



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

# Polarizador de partícula-antipartícula en el contexto de la ecuación de Dirac

## T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE MAESTRO EN  
CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:  
ANTONIO SEBASTIAN ROSADO GONZÁLEZ

Director de tesis:  
Dr. Carlos Francisco Pineda Zorrilla  
Instituto de Física

Miembros del Comité Tutorial:  
Dr. Carlos Pineda, Dr. Emerson Sadurní y Dr. Shahen Hacyan  
Instituto de Física

Ciudad Universitaria, Cd. Mx.

noviembre 2016



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



*People think dreams aren't real just because they aren't made of matter, of particles. Dreams are real. But they are made of viewpoints, of images, of memories and puns and lost hopes.*  
"Preludes and Nocturnes".  
Neil Gaiman.



# Agradecimientos

Quiero comenzar agradeciéndole a mis padres Irma y Antonio, a mi hermana Emma, a mi amada novia Gaby y a mi familia que son los pilares principales y los motores fundamentales de mi vida.

Quiero agradecerle a mis tutores el Dr. Carlos Pineda y el Dr. Emerson Sadurní cuya guía conjunta fue invaluable en la realización de este proyecto y de los cuales continuo aprendiendo. En especial quiero reiterar mis agradecimientos al Dr. Emerson Sadurní, quien *de facto* fungió como codirector de esta tesis.

También quiero agradecerle a todos mis amigos por su apoyo y consejo a lo largo de todo este trayecto.

Finalmente, agradezco los apoyos brindados por CONACyT CB-153190 y DGAPA-IN-111015.



## RESUMEN

Trabajando con una cadena periódica en la aproximación de amarre fuerte, se simulará una ecuación tipo Dirac 1+1 dimensional y se diseñará un polarizador que separa componentes de energía positiva y negativa en la cadena sin uso de campos externos. Este efecto será generado utilizando parámetros intrínsecos de la cadena tales como amplitudes de salto y energías en sitio. Se dará una descripción teórica del potencial polarizador basándonos en una transformación generalizada de Foldy-Wouthuysen construida fuera de la aproximación del punto de Dirac. Los resultados serán verificados de manera numérica por medio de la evolución de paquetes de ondas Gaussianos, incluyendo un análisis de la dinámica relativista efectiva y del Zitterbewegung en la cadena. Finalmente analizamos la robustez del polarizador al reducir su tamaño y número de acoplamientos con miras de buscar una versión de soporte acotado del mismo, tal que pueda ser llevada a realizaciones experimentales.





# Contenido

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Preliminares</b>	<b>5</b>
2.1	Ecuación de Dirac . . . . .	5
2.2	Modelos de amarre fuerte . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Análisis del Zitterbewegung</b>	<b>11</b>
3.1	Hamiltoniano de amarre fuerte . . . . .	11
3.2	Caso de masa nula . . . . .	14
3.3	Caso masivo . . . . .	22
3.4	Dinámica general de los paquetes de onda . . . . .	31
3.5	Decaimiento del Zitterbewegung . . . . .	34
<b>4</b>	<b>Potencial Polarizador</b>	<b>41</b>
4.1	Transformación de Foldy-Wouthuysen . . . . .	41
4.2	Potencial polarizador y paquetes de onda compuestos . . . . .	46
4.3	Robustez del polarizador . . . . .	50
<b>5</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>57</b>
	<b>Apéndices</b>	<b>58</b>
<b>A</b>	<b>Artículo</b>	<b>59</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>71</b>

# Capítulo 1

## Introducción

Como es bien sabido, es posible simular ecuaciones tipo Dirac utilizando estructuras hexagonales tales como el grafeno o el nitruro de boro. En general, esto se debe a dos condiciones: en primera instancia, tenemos una red atómica donde son aplicables las condiciones de amarre fuerte. Esto nos garantiza la presencia de puntos cónicos isotrópicos o de máximo acercamiento en las bandas del material. Es justamente en estos llamados puntos de Dirac, que podemos aproximar las energías del sistema, por las energías propias a una partícula relativista libre. La segunda condición consiste en que la red periódica tiene una estructura bipartita, es decir que la podemos descomponer en dos subestructuras iguales a su vez periódicas. Esto nos permite introducir un grado de libertad discreto adicional, que se manifiesta como una descripción espinorial efectiva del sistema.

Esta analogía entre los sistemas bipartitos de amarre fuerte y la ecuación de Dirac, ha sido utilizada repetidas veces para explorar y emular la dinámica cuántica de sistemas físicos relativistas de difícil acceso, en montajes experimentales mucho más sencillos, tales como átomos ultracalientes [MO06, UJM<sup>+</sup>13, SÖW<sup>+</sup>12], resonadores de microondas [KBT<sup>+</sup>10, BDMO<sup>+</sup>10, BKMM13], iones confinados [GKZ<sup>+</sup>10, LLSS07, BMDS07], cristales fotónicos [Zha08, DHK<sup>+</sup>10], etc. El propósito del presente trabajo no es explorar estas realizaciones experimentales. Más bien nos vamos a enfocar en dos puntos principales: el análisis teórico y numérico de un sistema simplificado en una dimensión, y la construcción de un potencial localizado que actúe como un polarizador para las soluciones de energía positiva y negativa que se obtienen de la ecuación tipo Dirac 1+1 dimensional. El segundo punto es en sí la motivación principal de este trabajo ya que nos permite explorar la posibilidad de implementar qubits en sis-

temas de estado sólido.

