia [35].

Se sabe que las álgebras de grupos semisimples se pueden poner en forma estándar en términos de operadores de subida, bajada y peso, tal y como sucedió para el caso de los grupos semisimples de rango uno: $SU(2)$ y $SU(1,1)$. El rango del grupo se define como el número máximo de generadores del grupo de Lie que conmutan; dos en el caso de grupos semisimples de rango 2, los operadores de peso, como son denominados.

Sea un álgebra de Cartan de dimensión n y rango 2. En total, hay $c = n - 2$ operadores de escalera, la mitad de ellos son de ascenso y la otra mitad de descenso. Si denotamos por N_i , con $i = 1, 2$, a los operadores de peso y por $A_{\alpha^{(j)}}$, con $j =$

$1, \dots, c/2$, a los operadores de subida, entonces se cumple

$$[N_1, N_2] = 0, \quad (5.1)$$

i. e. estos observables pueden medirse simultáneamente. Antes de continuar, es necesario aclarar que los operadores de bajada se caracterizan por tener pesos opuestos a sus contrapartes de subida, i. e. el operador de bajada correspondiente a $A_{\alpha^{(j)}}$ es $A_{-\alpha^{(j)}}$ y hay un total de $c/2$ de ellos, como lo hemos sentenciado previamente.

Ahora, los operadores N_i “pesan” a los operadores de subida y bajada, i. e., el conmutador de cualquiera de ellos con algún operador de escalera devuelve un múltiplo del último. El factor de proporcionalidad es el peso que corresponde al operador con que se pesa, esto es

$$[N_i, A_{\alpha^{(j)}}] = \alpha_i^{(j)} A_{\alpha^{(j)}}, \quad (5.2)$$

es decir, operadores de peso distintos devuelven pesos diferentes para un mismo operador de escalera. En otras palabras, se dice que el operador de peso N_i elige la componente covariante $\alpha_i^{(j)}$ del vector raíz $\alpha^{(j)} = (\alpha_1^{(j)}, \alpha_2^{(j)})$, con $j = 1, \dots, c/2$. Las componentes contravariantes se denotarán por $[\alpha^{(j)}]^i$, con $i = 1, 2$.

Por otro lado, el conmutador entre operadores de escalera con pesos opuestos se puede escribir como

$$[A_{\alpha^{(j)}}, A_{-\alpha^{(j)}}] = [\alpha^{(j)}]^i N_i, \quad (5.3)$$

donde hemos adoptado la convención de suma de Einstein. Lo que nos dice la Ec. (5.3) es que el conmutador de un operador de subida con su operador de bajada correspondiente devuelve una combinación lineal de los operadores de peso.

Finalmente, es importante saber que las relaciones de conmutación entre dos operadores de subida o bajada de distinto tipo, o sea, que no guardan relación con respecto a su acción sobre los estados del cristal, están dadas por la expresión:

$$[A_{\alpha^{(j)}}, A_{\alpha^{(k)}}] = C_{\alpha^{(j)}\alpha^{(k)}} A_{\alpha^{(j)}+\alpha^{(k)}}, \quad \alpha^{(j)} + \alpha^{(k)} \neq 0 \quad (5.4)$$

donde el factor $C_{\alpha^{(j)}\alpha^{(k)}}$ es una constante y vemos que los subíndices (vectores) de los operadores de escalera se suman, esto es cierto siempre que la suma tenga sentido, i. e. siempre que $A_{\alpha^{(j)}+\alpha^{(k)}}$ sea uno de los c operadores de escalera, si esto no es así, entonces $[A_{\alpha^{(j)}}, A_{\alpha^{(k)}}] = 0$, esta aserción se sigue de la propiedad de cerradura del grupo.

Entre los ejemplos de grupos semisimples de rango 2 se encuentran $SU(3)$ y $SO(4)$ que son de especial interés para el desarrollo de este trabajo. En las secciones subsecuentes profundizaremos en el estudio de estos grupos y exploraremos su relación con los cristales bidimensionales no homogéneos. Por lo pronto, estamos en posición de formular un Hamiltoniano de amarre fuerte soluble para redes inhomogéneas 2D y de escribir las ecuaciones de movimiento correspondientes.

5.2. Hamiltoniano bilineal soluble general y ecuaciones de movimiento

En esta sección escribiremos el Hamiltoniano general correspondiente a una red bidimensional no homogénea con número de coordinación par, esta elección se hace a sabiendas de que contiene a las redes cuadradas y triangulares como casos específicos, de hecho, es una elección justificada teniendo en cuenta que el número de operadores de escalera siempre es par y solamente hay dos operadores de peso disponibles. En seguida, daremos las ecuaciones de movimiento en la imagen de Heisenberg para los operadores de red.

Con el fin de discutir cristales no homogéneos de dos dimensiones adoptamos un procedimiento similar al que seguimos para estudiar cristales unidimensionales. De lo aprendido sobre el álgebra de Cartan de grupos semisimples de rango dos, la generalización a redes en dos dimensiones es directa. Sea un cristal bidimensional no homogéneo con número de coordinación c , el Hamiltoniano correspondiente es:

$$H = \sum_{j=1}^{c/2} A_{\alpha^{(j)}} + \text{h. c.} + V(N_1, N_2) \quad (5.5)$$

donde $A_{\alpha^{(j)}}^\dagger = A_{-\alpha^{(j)}}$. Como antes, consideremos un álgebra de Cartan de dimensión n , por lo tanto, para los operadores N_i , con $i = 1, 2$, tenemos las siguientes ecuaciones de movimiento en la imagen de Heisenberg

$$\begin{aligned} i\dot{N}_i &= [N_i, H] = \sum_{j=1}^{c/2} [N_i, A_{\alpha^{(j)}}] - \text{h. c.} + [N_i, V(N_1, N_2)] \\ &= \sum_{j=1}^{c/2} \alpha_i^{(j)} A_{\alpha^{(j)}} - \text{h. c.}, \end{aligned} \quad (5.6)$$

éstos ahora se interpretan como operadores de posición discreta. Estas ecuaciones de movimiento se obtienen suponiendo que las componentes de los vectores raíz son reales, usando (5.2) y recordando que los N_i conmutan con cualquier función de ellos mismos, como es el caso del potencial.

Para los operadores de subida $A_{\alpha^{(i)}}$ las ecuaciones de movimiento son un poco más elaboradas pero su obtención se simplifica explotando lo que sabemos acerca de la forma estándar de las álgebras semisimples, tenemos

$$\begin{aligned} i\dot{A}_{\alpha^{(i)}} &= [A_{\alpha^{(i)}}, H] \\ &= \sum_{j=1}^{c/2} ([A_{\alpha^{(i)}}, A_{\alpha^{(j)}}] + [A_{\alpha^{(i)}}, A_{-\alpha^{(j)}}]) + [A_{\alpha^{(i)}}, V(N_1, N_2)] \\ &= \sum_{j=1}^{c/2} (C_{\alpha^{(i)}\alpha^{(j)}} A_{\alpha^{(i)}+\alpha^{(j)}} + C_{\alpha^{(i)},-\alpha^{(j)}} A_{\alpha^{(i)}-\alpha^{(j)}}) \\ &\quad + [\alpha^{(i)}]^k N_k + [A_{\alpha^{(i)}}, V(N_1, N_2)] \end{aligned} \quad (5.7)$$

donde, como usualmente se hace, el símbolo de suma se prima para indicar que el término $j = i$ se excluye de la suma pues las contribuciones correspondientes a dichos índices ya han sido tomadas en cuenta, e. g., es claro que uno de tales conmutadores da cero mientras que el otro produce la combinación lineal de operadores de peso que se anota en la Ec. (5.7), i. e. se ha hecho uso de (5.3) para calcular $[A_{\alpha^{(i)}}, A_{\alpha^{(i)}}^\dagger]$. En general, los valores de $C_{\alpha^{(i)}\alpha^{(j)}}$, $[\alpha^{(i)}]^k$ y $\alpha_k^{(i)}$ son distintos para cada grupo de rango 2 y hacemos énfasis de nueva cuenta que, en particular, los coeficientes $C_{\alpha^{(i)}\alpha^{(j)}}$ son distintos de cero siempre que $A_{\alpha^{(i)}+\alpha^{(j)}}$ sea nuevamente un operador de escalera. Las ecuaciones de movimiento para $A_{\alpha^{(j)}}^\dagger$ se obtienen notando la validez de la relación $i\dot{A}_{\alpha^{(j)}}^\dagger = -(i\dot{A}_{\alpha^{(j)}})^\dagger$, la cual ha sido utilizada a lo largo de este trabajo.