La presente tesis está estructurada de la siguiente manera. En el capítulo 2, nos avocaremos a presentar algunas de las bases teóricas, herramientas y aproximaciones utilizadas a lo largo del trabajo. Primero introduciremos el Hamiltoniano de Dirac en su forma estándar y covariante, ya que éste será la base de todo nuestro análisis. Además describiremos el fenómeno de Zitterbewegung, un movimiento oscilatorio que exhiben las soluciones a la ecuación de Dirac. Definiremos la forma canónica de la transformación de Foldy-Wouthuysen para el caso de partícula libre, la cual nos permitirá diagonalizar por bloques el Hamiltoniano de Dirac. Finalmente comentaremos de manera breve en qué consisten los modelos de amarre fuerte, mencionaremos sus límites y aplicabilidad.

En el capítulo 3 comenzaremos presentando en detalle el Hamiltoniano de amarre fuerte que describirá nuestro sistema. Definiremos los operadores de posición, traslación y el potencial alternante que le da el carácter bipartito a la cadena periódica. Además discutiremos brevemente la manera en la que se realizarán los cálculos numéricos. Más adelante analizaremos la dinámica del sistema en el caso de masa nula. Para esto obtendremos los operadores de posición y desviación estándar en el cuadro de Heisenberg y obtendremos sus valores esperados utilizando paquetes de perfil Gaussiano. El análisis anterior lo haremos tanto para el caso de amarre fuerte completo como para el límite de momento pequeño. Proseguimos recuperando el Hamiltoniano en el caso masivo y mostraremos como reescribirlo sin aproximaciones en la forma tipo Dirac. Haciendo uso de esta estructura familiar dada por las matrices de Pauli, obtendremos sus vectores y valores propios. Después, de nuevo procederemos a analizar la dinámica en el cuadro de Heisenberg, tanto para el Hamiltoniano completo como para su límite cerca del punto de Dirac. Una vez hecho esto definiremos nuevos paquetes de perfil Gaussiano, en los cuales podamos controlar su contenido espinorial por medio de un nuevo parámetro  $\theta$  y a partir de éstos procederemos a realizar un análisis global de toda la dinámica del sistema, así como el contenido probabilístico de estados de energía positiva, en función del momento del paquete de ondas y  $\theta$ . Para finalizar el capítulo 3, haremos un análisis del Zitterbewegung en el Hamiltoniano tipo Dirac. Primero veremos que en efecto, este fenómeno sólo está presente en paquetes de onda que tienen mezcla de los dos tipos de estados energéticos. Para finalizar, haciendo uso de la aproximación de fase estacionaria, obtendremos la frecuencia del Zitterbewegung y la razón con la que decae su

amplitud para diferentes valores de la masa efectiva.

En el capítulo 4 comenzaremos construyendo por medio de rotaciones en el espacio espinorial, la transformación de Foldy-Wouthuysen generalizada, apropiada a nuestro Hamiltoniano así como su forma cerca del punto de Dirac. Adicionalmente veremos cómo a partir de la transformación completa, se pueden construir de manera explícita los proyectores para estados de energía positiva y negativa, así como un potencial tal que solo interactúe con los estados de energía positiva. Discutiremos algunas de las propiedades de dicho potencial polarizador en su forma matricial y procederemos a caracterizar sus capacidades de reflexión y transmisión en la cadena, al variar dos tipos de parámetros: los referentes al paquete de ondas como el momento y el contenido probabilístico y los referentes al potencial tales como su rango y el número de acoplamientos presentes en la red.

En el capítulo 5 presentaremos las conclusiones a las que se llegaron en el presente trabajo.

Incluimos un apéndice en el que presentamos el artículo enviado, correspondiente a esta tesis. En el artículo se encuentra un análisis de factibilidad experimental, desarrollado por el Dr. Alexander Franco, y que no incluimos en esta tesis, pues no hace parte del trabajo que desarrollé.



## Capítulo 2

# Preliminares

En este capítulo, vamos a introducir brevemente algunas de las nociones y herramientas que serán utilizadas a lo largo de la tesis. En concreto introduciremos la ecuación de Dirac y el concepto de Zitterbewegung. En el contexto de esta última, presentaremos la transformación de Foldy-Wouthuysen y finalmente revisaremos someramente las características de un modelo de amarre fuerte.

### 2.1 Ecuación de Dirac

El primer paso para formular una teoría cuántica relativista para una partícula libre, requiere de construir un Hamiltoniano tal que

$$\hat{H}^2 = \hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4. \quad (2.1)$$

La solución que viene inmediatamente a la mente sería

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \psi = \sqrt{-\hbar c^2 \nabla^2 + m^2 c^4} \psi, \quad (2.2)$$

el problema con este Hamiltoniano es la presencia de derivadas espaciales en todos los órdenes, lo cual entrega indeseablemente una teoría no local. Como alternativa, Dirac propuso un Hamiltoniano tal que cumpliera (2.1) además de ser covariante en el sentido relativista y lineal en las derivadas espaciales. Tal Hamiltoniano, tomaría la forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \left( \alpha_1 \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + \alpha_2 \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + \alpha_3 \frac{\partial \psi}{\partial x_3} \right) + \beta m c^2 \psi = \hat{H} \psi, \quad (2.3)$$

que en forma compacta se escribe como

$$\hat{H} = \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} c + \beta m c^2 \quad (2.4)$$

A modo de que la ecuación sea invariante ante rotaciones, los coeficientes  $\alpha_i, \beta$  no pueden ser solo números y por tanto se proponen como matrices. La dimensión mas pequeña donde puede ser realizada la ecuación de Dirac, resulta ser 4 y por tanto la función de onda  $\psi$  es un bi-espinor. Las matrices  $\alpha_i, \beta$  deben de satisfacer un número de propiedades, primero estas deben ser hermitianas, segundo deben satisfacer el álgebra

$$\begin{aligned}\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i &= 2\delta_{ik}, \\ \alpha_i \beta + \beta \alpha_i &= 0, \\ \alpha_i^2 &= \beta^2 = I,\end{aligned}\tag{2.5}$$

como consecuencia de lo anterior, resulta que sus eigenvalores son forzosamente  $\pm 1$  y las cuatro matrices tienen traza cero. En una representación particular, estas tienen la forma

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},\tag{2.6}$$

donde  $\sigma_i$  son las matrices de Pauli. Ahora para mostrar la covariancia de la ecuación de Dirac, será conveniente reescribirla de la siguiente manera

$$i\hbar \left( \gamma^0 \frac{\partial}{\partial x^0} + \gamma^1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \gamma^2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \gamma^3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \psi - mc\psi = 0,\tag{2.7}$$

donde hemos multiplicado (2.3) por  $\beta/c$  y hemos definido  $\gamma^0 = \beta, \gamma^i = \beta\alpha_i$ . En esta nueva forma,  $\gamma^i, i \neq 0$  son antihermitianas con  $(\gamma^i)^2 = -I$ , además podemos condensar las relaciones de anticonmutación (2.5) en

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} I,\tag{2.8}$$

donde  $g^{\mu\nu}$  es la métrica del espacio tiempo. Finalmente, siguiendo la representación (2.6) las nuevas matrices toman la forma

$$\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}.\tag{2.9}$$

Estas matrices, conocidas como las matrices de Dirac tienen una larga lista de propiedades y conforman lo que se conoce como un álgebra de Clifford, una discusión mas in extenso al respecto se puede encontrar en [Wei95], [Ram10].

Ahora para ver cómo se transforma la ecuación de Dirac y todas sus componentes, consideramos una transformación de Lorentz entre dos sistemas de referencia inerciales  $O$  y  $O'$

$$(x^\nu)' = \Lambda_\mu^\nu x^\mu,\tag{2.10}$$



donde la transformación de Lorentz  $\Lambda$  es propia, es decir  $\det|\Lambda| = 1$ . Esta puede ser elegida como una rotación usual o un boost alrededor de los tres ejes coordenados. Habiendo establecido esto, es posible ver que la función de onda y las matrices gamma se transforman de la siguiente manera

$$\psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x), \quad (2.11)$$

$$\Lambda_\mu^\nu \gamma^\mu = S^{-1}(\Lambda)\gamma^\nu S(\Lambda). \quad (2.12)$$

La matriz  $S(\Lambda)$  requiere de especial atención, para empezar queda definida de la siguiente manera

$$S(\Lambda) = \exp\left[-\frac{i}{4}w\sigma_{\mu\nu}\mathcal{I}_n^{\mu\nu}\right], \quad (2.13)$$

aquí  $w$  es un parámetro continuo que determina la magnitud de la transformación y la matriz  $\sigma_{\mu\nu}$  esta dada por

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]. \quad (2.14)$$

La matriz  $\mathcal{I}_n$  es el generador de una de las 6 transformaciones de Lorentz básicas, siendo estas las tres rotaciones usuales y los tres boosts antes mencionados, el subíndice  $n$  etiqueta a cada una de estas. Una discusión mas detallada de la ecuación de Dirac y su formalismo, se puede encontrar en [Gre00], [Mes61].

### 2.1.1 Zitterbewegung

Dado que el Hamiltoniano de Dirac cumple (2.1) inherentemente se han incorporado a la teoría soluciones tales que tienen energía negativa; una de las manifestaciones mas interesantes de la presencia de estas últimas es el denominado Zitterbewegung o movimiento tremulante. Si en un paquete de ondas hay presencia de estados de energía positiva y negativa, la interferencia entre los dos tipos produce un movimiento oscilatorio rápido alrededor de la posición promedio del paquete. Trabajando con el Hamiltoniano libre (2.4) en el cuadro de Heisenberg, es fácil ver que el operador de posición al tiempo  $t$ , está dado por

$$\hat{x}(t) = \hat{x}(0) + \frac{\hat{p}}{\hat{H}}t + i\left(\alpha(0) - \frac{\hat{p}}{\hat{H}}\right)\frac{e^{-2iHt} - 1}{2H}, \quad (2.15)$$

donde claramente el término oscilatorio corresponde al Zitterbewegung. La amplitud y el periodo de su valor esperado, son del orden de  $\hbar/2mc$

y  $\hbar/2mc^2$  respectivamente. Finalmente hay que mencionar que aunque este no ha sido medido directamente para una partícula, fenómenos relativistas como este se han encontrado en emulaciones efectivas de diversos sistemas [GKZ<sup>+</sup>10], [DHK<sup>+</sup>10].