Para simplificar la notación, definamos $A_i := A_{\alpha^{(i)}}$, $A_i^\dagger := A_{-\alpha^{(i)}}$. Suponiendo que la factorización $A_i = \Delta(N_1, N_2)T_i$ es válida, podemos encontrar la forma de los acoplamientos si conocemos el grupo dinámico del cristal bidimensional no homogéneo. Los operadores T_i son operadores de traslación discreta y dependen de la topología del cristal. De especial interés son las redes finitas inhomogéneas cuadradas y triangulares, con grupos de simetría $SO(4)$ y $SU(3)$, respectivamente. A continuación discutimos estos ejemplos desde un enfoque de vectores primitivos.

Si el cristal es una red cuadrada inhomogénea podemos tomar como vectores primitivos $\mathbf{a}_1 = \mathbf{i}$ y $\mathbf{a}_2 = \mathbf{j}$, lo cual produce dos operadores de traslación $T_i = e^{-i\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{p}}$. Mediante la definición $A_i = \Delta_i(N, M)T_i$, $i = 1, 2$, tenemos que el conmutador

$$[A_1, A_1^\dagger] = \Delta_1^2(N, M) - \Delta_1^2(N + 1, M) \quad (5.8)$$

genera una relación de recurrencia en n mientras que para el otro operador tenemos una ecuación similar pero en el índice m , a saber

$$[A_2, A_2^\dagger] = \Delta_2^2(N, M) - \Delta_2^2(N, M + 1). \quad (5.9)$$

La solución a estas relaciones de recurrencia, que nos da la forma de los acoplamientos, la daremos después de revisar un poco más de teoría de grupos semisimples de rango dos en las siguientes secciones, específicamente, después de revisar la teoría correspondiente al grupo $SO(4)$.

Introduciendo la base de estados localizados en dos dimensiones $\{|m, n\rangle\}$ podemos verificar que se cumplen las relaciones de conmutación del álgebra de Cartan, por ejemplo

$$\begin{aligned} [N, A_1] |n, m\rangle &= [N, \Delta(N, M)T_1] |n, m\rangle \\ &= (N\Delta(N, M)T_1 - \Delta(N, M)T_1N) |n, m\rangle \\ &= N\Delta(N, M) |n + 1, m\rangle - \Delta(N, M)T_1n |n, m\rangle \\ &= N\Delta_{n+1, m} |n + 1, m\rangle - n\Delta(N, M) |n + 1, m\rangle \\ &= (n + 1)\Delta_{n+1, m} |n + 1, m\rangle - n\Delta_{n+1, m} |n + 1, m\rangle \\ &= \Delta_{n+1, m} |n + 1, m\rangle = \Delta(N, M)T_1 |n, m\rangle = A_1 |n, m\rangle, \end{aligned} \quad (5.10)$$

o sea, $[N, A_1] = A_1$. De igual forma, se puede mostrar que $[M, A_1] = [N, A_2] = 0$ y que $[M, A_2] = A_2$ y por lo tanto, vemos que estas suposiciones conducen a algunos

coeficientes de las ecuaciones de movimiento de los operadores que describen a la red cuadrada inhomogénea, uno de los casos especiales de (5.6) y (5.7). De hecho, las propiedades que hemos encontrado nos recuerdan al problema de la cadena finita con simetría SU(2); haremos más comentarios al respecto cuando ya revisemos un poco más de teoría.

Ahora, el caso de la red triangular es más sutil, sabemos que es usual elegir tres vectores primitivos \mathbf{a}_i , $i = 1, 2, 3$, dos de ellos linealmente independientes. Elijamos los vectores de red $\mathbf{a}_1 = \mathbf{i}$, $\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}(-\mathbf{i} + \sqrt{3}\mathbf{j})$, $\mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$, con operadores de traslación correspondientes T_i , con $i = 1, 2, 3$. La inhomogeneidad puede ser implementada como antes, tomemos $A_i = \Delta_i(N, M)T_i$, donde podemos suponer que la forma de los acoplamientos es distinta en cada dirección. Cabe señalar que $[A_1, A_1^\dagger]$ produce la misma ecuación de recurrencia que hemos derivado para el mismo operador en la red cuadrada inhomogénea, esto porque el vector primitivo es el mismo. En cambio, las relaciones de conmutación entre A_2 , A_3 y sus hermitianos conjugados difieren de aquellas de la red cuadrada

$$[A_2, A_2^\dagger] = \Delta_2^2(N, M) - \Delta_2^2(N - 1/2, M + 1), \quad (5.11)$$

$$[A_3, A_3^\dagger] = \Delta_3^2(N, M) - \Delta_3^2(N + 1/2, M + 1), \quad (5.12)$$

y dependen de posiciones intermedias.

Otro aspecto de interés consiste en calcular los conmutadores entre los operadores de escalera y los de peso. Para A_1 nuevamente tenemos $[N, A_1] = A_1$. Como se hizo antes, se pueden calcular los conmutadores de los operadores de traslación en la red triangular no homogénea con los operadores de posición discreta. De forma compacta, los resultados son:

$$\begin{aligned} [N, A_1] &= A_1, & [N, A_2] &= -\frac{1}{2}A_2, & [N, A_3] &= \frac{1}{2}A_3 \\ [M, A_1] &= 0, & [M, A_2] &= A_2, & [M, A_3] &= A_3. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Los conmutadores con los A_i^\dagger se pueden obtener de la identidad $[N, A_i^\dagger] = -[N, A_i]^\dagger$. De nueva cuenta, estos cálculos hacen explícitos algunos de los valores de los coeficientes necesarios para escribir las ecuaciones de movimiento de los operadores asociados a la red triangular no homogénea, de vital importancia para poder arribar a las Ecs. de Mello-Moshinsky discretas y con esto hallar la representación espacial del operador de evolución temporal. Obtendremos más información sobre los coeficientes de la matriz que define la evolución lineal después de estudiar al grupo SU(3), lo cual nos hará considerar algunas condiciones de cerradura. Con esta motivación, a continuación se revisa la teoría de los grupos SO(4) y SU(3) y se describe la relación entre ellos y las redes finitas bidimensionales que fueron discutidas preliminarmente en esta sección.

5.3. Multipletes de SU(3) y redes triangulares

Los multipletes de SU(3) tienen una forma geométrica que nos permite identificarlos con redes triangulares. En lo que sigue conoceremos el por qué de esta

afirmación. Para lograrlo, comenzaremos por describir los multipletes de SU(3) para después establecer una relación con cristales con este tipo de estructura. Con respecto a las cuestiones algebraicas, aquí seguimos la discusión lúcida dada en [35].

Para introducir los multipletes de SU(3), basta recordar que, de hecho, ya nos hemos encontrado con los generadores de SU(3). Vea nuestra solución al problema del Hamiltoniano con coeficientes dependientes del tiempo, (3.100), ahí hemos presentado a las matrices de Gell-Mann. Las relaciones de conmutación entre éstas matrices son:

$$[\lambda_i, \lambda_j] = 2if_{ijk}\lambda_k \quad (5.14)$$

donde las constantes de estructura, f_{ijk} , son conocidas. Mediante la definición $F_i = \frac{1}{2}\lambda_i$, (5.14) toma la forma casi nada diferente

$$[F_i, F_j] = if_{ijk}F_k, \quad (5.15)$$

donde sólo nos hemos deshecho del 2. Más bien, esta redefinición de los generadores de SU(3) se hace con fines prácticos. Como ya es usual, ahora definimos las siguientes combinaciones lineales

$$\begin{aligned} T_{\pm} &:= F_1 \pm iF_2 \\ U_{\pm} &:= F_4 \pm iF_5 \\ V_{\pm} &:= F_6 \pm iF_7 \end{aligned} \quad (5.16)$$

como los operadores de escalera, esta elección está motivada por los orígenes de las matrices de Gell-Mann ya que éstas se obtienen como una extensión de las matrices de Pauli. Agregamos a estas definiciones una última, a saber

$$T_3 := F_3, \quad Y := \frac{2}{\sqrt{3}}F_8. \quad (5.17)$$

Comúnmente, en el ámbito de física de partículas, T_3 y Y son llamados operadores de isoespín e hipercarga, respectivamente. Como advertencia, no hay que confundir T_3 con un operador de traslación discreta, aunque hemos utilizado la misma letra, por ahora consideremos que estos temas no guardan relación. Se elige una base donde estos últimos operadores son diagonales, por lo tanto conmutan, o sea

$$[T_3, Y] = 0. \quad (5.18)$$

Es importante señalar que, en el marco de la teoría de grupos semisimples, (5.18) define a los operadores de peso de $\mathfrak{su}(3)$. En efecto, esta relación es un ejemplo específico de (5.1). El conjunto $\{T_{\pm}, U_{\pm}, V_{\pm}, T_3, Y\}$ es la llamada base de Cartan del álgebra $\mathfrak{su}(3)$ y (5.18) es su subálgebra abeliana máxima, cuyo número de elementos mutuamente conmutantes da el rango de SU(3) igual a 2.