### 2.1.2 Transformación de Foldy-Wouthuysen

La transformación canónica de Foldy-Wouthuysen, tiene como propósito desacoplar la ecuación de Dirac en dos ecuaciones de dos componentes, una de ellas para los estados de energía positiva y la otra para los de energía negativa. Estas nos permiten interpretar claramente como se acoplan los dos tipos de soluciones con campos externos y además tienen la virtud de que en el límite no relativista, la ecuación de estados positivos se reduce a la ecuación de Pauli, mientras que la otra se anula. Nosotros solo abordaremos el caso de partícula libre, la idea general es construir una transformación unitaria  $U_{\text{FW}}$  tal que elimine todos los términos asociados a  $\alpha_i$  en (2.4) que son los que se encargan de acoplar las componentes positivas y negativas en la función de onda. Tomando unidades naturales,  $\hbar = c = 1$  esta se propone directamente como una rotación de la forma

$$U_{\text{FW}} = e^{\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \theta(\hat{p})} = \cos |\hat{p}| \theta + \frac{\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}}{|p|} \sin |\hat{p}| \theta \quad (2.16)$$

que al transformar el Hamiltoniano libre, entrega

$$\hat{H}' = U_{\text{FW}} \hat{H} U_{\text{FW}}^\dagger \quad (2.17)$$

$$= \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \left( \cos 2|\hat{p}| \theta - \frac{m}{|p|} \sin 2|\hat{p}| \theta \right) + \beta (m \cos 2|\hat{p}| \theta - |p| \sin 2|\hat{p}| \theta) \quad (2.18)$$

y si queremos que el término asociado a  $\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}$  desaparezca, tomamos

$$\tan 2|\hat{p}| \theta = \frac{|\hat{p}|}{m}, \quad (2.19)$$

lo cual muestra que claramente el ángulo de rotación depende del operador momento. A raíz de esta elección, finalmente vemos que el Hamiltoniano transformado toma la forma

$$\hat{H}' = \beta \sqrt{m^2 + \hat{p}^2} \quad (2.20)$$

donde claramente el bloque 2x2 superior refiere a las energías positivas, mientras que el inferior a las negativas. Para ver el desarrollo con más

detenimiento, así como el caso general de la transformación para una partícula inmersa en un campo externo, nos referimos al artículo original de Foldy y Wouthuysen [FW50] y a [BD64]

## 2.2 Modelos de amarre fuerte

Los modelos de amarre fuerte, son una aproximación utilizada en el estudio de sistemas de estado sólido y de estructura periódica. Se asume que los electrones deben de estar fuertemente acoplados al átomo al que pertenecen y deben tener una interacción muy limitada con los estados y potenciales de los átomos que los rodean. Conversamente esto significa que la función de onda es evanescente en el espacio interatómico, con lo que bien podemos utilizar el ket  $|n\rangle$  para denotar el estado en general en el sitio  $n$  de la estructura periódica, sin describir en detalle la forma espacial específica de la función de onda  $\langle \mathbf{r}|n\rangle$ . Si en cambio queremos conocer la forma espacial, considerando una red periódica de  $N$  sitios y enfocando el análisis a una sola banda, sabemos que las eigenfunciones de un sistema periódico están dadas por las ondas de Bloch

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.21)$$

donde  $\mathbf{k}$  es el vector de onda o momento del cristal en unidades  $\hbar = 1$  y  $\phi$  es una función que conserva la periodicidad de la red. Entonces la forma espacial de la función de onda del electrón, esta dada por las funciones de Wannier

$$\langle \mathbf{r}|n\rangle = W(\mathbf{R}_n, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (2.22)$$

donde  $\mathbf{R}_n$  es la posición del sitio atómico  $n$  en la estructura periódica. Además en el límite  $N \rightarrow \infty$  podemos considerar al momento del cristal  $\mathbf{k}$  como continuo y hacer la siguiente sustitución en las funciones de Wannier

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d\mathbf{k}, \quad (2.23)$$

donde la integral se realiza sobre la primera zona de Brillouin y  $V$  es su volumen. Finalmente, en la aproximación de amarre fuerte, dado que los sitios atómicos se encuentran prácticamente aislados de sus vecinos, la función de Wannier del electrón, se asemeja al orbital atómico apropiado al átomo en cuestión. Este tema se discute más a fondo en [Kit86], [PB10], [AM76].



## Capítulo 3

# Análisis del Zitterbewegung

### 3.1 Hamiltoniano de amarre fuerte

El sistema que vamos a describir consiste en una cadena (unidimensional) de átomos equidistantes. Este sistema puede ser descrito fácilmente con un Hamiltoniano que incluye un potencial periódico de pozos, cada uno localizado en un punto de la cadena. Es bien sabido que las soluciones de un sistema periódico son las funciones de onda de Bloch, que a su vez se pueden describir en términos de las funciones de onda de Wannier. Nosotros las vamos a elegir altamente localizadas y trabajaremos en el régimen de amarre fuerte. Es decir que vamos a considerar que cada pozo alberga un solo estado ligado con una energía en sitio bien definida y que el traslape entre estados adyacentes decae exponencialmente.

Hechas estas consideraciones para una cadena de dimensión finita  $N$ , será más conveniente describir al sistema con un Hamiltoniano de amarre fuerte:

$$\hat{H} = E_0 \sum_{n=0}^{N-1} |n\rangle\langle n| + \Delta \sum_{n=0}^{N-1} (|n+1\rangle\langle n| + |n\rangle\langle n+1|) + \hat{V}(n) \quad (3.1)$$

donde  $E_0$  es la energía base del sistema y  $\Delta$  es la amplitud de salto o energía de acoplamiento a primeros vecinos. En las siguientes consideraciones vamos a dejar fuera el término potencial, pero más adelante lo recuperaremos. Dado que vamos a trabajar con posiciones discretas, se considera, para la posición, una etiqueta discreta  $n$ . Será conveniente

definir operadores de traslación y posición discretos:

$$\begin{aligned}\hat{T}|n\rangle &= |n+1\rangle, \\ \hat{T}^\dagger|n\rangle &= |n-1\rangle, \\ \hat{N}|n\rangle &= n|n\rangle.\end{aligned}\tag{3.2}$$

Si además suponemos que la cadena es cíclica, es decir asumimos condiciones de frontera periódicas, sus representaciones matriciales en el espacio de posiciones discretas son:

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & N-2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & & 0 & N-1 \end{pmatrix}.$$

También será útil calcular sus conmutadores. De la definición misma es claro que  $\hat{T}$  es un operador unitario y también es inmediato ver que  $[\hat{T}, \hat{T}^\dagger] = 0$ . Para conocer el valor del conmutador de  $\hat{T}$  y  $\hat{N}$ , estudiamos su efecto sobre un elemento arbitrario de la base:

$$\begin{aligned}[\hat{T}, \hat{N}]|n\rangle &= (\hat{T}\hat{N} - \hat{N}\hat{T})|n\rangle \\ &= \hat{T}n|n\rangle - \hat{N}|n+1\rangle \\ &= n|n+1\rangle - (n+1)|n+1\rangle \\ &= -|n+1\rangle \\ &= -\hat{T}|n\rangle,\end{aligned}$$

con lo que concluimos que  $[\hat{T}, \hat{N}] = -\hat{T}$ . Como era de esperarse estos no conmutan, pero afortunadamente el álgebra entre ellos queda cerrada. De manera análoga para  $\hat{T}^\dagger$  obtenemos que  $[\hat{T}^\dagger, \hat{N}] = \hat{T}^\dagger$ . Antes de proseguir, hacemos una observación, esta álgebra es estrictamente cierta cuando la cadena es infinita, cuando es finita o cíclica, como es nuestro caso, esta es solo aproximadamente cierta ya que pierde validez en los extremos de la misma. Por lo tanto nosotros enfocaremos nuestro análisis en el límite  $N \rightarrow \infty$  y en las simulaciones numéricas se tendrá cuidado de trabajar en el interior de la cadena, evitando las interacciones con la frontera.

Con las definiciones anteriores, el Hamiltoniano y su forma matricial

en la representación de posiciones discretas se pueden escribir como:

$$\hat{H} = E_o + \Delta(\hat{T} + \hat{T}^\dagger) = \begin{pmatrix} E_o & \Delta & 0 & 0 & \dots & \Delta \\ \Delta & E_o & \Delta & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Delta & E_o & \Delta & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & E_o & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Delta & 0 & 0 & 0 & \dots & E_o \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Para conocer como están distribuidos los niveles de energía en la banda, recordamos la definición del operador de traslación a través del operador de momento. Al aplicarles ondas de Bloch

$$|k\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{e^{ikn}}{\sqrt{N}} |n\rangle, \quad (3.4)$$

es fácil ver que los operadores  $\hat{T}$  y  $\hat{T}^\dagger$  tienen eigenvalores  $e^{-ik}$  y  $e^{ik}$  respectivamente, donde  $k$  juega el papel de momento discreto y  $k = 2\pi s/N$  con  $s \in \{0, 1, 2, \dots, N-1\}$  que es la partición natural inducida sobre la primera zona de Brillouin asociada a nuestra cadena periódica de  $N$  sitios. Con esto las energías del sistema resultan ser

$$E(k) = E_o + \Delta(e^{-ik} + e^{ik}) = E_o + 2\Delta \cos(k) = 2 - 2 \cos(k). \quad (3.5)$$

Vemos que  $E_o$  fija el centro de la banda, mientras que la energía de acoplamiento a primeros vecinos modula el ancho de la misma. Se eligieron  $E_o = 2$  y  $\Delta = -1$  por consideraciones numéricas. Retomando el término potencial, en general éste en la base de posiciones discretas tiene la forma:

$$\hat{V}(n) = \begin{pmatrix} V(0) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & V(1) & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & V(N-1) \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Vamos a considerar que la cadena está a su vez compuesta por dos subcadenas periódicas de pozos de potencial; aquellos estados en sitios pares tendrán energía  $+\mu$  mientras que los estados en sitios impares tendrán energía  $-\mu$ . Esto sugiere elegir un potencial del tipo "tagged field" y por ende la forma de  $\hat{V}$  es la siguiente:

$$\hat{V}(n) = \mu \sum_{n \text{ par}} |n\rangle \langle n| - \mu \sum_{n \text{ impar}} |n\rangle \langle n|. \quad (3.7)$$