En seguida, los pesos de cada uno de los operadores de escalera (compare con (5.2)) están dados por

$$[T_3, T_{\pm}] = \pm T_{\pm}, \quad [T_3, U_{\pm}] = \mp \frac{1}{2}U_{\pm}, \quad [T_3, V_{\pm}] = \pm \frac{1}{2}V_{\pm}, \quad (5.19)$$

para T_3 , mientras que para Y tenemos

$$[Y, T_{\pm}] = 0, \quad [Y, U_{\pm}] = \pm U_{\pm}, \quad [Y, V_{\pm}] = \pm V_{\pm}. \quad (5.20)$$

Los conmutadores entre operadores de escalera opuestos son una combinación lineal de los operadores de peso, i. e.

$$\begin{aligned} [T_+, T_-] &= 2T_3, \\ [U_+, U_-] &= \frac{3}{2}Y - T_3 \equiv 2U_3, \\ [V_+, V_-] &= \frac{3}{2}Y + T_3 \equiv 2V_3, \end{aligned} \quad (5.21)$$

verificando así un resultado más sobre la estructura estándar de las álgebras semisimples, a saber (5.3). Note que hemos definido U_3 y V_3 para homogeneizar la notación; ellos también conmutan con Y , como se puede ver, así que sería equivalente elegirlos como operadores de peso. Finalmente, los conmutadores restantes entre operadores de escalera de distinto tipo son

$$\begin{aligned} [T_+, U_+] &= V_+, & [T_+, U_-] &= 0, \\ [U_+, V_+] &= 0, & [U_+, V_-] &= T_-, \\ [T_+, V_+] &= 0, & [T_+, V_-] &= -U_-. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Debido a que (5.22) mezcla a T con U y V , se dice que los multipletes T , U y V están acoplados.

La Ec. (5.18) significa que disponemos de dos etiquetas T'_3 y Y' tales que tenemos las ecuaciones de valores propios

$$\begin{aligned} T_3 |T'_3, Y'\rangle &= T'_3 |T'_3, Y'\rangle, \\ Y |T'_3, Y'\rangle &= Y' |T'_3, Y'\rangle. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Las parejas de números cuánticos (T'_3, Y') se pueden representar gráficamente en un plano. Para saber cómo representarlos, hagamos uso de las relaciones de conmutación entre los operadores de escalera y los de peso. De (5.19) tenemos

$$T_3 T_{\pm} |T'_3, Y'\rangle = (T'_3 \pm 1) T_{\pm} |T'_3, Y'\rangle \quad (5.24)$$

lo cual quiere decir que $T_{\pm} |T'_3, Y'\rangle \propto |T'_3 \pm 1, Y'\rangle$, es decir, T_{\pm} incrementa y decreta en uno el valor de T'_3 . Análogamente, se puede mostrar que U_{\pm} disminuye y aumenta el valor de T'_3 en $\frac{1}{2}$, y que V_{\pm} sube y baja en uno a T'_3 . Resultados similares se obtienen para Y , e. g. tenemos, de (5.20), que T_{\pm} no cambia el valor de Y , mientras que U_{\pm} y V_{\pm} sí lo hacen en uno. Considerando el plano $T_3 - Y$, podemos representar en él la acción de los operadores de escalera y darnos cuenta de que éstos actúan a lo largo de tres líneas, dando un total de seis sentidos de traslación.

Mediante argumentos de simetría se puede mostrar que los multipletes de SU(3) son hexágonos regulares, o triángulos, cuando tres de sus lados tienen longitud cero. Con el fin de ilustrar lo anterior, notemos que las subálgebras (5.21) de $\mathfrak{su}(3)$, T ,

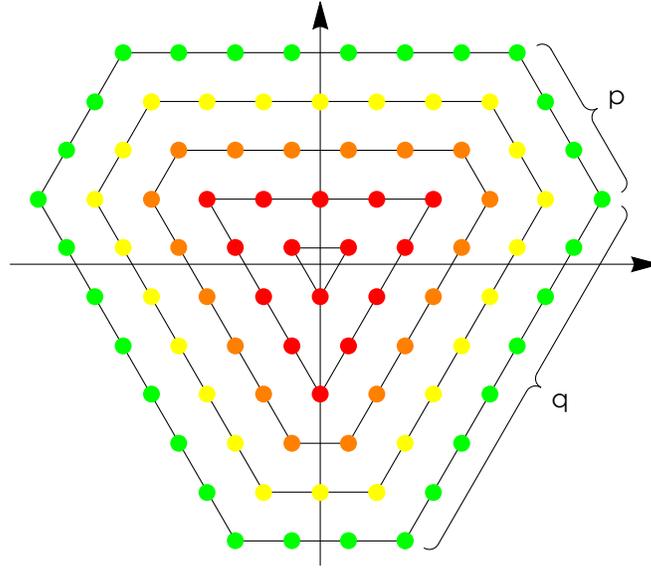


Figura 5.1: Multiplete genérico de $SU(3)$. En general, un multiplete de $SU(3)$ es un hexágono regular con tres lados de tamaño p y otros tres de tamaño q . La figura intenta ilustrar el hecho de que la multiplicidad de los estados aumenta conforme avanzamos hacia adentro del multiplete hasta alcanzar el primer triángulo externo.

U y V , son isomorfas al álgebra de Cartan de $SU(2)$. De esta observación sabemos bien que el espectro de T_3 , U_3 y V_3 es finito. En consecuencia, considerando T_3 , los multipletes de $SU(3)$ han de ser simétricos respecto al eje $T_3 = 0$; esto mismo aplica para U_3 y V_3 . Los tres ejes resultantes se intersecan y hacen ángulos de 120° . De lo anterior concluimos que, en general, los multipletes de $SU(3)$ son hexágonos regulares o triángulos, figuras con tres ejes de simetría. Es muy importante señalar que la existencia de polígonos regulares de orden superior como multipletes de $SU(3)$ está condicionada a la disponibilidad de más direcciones de desplazamiento, sin embargo, aquí tenemos la restricción impuesta por (5.16) lo cual hace imposible un resultado de esas características.

Otra observación importante es que hacen falta sólo dos números, digamos p y q , para especificar un multiplete de $SU(3)$. Como se puede demostrar, p y q son, respectivamente, el número de pasos que hay que dar para llegar a una de las esquinas cercanas del borde del múltipete, empezando en el estado con número cuántico T_3 máximo y el número de pasos que hay que dar, en una dirección distinta, para recorrer el siguiente lado del hexágono de tamaño igual o distinto. De forma más simple, los múltipletes de $su(3)$ son hexágonos con tres lados de tamaño p y otros tres de tamaño q . Cuando alguno de ellos es nulo, los hexágonos se degeneran en triángulos, como se puede intuir. En la Fig. 5.1 se puede observar un multiplete genérico de $SU(3)$. Las representaciones de los multipletes de $SU(3)$ se denotan por $D(p, q)$ y se han graficado algunos en la Fig. 5.2. Habiendo completado esto, ahora procedemos a establecer la relación entre multipletes de $SU(3)$ y redes triangulares.

Los resultados que hemos expuesto hasta ahora nos llevan a proponer, en base a

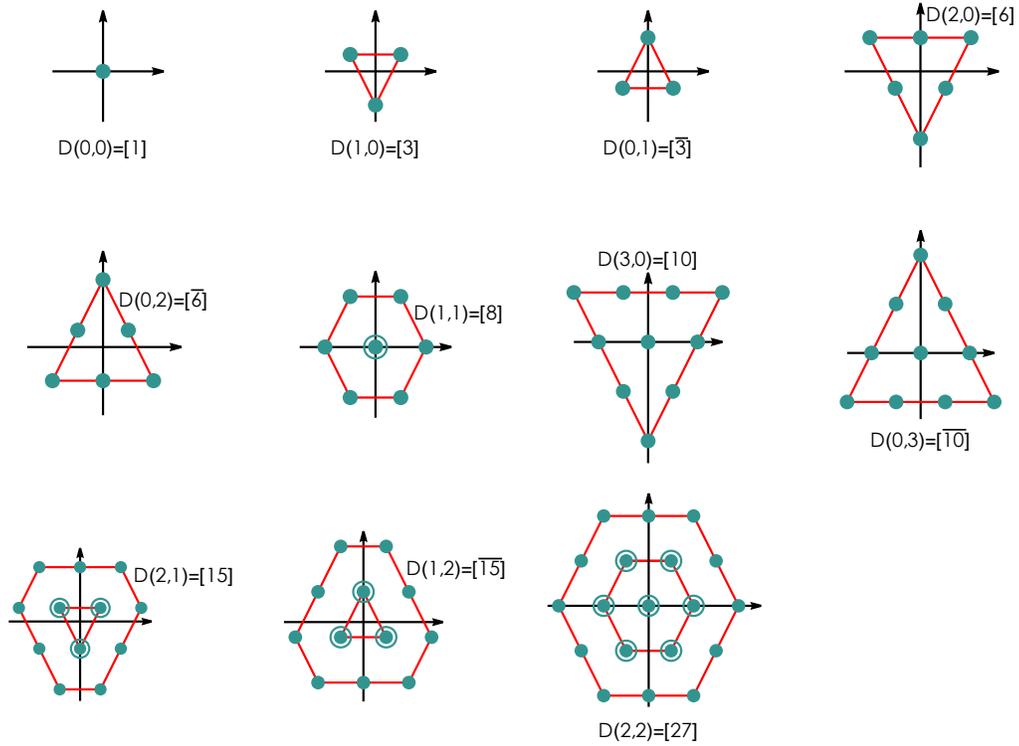


Figura 5.2: Multipletes de $SU(3)$. Los multipletes de $SU(3)$ representan porciones de una red triangular inhomogénea. En la imagen se pueden observar algunas de las representaciones más pequeñas. Los círculos que aparecen en algunas representaciones son para indicar la multiplicidad de los estados.

las similitudes entre (5.19), (5.20) y (5.13), por ejemplo, que las siguientes identificaciones son posibles:

$$\begin{aligned} A_1 &\rightarrow T_+, & A_2 &\rightarrow U_+, & A_3 &\rightarrow V_+, \\ N &\rightarrow T_3, & M &\rightarrow Y, \end{aligned} \tag{5.25}$$

esto significa que el cristal triangular inhomogéneo resultante tendrá simetría $SU(3)$. Aunque es bien sabido que el estudio de los multipletes de $SU(3)$ se ha dado en el ámbito de partículas elementales con la bien conocida teoría de quarks, nuestro trabajo muestra que los multipletes de dicho grupo pueden describir nuestro sistema cristalino.

5.4. Multipletes de $\mathfrak{so}(4) = \mathfrak{so}(3) \oplus \mathfrak{so}(3)$

A continuación veremos cómo los multipletes del grupo $SO(4)$ se relacionan con las redes cuadradas inhomogéneas, esto es muy importante ya que con esto cubriremos otra de las redes bidimensionales de interés. Describiremos al álgebra de Cartan

$\mathfrak{so}(4)$, veremos que es igual a la suma directa de dos álgebras $\mathfrak{so}(3) \cong \mathfrak{su}(2)$ y estableceremos una conexión de ésta con las redes cuadradas no homogéneas. Esto sentará las bases para el análisis de la propagación de paquetes de ondas en cristales con este grupo dinámico.

El grupo $\mathrm{SO}(4)$ es un grupo semisimple de rango dos, su álgebra, $\mathfrak{so}(4)$, tiene por base a los seis generadores del grupo denotados por L_i y M_i , con $i = 1, 2, 3$, que satisfacen las relaciones de conmutación

$$[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}L_k \quad (5.26)$$

$$[M_i, M_j] = i\epsilon_{ijk}L_k \quad (5.27)$$

$$[M_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}M_k \quad (5.28)$$

Los generadores L_i y M_i forman un álgebra cerrada, como se puede ver de las relaciones de conmutación. Esta álgebra surge naturalmente al considerar el problema de Kepler cuántico y limitarnos a estados ligados tal y como lo hizo Pauli en sus estudios sobre el átomo de hidrógeno.

Definiendo las siguientes combinaciones lineales

$$\mathbf{I} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{M}), \quad \mathbf{K} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{M}), \quad (5.29)$$

se puede mostrar que las componentes de \mathbf{I} y \mathbf{K} obedecen las relaciones

$$[I_i, I_j] = i\epsilon_{ijk}I_k, \quad [K_i, K_j] = i\epsilon_{ijk}K_k, \quad [I_i, K_j] = 0. \quad (5.30)$$

De (5.30) podemos notar que el álgebra $\mathfrak{so}(4)$ se desacopla en dos álgebras $\mathfrak{so}(3)$ idénticas, I y K , verificando de esta manera que $\mathfrak{so}(4) = \mathfrak{so}(3) \oplus \mathfrak{so}(3)$. Así que trabajaremos con \mathbf{I} y \mathbf{K} debido a su estructura simple. Además, puesto que hemos dado la información necesaria sobre $\mathfrak{so}(3)$, vea la sección 3.4.1, sabemos que cada álgebra $\mathfrak{so}(3)$ se puede llevar a la forma (3.141). En total, tenemos dos operadores de Casimir de la forma (3.145) que denotaremos por \mathbf{I}^2 y \mathbf{K}^2 . Los números cuánticos que definen estos operadores los llamaremos i y k y satisfacen

$$\mathbf{I}^2 |i, m\rangle = i(i+1) |i, m\rangle, \quad I_3 |i, m\rangle = m |i, m\rangle, \quad (5.31)$$

$$\mathbf{K}^2 |k, n\rangle = k(k+1) |k, n\rangle, \quad K_3 |k, n\rangle = n |k, n\rangle. \quad (5.32)$$

Como es bien sabido los valores de i y k determinan los de m y n , respectivamente, como

$$m = -i, -i+1, \dots, i-1, i, \quad n = -k, -k+1, \dots, k-1, k, \quad (5.33)$$

donde $i, k = N/2$ y $N \in \mathbb{N}_0$.

Con esto estamos listos para representar gráficamente a los multipletes de $\mathrm{SO}(4)$. Las duplas (m, n) se puede representar en un plano y denotaremos por $D(i, k)$ a dichas representaciones. En la Fig. 5.3 se observan los multipletes de $\mathrm{SO}(4)$ para distintos valores (enteros) de i y k de las representaciones más pequeñas.

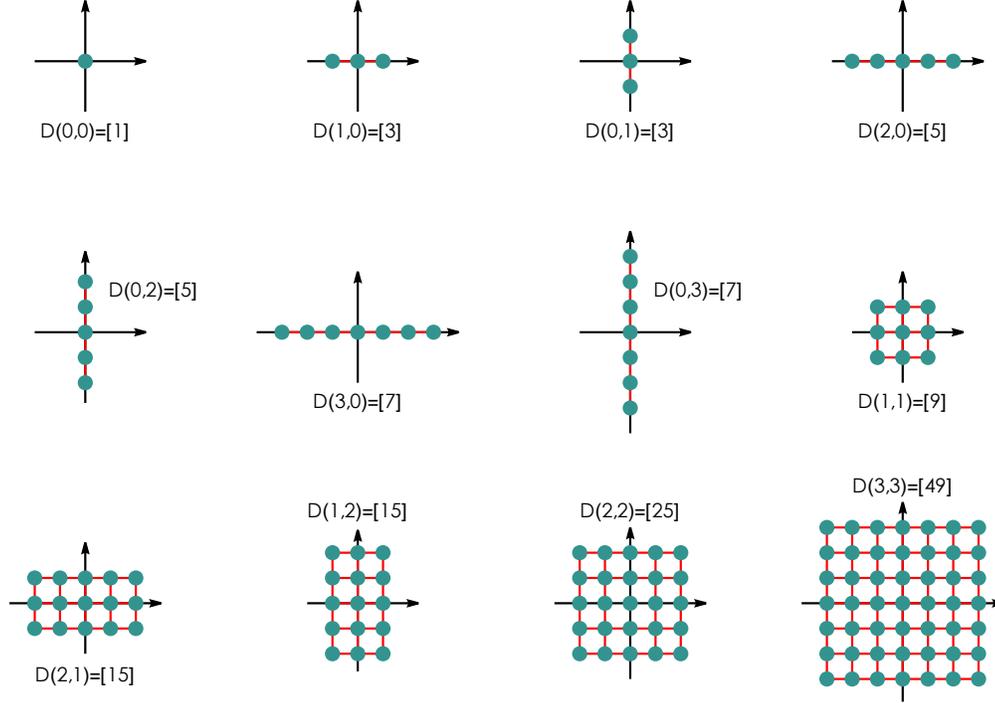


Figura 5.3: Multipletes de $SO(4)$. Varios de los multipletes de las representaciones enteras más pequeñas se muestran aquí. Su asociación con las redes cuadradas inhomogéneas es imposible de evitar. Los acoplamientos entre sitios varían como la raíz cuadrada de un polinomio cuadrático de la posición, (5.35), a lo largo de las dos direcciones perpendiculares definidas por los ejes que se muestran.