Al incorporar este término, el Hamiltoniano total de nuestro sistema es:

$$\hat{H} = E_o + \Delta(\hat{T} + \hat{T}^\dagger) + \mu \sum_{n \text{ par}} |n\rangle\langle n| - \mu \sum_{n \text{ impar}} |n\rangle\langle n|$$

$$= \begin{pmatrix} E_o + \mu & \Delta & 0 & 0 & \dots & \Delta \\ \Delta & E_o - \mu & \Delta & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Delta & E_o + \mu & \Delta & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & E_o - \mu & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Delta & 0 & 0 & 0 & \dots & E_o - \mu \end{pmatrix}.$$

Sean  $|E_n\rangle$  los eigenvectores del Hamiltoniano y sea  $D$  la matriz que lo diagonaliza, es decir, la que tiene por columnas a sus eigenvectores

$$D = (|E_1\rangle, |E_2\rangle, \dots, |E_N\rangle) = \begin{pmatrix} E_1^{(1)} & E_2^{(1)} & \dots & E_N^{(1)} \\ E_1^{(2)} & E_2^{(2)} & \dots & E_N^{(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ E_1^{(N)} & E_2^{(N)} & \dots & E_N^{(N)} \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Como es usual, podemos calcular la evolución temporal del estado al tiempo  $t$  como:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\psi_o\rangle = e^{-i\hat{H}t} \sum_{n=1}^N |E_n\rangle\langle E_n|\psi_o\rangle = \sum_{n=1}^N e^{-iE_n t} \langle E_n|\psi_o\rangle |E_n\rangle. \quad (3.9)$$

Más adelante veremos que es posible obtener analíticamente los eigenvectores y eigenvalores del Hamiltoniano total. Sin embargo, para calcular los valores esperados a diferentes tiempos, resulta más sencillo obtener numéricamente los eigenvalores  $E_n$ , la matriz de eigenvectores  $D$  y la evolución temporal del estado de la siguiente manera:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\psi_o\rangle = DD^\dagger e^{-i\hat{H}t} DD^\dagger |\psi_o\rangle$$

$$= D \begin{pmatrix} e^{-iE_1 t} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-iE_2 t} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-iE_N t} \end{pmatrix} D^\dagger |\psi_o\rangle.$$

### 3.2 Caso de masa nula: dinámica en el cuadro de Heisenberg y límite de Schrödinger

Como mencionamos antes,  $k = 2\pi s/N$  pero en el caso en que  $N \rightarrow \infty$  podemos ver a  $k$  como una variable continua, así que tomando el Hamil-



toniano de amarre fuerte con  $\mu = 0$  en el límite  $k \rightarrow 0$

$$E(k) = 2 - 2 \cos(k) \approx 2 - 2 \left(1 - \frac{k^2}{2}\right) = k^2, \quad (3.10)$$

vemos que la relación de dispersión adquiere un carácter parabólico, por lo que se recupera la dinámica de Schrödinger libre. Para resaltar este hecho, a continuación obtendremos las ecuaciones de movimiento en el cuadro de Heisenberg tanto del Hamiltoniano de amarre fuerte, como del Hamiltoniano de Schrödinger libre y contrastaremos los resultados obtenidos.

Para  $\hat{H} = E_0 + \Delta(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)$  calculamos el siguiente operador

$$\frac{d\hat{N}}{dt} = \frac{[\hat{N}, \hat{H}]}{i} = \frac{\Delta[\hat{N}, \hat{T}] + \Delta[\hat{N}, \hat{T}^\dagger]}{i} = \frac{\Delta(\hat{T} - \hat{T}^\dagger)}{i}, \quad (3.11)$$

de donde inmediatamente podemos ver que el operador de posición discreta al tiempo  $t$  viene dado por:

$$\left[ \frac{d\hat{N}}{dt}, \hat{H} \right] = 0 \quad (3.12)$$

por lo que  $\Delta(\hat{T} - \hat{T}^\dagger)$  es constante, y entonces

$$\hat{N}(t) = \frac{\Delta(\hat{T} - \hat{T}^\dagger)}{i} t + \hat{N}(0). \quad (3.13)$$

Para calcular los valores esperados, expandimos la función de onda inicial en la base

$$|\psi_0\rangle = \sum_{n=0}^N a_n |n\rangle, \quad (3.14)$$

donde en general, los coeficientes  $a_n$  pueden tomar cualquier valor. Por ahora nosotros consideraremos paquetes de forma Gaussiana,

$$a_n = \mathcal{N} \exp \left[ ikn - \frac{(n - x_0)^2}{4\sigma_0^2} \right] \quad (3.15)$$

donde  $\mathcal{N}$  es una constante de normalización. Dado que estamos trabajando en una cadena de dimensión finita  $N$ , el ancho del paquete  $\sigma_0$  en general se encuentra acotado. Este paquete tiene una función de onda asociada en la primera zona de Brillouin. Como es de esperarse esta función de onda asociada es a su vez un paquete Gaussiano, entonces para que ambos paquetes se encuentren contenidos de manera sensible dentro

de sus respectivos espacios, se debe cumplir que  $1 \leq \sigma_o \leq N/4\pi$ . El término de onda plana  $e^{ikn}$  le imprime movimiento al paquete en el espacio de posiciones y además nos permite centrar el paquete de la primera zona de Brillouin alrededor del momento discreto  $k$  elegido.