Por otro lado, el Hamiltoniano de la red cuadrada inhomogénea que describimos en la sección 5.2 nos lleva a elegir

$$\begin{aligned} N &\rightarrow I_3, & A_1 &\rightarrow I_+, & A_1^\dagger &\rightarrow I_-, \\ M &\rightarrow K_3, & A_2 &\rightarrow K_+, & A_2^\dagger &\rightarrow K_-. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Si (5.34) ha de cumplirse, entonces podemos resolver (5.8), (5.9), resultando

$$\Delta_1(N, M) = \Delta_1(N) = \sqrt{c_o + N - N^2}, \quad \Delta_2(N, M) = \Delta_1(M), \quad (5.35)$$

los cuales son justamente acoplamientos del tipo (3.69), un resultado esperado teniendo en cuenta que $so(4)$ se desacopla en dos álgebras $su(2)$, esto apunta a una solución separable para el propagador como veremos en la siguiente sección.

5.5. Recurrencias generales del propagador

Para concluir este trabajo, a continuación se presentan las Ecs. de Mello-Moshinsky discretas del cristal $SO(4)$ obtenidas al resolver un caso particular de las ecuaciones

de movimiento (5.6) y (5.7). Las recurrencias resultantes admiten un solución separable, esto permite conocer las propiedades de propagación de paquetes de ondas en cristales bidimensionales inhomogéneos con estructuras reticulares de tipo cuadrado. El problema del cristal SU(3) se aborda de manera breve con miras hacia un trabajo futuro. La relevancia de estos resultados se hace cada vez más patente con el avance del campo de los materiales y, en general, de los cristales artificiales bidimensionales.

Con lo que hemos revisado, sabemos que el Hamiltoniano de la red cuadrada inhomogénea es:

$$H = I_+ + K_+ + \text{h. c.} + V(N, M) \quad (5.36)$$

lo cual significa que el Hamiltoniano se puede separar en dos partes $H = H_1 + H_2$, tal que

$$[H_1, H_2] = 0. \quad (5.37)$$

Esto será claro al determinar la forma del campo externo, escribimos

$$\begin{aligned} [I_+, V(N, M)] |n, m\rangle &= (A_1 V - V A_1) |n, m\rangle \\ &= (\Delta_1(N) T_1 V - V \Delta_1(N) T_1) |n, m\rangle \\ &= T_1 (V(N, M) - V(N+1, M)) \Delta_1(N+1) |n, m\rangle \\ &= (V(N-1, M) - V(N, M)) I_+ |n, m\rangle \end{aligned} \quad (5.38)$$

lo cual implica, al imponer linealidad, que $V(N-1, M) - V(N, M) = \beta_1$, pero también se puede mostrar, con ayuda de K_+ , que $V(N, M-1) - V(N, M) = \beta_2$, ambas relaciones se cumplen para un campo del tipo

$$V(N, M) = -\beta_1 N - \beta_2 M + V_0, \quad (5.39)$$

de donde se sigue (5.37). Finalmente, las ecuaciones de movimiento se reducen al siguiente sistema

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N \\ A_1 \\ A_1^\dagger \\ M \\ A_2 \\ A_2^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_1 & \beta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\alpha_1 & 0 & -\beta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_2 & \beta_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha_2 & 0 & -\beta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ A_1 \\ A_1^\dagger \\ M \\ A_2 \\ A_2^\dagger \end{pmatrix} \quad (5.40)$$

el cual consiste de ecuaciones similares a las que obtuvimos para SU(2), en este caso, tenemos un conjunto igual al definido por (3.64) para cada dirección de movimiento. Entonces, la solución de las ecuaciones de movimiento produce las siguientes Ecs. de Sadurní-Mello-Moshinsky para SO(4):

$$\boxed{U_{m', n'; m, n} \left[\frac{n' \omega_1^2 - n(\omega_1^2 - 2\xi_1)}{|\Gamma_1|} \right] = \Delta_{n+1} e^{-i \arg \Gamma_1} U_{m', n'; m, n+1} + \Delta_n e^{i \arg \Gamma_1} U_{m', n'; m, n-1}} \quad (5.41)$$

5.5. Recurrencias generales del propagador

$$\boxed{\omega_1^2 \Delta_{n'} U_{m',n'-1;m,n} = n\alpha \Gamma_1^* U_{m',n';m,n} + \Delta_{n+1} \Lambda_1^* U_{m',n';m,n+1} + \Delta_n \Xi_1 U_{m',n';m,n-1}} \quad (5.42)$$

$$\boxed{\omega_1^2 \Delta_{n'+1} U_{m',n'+1;m,n} = n\alpha \Gamma_1 U_{m',n';m,n} + \Delta_{n+1} \Xi_1 U_{m',n';m,n+1} + \Delta_n \Lambda_1 U_{m',n';m,n-1},} \quad (5.43)$$

correspondientes al primer bloque diagonal; un segundo conjunto de ecuaciones de recurrencia, ahora en el índice m , es

$$\boxed{U_{m',n';m,n} \left[\frac{m'\omega_2^2 - m(\omega_2^2 - 2\Xi_2)}{|\Gamma_2|} \right] = \Delta_{m+1} e^{-i \arg \Gamma_2} U_{m',n';m+1,n} + \Delta_m e^{i \arg \Gamma_2} U_{m',n';m-1,n}} \quad (5.44)$$

$$\boxed{\omega_2^2 \Delta_{m'} U_{m'-1,n';m,n} = m\alpha \Gamma_2^* U_{m',n';m,n} + \Delta_{m+1} \Lambda_2^* U_{m',n';m+1,n} + \Delta_m \Xi_2 U_{m',n';m-1,n}} \quad (5.45)$$

$$\boxed{\omega_2^2 \Delta_{m'+1} U_{m'+1,n';m,n} = m\alpha \Gamma_2 U_{m',n';m,n} + \Delta_{m+1} \Xi_2 U_{m',n';m+1,n} + \Delta_m \Lambda_2 U_{m',n';m-1,n};} \quad (5.46)$$

donde hemos escrito simplemente $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$ con la variable de posición correspondiente y $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, sin pérdida de generalidad. Note que

$$\begin{aligned} \Gamma_j &= \Gamma(\alpha, \beta_j, t) \equiv \beta_j (\cos \theta_j - 1) + i\omega_j \sin \theta_j \\ \Lambda_j &= \Lambda(\alpha, \beta_j, t) \equiv (\alpha + \beta_j^2) \cos \theta_j + \alpha + i\omega_j \beta_j \sin \theta_j \\ \Xi_j &= \Xi(\alpha, \beta_j, t) \equiv \alpha (1 - \cos \theta_j) \end{aligned} \quad (5.47)$$

con $\theta_j = \omega_j t / \hbar$, $\omega_j = \sqrt{2\alpha + \beta_j^2}$, $j = 1, 2$. La solución de las Ecs. SMM para SO(4) es inmediata

$$\boxed{U_{m',n';m,n} = D_{mm'}^k D_{nn'}^i,} \quad (5.48)$$

i. e. un producto de funciones D de Wigner, una por cada dirección de propagación. El propagador resultante apunta a fenómenos de transporte y reconstrucción de un paquete de ondas localizado en un cristal inhomogéneo bidimensional SO(4), oscilaciones de Bloch 2D y más (vea la Fig. 5.4).

Sin embargo, para SU(3) las Ecs. SMM no son triviales, por ejemplo, para obtener la forma de los acoplamientos en cada dirección necesitamos los elementos matriciales de los generadores de SU(3). El de la subálgebra T es fácil de obtener, para el Hamiltoniano

$$H = T_+ + U_+ + V_+ + \text{h. c.} + V(N, M) \quad (5.49)$$

tenemos que $A_1 = \Delta_1(N, M)T_1 = T_+$ implica $\Delta_1^2(N, M) = \Delta_1^2(N) = c_0 + N - N^2$, el acoplamiento característico de SU(2), esto es así ya que para SU(3) $[A_1, A_1^\dagger] = 2N$, vea (5.21). Para las otras direcciones de movimiento habría que resolver

$$\Delta_2^2(N, M) - \Delta_2^2(N - 1/2, M + 1) = \frac{3}{2}M - N \quad (5.50)$$

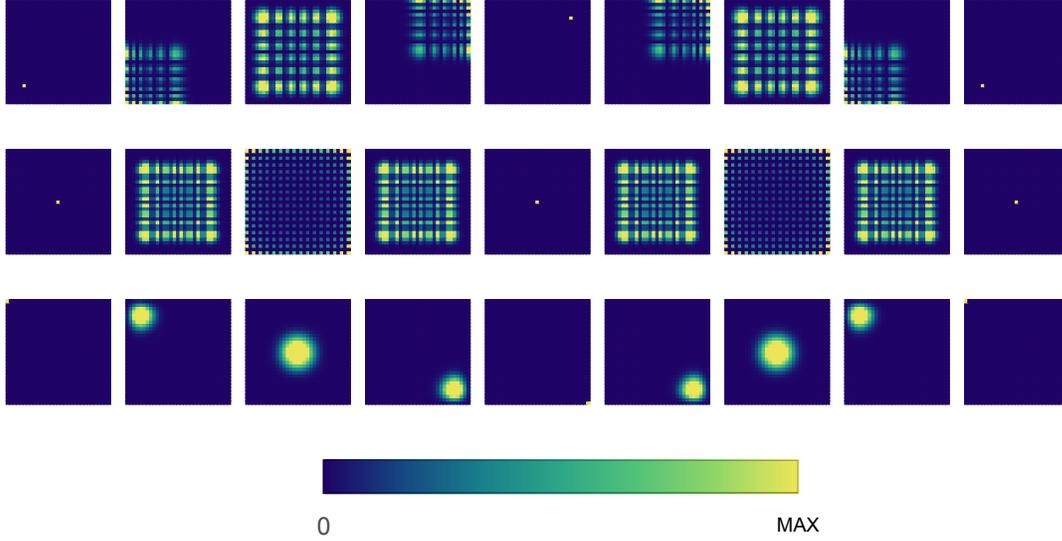


Figura 5.4: Propagación de pulsos en un cristal inhomogéneo $SO(4)$. Las propiedades de propagación recuerdan a aquellas de $SU(2)$ debido a la descomposición $\mathfrak{so}(4) = \mathfrak{so}(3) \oplus \mathfrak{so}(3)$ y al isomorfismo entre los grupos de rotación y de espín. El multiplete corresponde a $D(15,15)$.

que resultan de (5.11) y (5.21), y también

$$\Delta_3^2(N, M) - \Delta_3^2(N + 1/2, M + 1) = \frac{3}{2}M + N \quad (5.51)$$

de (5.12), junto con las restricciones impuestas por (5.22).

Una idea del resultado que esperamos obtener proviene del estudio precursor sobre las representaciones de transformaciones finitas de $U(3)$ que llevaron a cabo pioneramente Chacón y Moshinsky [48]. Entre los trabajos que han dado expresiones de las representaciones de $SU(3)$ destacan [49], explotando el hecho de que cada multiplete de $SU(3)$ continene un isosingleton lo cual ayuda a simplificar los calculos, y [50], factorizando una transformación $SU(3)$ en tres partes, dos de las cuales son transformaciones $SU(2)$. La solución completa de este problema será analizada en un trabajo futuro.

Capítulo 6

Conclusiones

6.1. Resultados obtenidos, sumario

Se ha discutido un modelo de un cristal fotónico unidimensional hecho de cortinas dieléctricas acopladas de forma evanescente y se ha mostrado que es posible emular un pozo finito de potencial de mecánica cuántica. Además, se han dado estimaciones de los acoplamientos a primeros vecinos, de las energías en sitio así como de las profundidades de piel. Esto hizo posible formular una receta general que nos dice dónde ubicar cada cortina y qué ancho deben tener para implementar físicamente una ley de acoplamientos y potenciales en sitio arbitrarios; gran parte de esto se reportó por primera vez en [1]. Se revisó la viabilidad experimental de parámetros dependientes del tiempo. Encontramos que es posible construir cristales fotónicos con propiedades variables en el tiempo mediante distintos mecanismos, esto hace factible implementar un modelo dependiente del tiempo que se puede evaluar, en principio, a cualquier orden en la expansión perturbativa dada por la serie de Dyson, para un campo externo arbitrario dependiente del tiempo.

Para estudiar la dinámica del sistema, se escribieron ecuaciones de movimiento para los operadores de red en la imagen de Heisenberg y se resolvieron en consecuencia. De gran relevancia es la solución del problema dependiente del tiempo donde se probó la equivalencia entre un Hamiltoniano con coeficientes variables en el tiempo y uno que solo tiene en cuenta un campo externo dependiente del tiempo con la ayuda de una transformación de norma. La solución correspondiente se dio a través de la base Gell-Mann. Con respecto al caso independiente del tiempo, se mostró que la solución de las ecuaciones de movimiento consiste en la exponencial de la matriz de coeficientes que definen la evolución lineal. Sobre una base algebraica, se obtuvo la forma de los acoplamientos para cada cadena.

El Hamiltoniano independiente del tiempo se estudió a fondo y, a partir de la solución de las ecuaciones de movimiento, se escribieron las correspondientes ecuaciones de Mello-Moshinsky discretas. Finalmente, se demostró que la solución a estas relaciones de recurrencias es la función D de Wigner. De hecho, dimos expresiones en forma cerrada para los propagadores cristalinos de cadenas no homogéneas unidimensionales que tienen como grupos dinámicos a $SU(2)$, $SU(1,1)$ y Heisenberg. En la Tabla 6.1 se muestra un resumen de dichos núcleos. Se discutieron las propiedades

Tabla 6.1: Propagadores cristalinicos unidimensionales. Una colección de propagadores para cadenas homogéneas [2], [25] y no homogéneas (este trabajo) con y sin campo externo. El formalismo general nos permite considerar el conmutador como $[A, A^\dagger] = \alpha N + \delta$, en la base de Cartan.

Conmutador	Grupo	Propagador cristalino	
$[A, A^\dagger] = N$	SU(2)	$K_{mn}(t) = \Theta(t) D_{nm}^j(\phi, \theta, \psi)$	4.3
$[A, A^\dagger] = -N$	SU(1,1)	$K_{mn}(t) = \Theta(t) D_{nm}^{-1/2+i\rho}(\phi, \theta, \psi)$	4.10
$[A, A^\dagger] = 1$	Heisenberg	$K_{mn}(t) = \Theta(t) e^{-\frac{\epsilon_0^2}{2\hbar^2} t^2} P_{mn}(t)$	4.32
$[A, A^\dagger] = 1$	Heisenberg	$K_{mn}(t) = \Theta(t) \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{it(uk- b ^2)}{\hbar}} G_{mk}^{-1}(b) G_{kn}(b)$	4.46
$[A, A^\dagger] = 0$	ISO(1,1)	$K_{mn}(t) = \Theta(t) i^{m-n} J_{m-n}(t)$	[2]
$[A, A^\dagger] = 0$	ISO(1,1)	$K_{mn}(t) = \Theta(t) i^{n-m} e^{i(m+n)\frac{\Delta}{2\hbar} t} J_{m-n}\left(\frac{\Delta \sin(\frac{\Delta}{2\hbar} t)}{\beta'}\right)$	[25]

de propagación, primero para la cadena SU(2) y luego para la de SU(1,1) y la de Heisenberg tanto los casos libres como con campo externo. Entre los hallazgos más relevantes se encuentran la notoria aceleración de los frentes de onda y las oscilaciones de Bloch para todas las cadenas: se encontró que la propagación de paquetes de ondas de ancho del tamaño de una celda se caracteriza principalmente por la aceleración de los frentes de onda, y que la magnitud de dicha aceleración depende directamente de la ley de acoplamientos. Por otro lado, tuvo lugar un fenómeno compartido cuando se activó un campo externo, a saber, las oscilaciones de Bloch. Este comportamiento oscilatorio respeta las restricciones de velocidad impuestas por la función de acoplamiento que es distinta para cada cadena, pasando de una parábola invertida para SU(2) a una que abre hacia arriba para SU(1,1), con las funciones lineal y constante como casos límite correspondientes a la cadena de Heisenberg e ISO(1,1), respectivamente. Por lo tanto, quedó claro que las distribuciones de probabilidad sin campo externo así como la forma de las oscilaciones de Bloch dependen del sitio desde donde se libera el pulso y generalmente son asimétricas.

Al considerar paquetes de ondas Gaussianos, para el cristal SU(2) solamente, se encontró que éstos son dispersados según el valor del cuasimomento dando una idea de la forma de la relación de dispersión de este cristal. Lo anterior explica por qué los pulsos evolucionan de la manera en que lo hacen si pensamos que se tratan de una superposición de componentes monocromáticas. Adicionalmente, se obtuvieron patrones de interferencia periódicos en el tiempo para la misma cadena cuando se permitió que varios pulsos se propagaran juntos con y sin campo externo, una consecuencia trivial de las propiedades del propagador; las distribuciones en variable espacial continua con este tipo de características han sido llamadas alfombras cuánticas, vemos así que fenómenos similares tienen lugar en cristales. Dichos patrones ilustran gráficamente varios conceptos ondulatorios. Con respecto a la cadena SU(1,1), se mostró que la solución a las ecuaciones SMM también describe a

este cristal. La función D de Wigner se tomó como el propagador de $SU(1,1)$ por continuación analítica, admitiendo espín complejo y eligiendo un valor negativo para alfa. En términos matemáticos, se estudió la serie continua de representaciones irreducibles de $SU(1,1)$. Finalmente, se calculó el propagador del cristal de Heisenberg y se discutió de la misma manera, encontrando características similares a las ya mencionadas. Un punto que debe enfatizarse es que la función D de Wigner también describe el comportamiento de las álgebras degeneradas de los grupos $ISO(1,1)$ y Heisenberg en ciertos límites, éstos se comentaron de forma breve al final del capítulo 4.