Continuando con el desarrollo:

$$\langle \hat{N}(t) \rangle = \frac{\Delta t}{i} \langle \hat{T} - \hat{T}^\dagger \rangle + \langle \hat{N}(0) \rangle, \quad (3.16)$$

donde al calcular el valor esperado de la posición inicial, naturalmente se obtiene aquella que fue fijada en el paquete Gaussiano:

$$\langle \hat{N}(0) \rangle = \sum_{m=0}^N a_m^* \langle m | \hat{N}(0) \sum_{n=0}^N a_n | n \rangle = \sum_{n=0}^N |a_n|^2 n = x_o. \quad (3.17)$$

En el caso del operador que acompaña a  $t$  obtenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned} \langle \hat{T} - \hat{T}^\dagger \rangle &= \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^N a_n a_m^* \langle m | \hat{T} - \hat{T}^\dagger | n \rangle \\ &= \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^N a_n a_m^* (\langle m | n+1 \rangle - \langle m | n-1 \rangle) \\ &= \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^N a_n a_m^* (\delta_{m,n+1} - \delta_{m,n-1}) \\ &= \sum_{n=0}^N a_n (a_{n+1}^* - a_{n-1}^*) \equiv \frac{iv_d}{\Delta}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

donde  $v_d$  es la velocidad del paquete discreto. Finalmente el valor esperado de la posición discreta al tiempo  $t$  resulta ser

$$\langle \hat{N}(t) \rangle = v_d t + x_o. \quad (3.19)$$

Para obtener la varianza en el caso discreto, haremos uso del siguiente operador:

$$\begin{aligned} (\hat{N}(t))^2 &= \left[ \frac{\Delta t}{i} (\hat{T} - \hat{T}^\dagger) + \hat{N}(0) \right]^2 \\ &= -\Delta^2 (\hat{T} - \hat{T}^\dagger)^2 t^2 + \frac{\Delta t}{i} (\hat{T} - \hat{T}^\dagger) \hat{N}(0) + \frac{\Delta t}{i} \hat{N}(0) (\hat{T} - \hat{T}^\dagger) + \hat{N}(0)^2. \end{aligned}$$

Calculando el valor esperado de cada segmento obtenemos

$$\langle \hat{N}(0)^2 \rangle = \sum_{n=0}^N n^2 |a_n|^2. \quad (3.20)$$

Para el término mixto obtenemos:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{N}(0)(\hat{T} - \hat{T}^\dagger) \rangle &= \sum_{m=0}^N a_m^* \langle m | (\hat{N}\hat{T} - \hat{N}\hat{T}^\dagger) \sum_{n=0}^N a_n |n\rangle \\
&= \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^N a_m^* a_n [(n+1)\delta_{m,n+1} - (n-1)\delta_{m,n-1}] \\
&= \sum_{n=0}^N a_n [(n+1)a_{n+1}^* - (n-1)a_{n-1}^*]. \tag{3.21}
\end{aligned}$$

Análogamente,

$$\begin{aligned}
\langle (\hat{T} - \hat{T}^\dagger)\hat{N}(0) \rangle &= \sum_{m=0}^N a_m^* \langle m | (\hat{T}\hat{N} - \hat{T}^\dagger\hat{N}) \sum_{n=0}^N a_n |n\rangle \\
&= \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^N a_m^* a_n (n\delta_{m,n+1} - n\delta_{m,n-1}) \\
&= \sum_{n=0}^N n a_n (a_{n+1}^* - a_{n-1}^*). \tag{3.22}
\end{aligned}$$

Finalmente, para el término cuadrático,

$$\begin{aligned}
\langle (\hat{T} - \hat{T}^\dagger)^2 \rangle &= \sum_{m=0}^N a_m^* \langle m | ((\hat{T}^\dagger)^2 + \hat{T}^2 - 2I) \sum_{n=0}^N a_n |n\rangle \\
&= \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^N a_m^* a_n (\delta_{m,n-2} + \delta_{m,n+2} - 2\delta_{m,n}) \\
&= \sum_{n=0}^N (a_{n-2}^* a_n + a_{n+2}^* a_n - 2|a_n|^2) \\
&= \sum_{n=0}^N a_n (a_{n-2}^* + a_{n+2}^*) - 2. \tag{3.23}
\end{aligned}$$

Utilizando todos los resultados anteriores y a partir de la definición cal-

culamos la varianza:

$$\begin{aligned}
\sigma^2(t) &= \langle \hat{N}(t)^2 \rangle - \langle \hat{N}(t) \rangle^2 \\
&= t^2 \left[ 2 - \sum_{n=0}^N a_n (a_{n-2}^* + a_{n+2}^*) + \left( \sum_{n=0}^N a_n (a_{n+1}^* - a_{n-1}^*) \right)^2 \right] \\
&\quad + \frac{t}{i} \left[ \sum_{n=0}^N a_n ((2n+1)a_{n+1}^* - (2n-1)a_{n-1}^*) \right. \\
&\quad \quad \left. - 2 \left( \sum_{n=0}^N n |a_n|^2 \right) \left( \sum_{n=0}^N a_n (a_{n+1}^* - a_{n-1}^*) \right) \right] \\
&\quad + (\langle \hat{N}(0)^2 \rangle - \langle \hat{N}(0) \rangle^2).
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Para la elección Gaussiana de los coeficientes  $a_n$ , es posible ver que el coeficiente del término lineal en  $t$  se anula, con lo que finalmente obtenemos la varianza en el caso discreto al tiempo  $t$

$$\sigma_D^2(t) = t^2 \left( 2 - \sum_{n=0}^N a_n (a_{n-2}^* + a_{n+2}^*) - v_d^2 \right) + \sigma_o^2. \tag{3.25}$$