6.2. El futuro bidimensional, resultados esperados

Con respecto al mundo bidimensional, se mostró que es posible estudiar la propagación de paquetes de ondas en cristales con $SO(4)$ y $SU(3)$ como grupos dinámicos. Nuestro enfoque para atacar este problema se basa principalmente, como en el caso unidimensional, en la estructura estándar general de las álgebras semisimples de dimensión arbitraria y de rango dos en este caso particular. El formalismo de los propagadores cristalinos, a través de las ecuaciones de Mello-Moshinsky discretas, constituye el principal elemento para la determinación de los núcleos correspondientes. Esto hizo posible, por ejemplo, dar una descripción de cristales bidimensionales no homogéneos (cuadrado y triangular) haciendo uso de operadores de traslación y posición discreta. Pudimos escribir explícitamente las ecuaciones de Mello-Moshinsky discretas para el cristal $SO(4)$ e incluso su solución, ya que resultó ser separable, obteniendo un producto de dos funciones D de Wigner, bien conocidas del cristal $SU(2)$, como consecuencia de la descomposición de $so(4)$ en dos copias de $so(3)$, a su vez isomorfa a $su(2)$. Sin embargo, queda por obtener el propagador para la red $SU(3)$. En este sentido, no esperamos una solución simple como lo es la función D , más bien pensamos que tiene que ver con las representaciones de rotaciones de $SU(3)$ en altos valores de isospín e hipercarga; la aparente dificultad de este problema se debe a la estructura acoplada del álgebra, como se explica en este texto.

Sobre las propiedades de propagación, hemos visto superficialmente que el grupo $SO(4)$ tiene un comportamiento parecido al del cristal $SU(2)$ en el sentido de que ambos cristales permiten el transporte y la reconstrucción de paquetes de ondas. De hecho, es claro que, como en el caso de los tapices ondulatorios, patrones de interferencia intrincados surgirán en el espacio-tiempo tridimensional y que un campo externo dará lugar a oscilaciones de Bloch bidimensionales. Queda por ver si las oscilaciones de Bloch también aparecen en la red $SU(3)$ y esto es algo que aún está por ser calculado. También parece posible evaluar la propagación de Gaussianas monocromáticas, al menos en la red $SO(4)$; se espera un comportamiento similar al de la cadena $SU(2)$.

En resumen, una discusión completa de la propagación de paquetes de ondas en cristales unidimensionales se ha dado y una plataforma para la evaluación experimental de los diversos modelos se ha provisto en la forma específica de un cristal fotónico, un sistema de gran relevancia tecnológica. Todo esto ha sido posible gracias

al método de Sadurní-Mello-Moshinsky el cual ha permitido estudiar cristales finitos e infinitos, homogéneos [2], [25] e inhomogéneos. La aplicación de este formalismo a cristales no homogéneos bidimensionales se fundamentó e incluso se obtuvo el propagador del cristal $SO(4)$. Los avances en el campo de los cristales artificiales nos hacen optimistas acerca de la realización experimental de nuestros modelos en un futuro próximo así como de su aprovechamiento para aplicaciones tecnológicas.

Apéndice A

Serie de Dyson como solución al problema dependiente del tiempo

Se empieza por definir el problema. Se busca la solución al sistema de ecuaciones diferenciales (3.102):

$$i\hbar \left(\frac{d}{dt} - \frac{\mathbf{M}(t)}{i\hbar} \right) \begin{pmatrix} N \\ A \\ A^\dagger \end{pmatrix} = 0, \quad (\text{A.1})$$

la siguiente condición inicial ha de cumplirse

$$\mathbf{v}(t) \Big|_{t=t_0} \equiv \begin{pmatrix} N(t) \\ A(t) \\ A^\dagger(t) \end{pmatrix} \Big|_{t=t_0} = \begin{pmatrix} N_0 \\ A_0 \\ A_0^\dagger \end{pmatrix} \equiv \mathbf{v}_0 \quad (\text{A.2})$$

integrar (A.1) directamente nos conduce a la reformulación del problema, ahora tenemos

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \mathbf{M}(t_1) \mathbf{v}(t_1), \quad (\text{A.3})$$

ésta es simplemente la versión integral de (A.1), sin embargo, nos permite obtener la respuesta, para esto, note que podemos iterar, i. e.

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(t) &= \mathbf{v}_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \mathbf{M}(t_1) \left[\mathbf{v}_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathbf{M}(t_2) \mathbf{v}(t_2) \right] \\ &= \mathbf{v}_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \mathbf{M}(t_1) \mathbf{v}_0 + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathbf{M}(t_1) \mathbf{M}(t_2) \mathbf{v}_0 \\ &+ \dots + \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathbf{M}(t_1) \dots \mathbf{M}(t_n) \mathbf{v}_0 + \dots, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

la última línea nos da la oportunidad de definir la exponencial ordenada en el tiempo, a saber

$$\begin{aligned}
\exp \left\{ : \int_{t_0}^t \mathbf{M}(t_1) dt_1 : \right\} &\equiv 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \mathbf{M}(t_1) \\
&+ \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathbf{M}(t_1) \mathbf{M}(t_2) + \dots \\
&+ \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathbf{M}(t_1) \cdots \mathbf{M}(t_n) + \dots \\
&\equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n} \mathbf{C}_n(t)
\end{aligned} \tag{A.5}$$

con $\mathbf{C}_0(t) \equiv 1$, entonces la solución de (A.1) es

$$\boxed{\begin{pmatrix} N(t) \\ A(t) \\ A^\dagger(t) \end{pmatrix} = \exp \left\{ : \int_{t_0}^t \mathbf{M}(t_1) dt_1 : \right\} \begin{pmatrix} N_0 \\ A_0 \\ A_0^\dagger \end{pmatrix},} \tag{A.6}$$

como se quería probar.

Ahora, se discute una propiedad importante de \mathbf{C}_n . Para esto, se adopta la siguiente notación:

$$\mathbf{C}_n(t_0) = \int_{t_i}^{t_0} dt_1 \int_{t_i}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_i}^{t_{n-1}} dt_n \mathbf{M}(t_1) \cdots \mathbf{M}(t_n), \quad n \geq 1. \tag{A.7}$$

donde solamente se han renombrado los límites de integración, t_0 ha sido llamado t_i y t ha sido tomado como t_0 para poder indizar bien el tiempo. Hacemos esto porque en esta forma el siguiente comportamiento es obvio

$$\mathbf{C}_0(t_n) = 1, \quad \forall n \in \mathbb{N}_0, \tag{A.8}$$

mientras que para \mathbf{C}_1 tenemos

$$\mathbf{C}_1(t_n) = \int_{t_i}^{t_n} dt_{n+1} \mathbf{M}(t_{n+1}), \quad \forall n \in \mathbb{N}_0, \tag{A.9}$$

podemos continuar con

$$\mathbf{C}_2(t_n) = \int_{t_i}^{t_n} dt_{n+1} \mathbf{M}(t_{n+1}) \int_{t_i}^{t_{n+1}} dt_{n+2} \mathbf{M}(t_{n+2}), \quad \forall n \in \mathbb{N}_0, \tag{A.10}$$

y así podemos seguir. Ahora que esto está claro, regresemos a nuestra notación previa. Se puede ver fácilmente que se cumple la siguiente identidad

$$\mathbf{C}_1(t) = \int_{t_0}^t dt_1 \mathbf{M}(t_1) = \int_{t_0}^t dt_1 \mathbf{M}(t_1) \mathbf{C}_0(t_1), \tag{A.11}$$

y también

$$\mathbf{C}_2(t) = \int_{t_0}^t dt_1 \mathbf{M}(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathbf{M}(t_2) = \int_{t_0}^t dt_1 \mathbf{M}(t_1) \mathbf{C}_1(t_1), \quad (\text{A.12})$$

finalmente, la expresión general es

$$\boxed{\mathbf{C}_n(t) = \int_{t_0}^t dt_1 \mathbf{M}(t_1) \mathbf{C}_{n-1}(t_1),} \quad (\text{A.13})$$

la cual es utilizada en este trabajo para escribir la solución, Ec. (A.6), en la base de Gell-Mann.

Bibliografía

- [1] E. Sadurní. Transparent lattices and their solitary waves. *Physical Review E*, 90(3):033205, September 2014.
- [2] E Sadurní. Exact propagators on the lattice with applications to diffractive effects. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 45(46):465302, November 2012.
- [3] Felix Bloch. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. *Zeitschrift für Physik*, 52(7-8):555–600, July 1929.
- [4] Eli Yablonovitch. Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics. *Physical Review Letters*, 58(20):2059–2062, May 1987.
- [5] T. Ochiai and K. Sakoda. Dispersion relation and optical transmittance of a hexagonal photonic crystal slab. *Physical Review B*, 63(12):125107, March 2001.
- [6] Riccardo Sapienza, Paola Costantino, Diederik Wiersma, Mher Ghulinyan, Claudio J. Oton, and Lorenzo Pavesi. Optical Analogue of Electronic Bloch Oscillations. *Physical Review Letters*, 91(26):263902, December 2003.
- [7] V. M. García-Chocano, R. Graciá-Salgado, D. Torrent, F. Cervera, and J. Sánchez-Dehesa. Quasi-two-dimensional acoustic metamaterial with negative bulk modulus. *Physical Review B*, 85(18):184102, May 2012.
- [8] J. D. Maynard. Acoustical analogs of condensed-matter problems. *Reviews of Modern Physics*, 73(2):401–417, May 2001.
- [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. *Physical Review B*, 82(1):014301, July 2010.
- [10] Matthieu Bellec, Ulrich Kuhl, Gilles Montambaux, and Fabrice Mortessagne. Topological Transition of Dirac Points in a Microwave Experiment. *Physical Review Letters*, 110(3):033902, January 2013.
- [11] S. Barkhofen, M. Bellec, U. Kuhl, and F. Mortessagne. Disordered graphene and boron nitride in a microwave tight-binding analog. *Physical Review B*, 87(3):035101, January 2013.

-
- [12] E Sadurní, T H Seligman, and F Mortessagne. Playing relativistic billiards beyond graphene. *New Journal of Physics*, 12(5):053014, May 2010.
- [13] F. Ramírez-Ramírez, E. Flores-Olmedo, G. Báez, E. Sadurní, and R. A. Méndez-Sánchez. Emulating tightly bound electrons in crystalline solids using mechanical waves. *Scientific Reports*, 10(1):10229, December 2020.
- [14] Didier Felbacq and Mauro Antezza. Quantum metamaterials: a brave new world. *SPIE Newsroom*, June 2012.
- [15] R. L. Wang, J. Zhang, and Q. F. Hu. Simulation of Band Gap Structures of 1D Photonic Crystal. *Journal of the Korean Physical Society*, 52(11):71, February 2008.
- [16] M. Greiner, I. Bloch, O. Mandel, T.W. Hänsch, and T. Esslinger. Bose–Einstein condensates in 1D- and 2D optical lattices. *Applied Physics B*, 73(8):769–772, December 2001.
- [17] O. Morsch, J. H. Müller, M. Cristiani, D. Ciampini, and E. Arimondo. Bloch Oscillations and Mean-Field Effects of Bose–Einstein Condensates in 1D Optical Lattices. *Physical Review Letters*, 87(14):140402, September 2001.
- [18] Oliver Morsch and Markus Oberthaler. Dynamics of Bose-Einstein condensates in optical lattices. *Reviews of Modern Physics*, 78(1):179–215, February 2006.
- [19] Markus K. Oberthaler, Roland Abfalterer, Stefan Bernet, Jörg Schmiedmayer, and Anton Zeilinger. Atom Waves in Crystals of Light. *Physical Review Letters*, 77(25):4980–4983, December 1996.
- [20] Immanuel Bloch. Ultracold quantum gases in optical lattices. *Nature Physics*, 1(1):23–30, October 2005.
- [21] Kean Loon Lee, Benoît Grémaud, Rui Han, Berthold-Georg Englert, and Christian Miniatura. Ultracold fermions in a graphene-type optical lattice. *Physical Review A*, 80(4):043411, October 2009.
- [22] Leticia Tarruell, Daniel Greif, Thomas Uehlinger, Gregor Jotzu, and Tilman Esslinger. Creating, moving and merging Dirac points with a Fermi gas in a tunable honeycomb lattice. *Nature*, 483(7389):302–305, March 2012.
- [23] U. Kuhl, S. Barkhofen, T. Tudorovskiy, H.-J. Stöckmann, T. Hossain, L. de Forges de Parny, and F. Mortessagne. Dirac point and edge states in a microwave realization of tight-binding graphene-like structures. *Physical Review B*, 82(9):094308, September 2010.
- [24] Daniel Torrent and José Sánchez-Dehesa. Acoustic Analogue of Graphene: Observation of Dirac Cones in Acoustic Surface Waves. *Physical Review Letters*, 108(17):174301, April 2012.

- [25] E Sadurní. Time-dependent Stark ladders: exact propagator and caustic control. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 46(13):135302, April 2013.
- [26] E Sadurní. Canonical Transformations in Crystals. *Journal of Physics: Conference Series*, 512:012013, May 2014.
- [27] P. A. Mello and M. Moshinsky. Nonlinear canonical transformations and their representations in quantum mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, 16(10):2017–2028, October 1975.
- [28] M. Moshinsky and C. Quesne. Linear Canonical Transformations and Their Unitary Representations. *Journal of Mathematical Physics*, 12(8):1772–1780, August 1971.
- [29] Marcos Moshinsky and Yuri F. Smirnov. *Harmonic Oscillator in Modern Physics*. Amsterdam, The Netherlands, May 1996.
- [30] Maxim Artamonov and Tamar Seideman. Time-Dependent, Optically Controlled Dielectric Function. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 6(3):320–325, February 2015.
- [31] Shi-Rong Lin, Ruo-Yang Zhang, Yi-Rong Ma, Wei Jia, and Qing Zhao. Electromagnetic wave propagation in time-dependent media with antisymmetric magnetoelectric coupling. *Physics Letters A*, 380(33):2582–2587, July 2016.
- [32] D. Holberg and K. Kunz. Parametric properties of fields in a slab of time-varying permittivity. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 14(2):183–194, March 1966.
- [33] I. A. Pedrosa, A. Y. Petrov, and A. Rosas. On the electrodynamics in time-dependent linear media. *The European Physical Journal D*, 66(11):309, November 2012.
- [34] GAO Ben-Qing and ZHANG Ying. Propagation of Cylindrical Waves in Media of Time-Dependent Permittivity. *Chinese Physics Letters*, 22(2):446–449, February 2005.
- [35] Walter Greiner and Berndt Müller. *Quantum Mechanics: Symmetries*. Greiner, W.:Theoretical Physics (closed). Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1989.
- [36] Joel Yellin. Two exact lattice propagators. *Physical Review E*, 52(3):2208–2215, September 1995.
- [37] V. Bargmann. Irreducible Unitary Representations of the Lorentz Group. *The Annals of Mathematics*, 48(3):568, July 1947.
- [38] T.H. Seligman, editor. *Proceedings, Latin American School of Physics: Group Theory and its Applications in Physics: Mexico City, Mexico, June 2-20, 1980*, volume 71, 1981.

-
- [39] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, and V. K. Khersonskii. *Quantum Theory of Angular Momentum: Irreducible Tensors, Spherical Harmonics, Vector Coupling Coefficients, 3nj Symbols*. World Scientific Pub., Singapore, 1988.
- [40] Neil W Ashcroft and N. David Mermin. *Solid state physics*. Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976. OCLC: 934604.
- [41] Leonardo Banchi, Enrico Compagno, and Sougato Bose. Perfect wave-packet splitting and reconstruction in a one-dimensional lattice. *Physical Review A*, 91(5):052323, May 2015.
- [42] Alastair Kay. Perfect, efficient, state transfer and its application as a constructive tool. *International Journal of Quantum Information*, 08(04):641–676, June 2010.
- [43] Michael Berry, Irene Marzoli, and Wolfgang Schleich. Quantum carpets, carpets of light. *Physics World*, 14(6):39–46, June 2001.
- [44] J. Zak. Stark Ladder in Solids? *Physical Review Letters*, 20(26):1477–1481, June 1968.
- [45] Gregory H. Wannier. Wave Functions and Effective Hamiltonian for Bloch Electrons in an Electric Field. *Physical Review*, 117(2):432–439, January 1960.
- [46] Liliana Villanueva Vergara and B. M. Rodríguez-Lara. Gilmore-Perelomov symmetry based approach to photonic lattices. *Optics Express*, 23(17):22836, August 2015.
- [47] N. Ja Vilenkin and A. U. Klimyk. *Representation of Lie Groups and Special Functions: Volume 1: Simplest Lie Groups, Special Functions and Integral Transforms*. Mathematics and its Applications. Springer Netherlands, 1991.
- [48] E. Chacón and M. Moshinsky. Representations of finite U_3 transformations. *Physics Letters*, 23(10):567–569, December 1966.
- [49] T. J. Nelson. A Set of Harmonic Functions for the Group $SU(3)$ as Specialized Matrix Elements of a General Finite Transformation. *Journal of Mathematical Physics*, 8(4):857–863, April 1967.
- [50] Douglas Francis Holland. Finite Transformations of SU_3 . *Journal of Mathematical Physics*, 10(3):531–535, March 1969.