A continuación vamos a realizar el mismo análisis para el Hamiltoniano de Schrödinger libre  $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$ . Procedemos a calcular los operadores usuales

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{[\hat{p}, \hat{H}]}{i\hbar} = 0 \Rightarrow \hat{p}(t) = \hat{p}(0), \tag{3.26}$$

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{[\hat{x}, \hat{H}]}{i\hbar} = \frac{\hat{p}(0)}{m} \Rightarrow \hat{x}(t) = \frac{\hat{p}(0)}{m}t + \hat{x}(0). \tag{3.27}$$

Para obtener los valores esperados en el caso continuo, consideramos el siguiente paquete de ondas análogo

$$\langle x | \psi_o \rangle = \psi_o(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}} \sigma_o^{\frac{1}{2}}} \exp \left[ ikx - \frac{(x - x_o)^2}{4\sigma_o^2} \right], \tag{3.28}$$

Su representación en el espacio de momentos es

$$\begin{aligned}
\psi_o(p) &= \langle p | \psi_o \rangle = \langle p | \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x | \psi_o \rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{4}} \sqrt{\hbar} \sigma_o} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ i(k - p/\hbar)x - \frac{(x - x_o)^2}{4\sigma_o^2} \right] dx \\
&= \frac{\sqrt{2\sigma_o}}{\hbar(2\pi)^{\frac{1}{4}}} \exp \left[ \frac{ia\hbar(k\hbar - p) - (p - k\hbar)^2 \sigma_o^2}{\hbar^2} \right].
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Primero calculamos el valor esperado de la posición inicial y como es esperado, obtenemos

$$\begin{aligned}\langle \hat{x}(0) \rangle &= \langle \psi_0 | \hat{x}(0) \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x | \psi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\langle x | \psi_0 \rangle|^2 x dx \\ &= \frac{1}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x \exp \left[ \frac{-(x-x_0)^2}{2\sigma_0^2} \right] dx = x_0,\end{aligned}\quad (3.30)$$

mientras que para el operador momento resulta

$$\begin{aligned}\langle \hat{p}(0) \rangle &= \langle \psi_0 | \hat{p}(0) \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x | \psi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi_0 | x \rangle \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \langle x | \psi_0 \rangle dx \\ &= \frac{-i\hbar}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left( ik - \frac{x-a}{2\sigma_0^2} \right) \exp \left[ \frac{-(x-a)^2}{2\sigma_0^2} \right] dx = \hbar k.\end{aligned}\quad (3.31)$$

Con eso, finalmente llegamos a la siguiente ecuación de movimiento:

$$\langle \hat{x}(t) \rangle = \frac{t}{m} \langle \hat{p}(0) \rangle + \langle \hat{x}(0) \rangle = \frac{t}{m} \hbar k + a. \quad (3.32)$$

Para la varianza obtenemos

$$\begin{aligned}\sigma_C^2(t) &= \langle \hat{x}^2(t) \rangle - \langle \hat{x}(t) \rangle^2 \\ &= \frac{t^2}{m^2} \langle \hat{p}^2(0) \rangle + \frac{t}{m} \langle \hat{x}(0) \hat{p}(0) + \hat{p}(0) \hat{x}(0) \rangle + \langle \hat{x}^2(0) \rangle - \left( \frac{t}{m} \hbar k + a \right)^2.\end{aligned}$$

Calculando el valor esperado de cada segmento, para el término cuadrático en  $\hat{p}$

$$\begin{aligned}\langle \hat{p}^2(0) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi_0 | x \rangle \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right)^2 \langle x | \psi_0 \rangle dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \left( ik - \frac{x-a}{2\sigma_0^2} \right)^2 - \frac{1}{2\sigma_0^2} \right] \exp \left[ \frac{-(x-a)^2}{2\sigma_0^2} \right] dx \\ &= \hbar^2 k^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma_0^2},\end{aligned}\quad (3.33)$$

mientras que para el término mixto

$$\begin{aligned}\langle \hat{x}(0) \hat{p}(0) + \hat{p}(0) \hat{x}(0) \rangle &= 2 \langle \hat{p}(0) \hat{x}(0) \rangle + i\hbar \\ &= -\frac{2i\hbar}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ 1 + x \left( ik - \frac{x-a}{2\sigma_0^2} \right) \right] \exp \left[ \frac{-(x-a)^2}{2\sigma_0^2} \right] dx + i\hbar \\ &= 2\hbar ka,\end{aligned}\quad (3.34)$$

y para el término cuadrático en  $\hat{x}$

$$\langle \hat{x}(0)^2 \rangle = \frac{1}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp \left[ \frac{-(x-a)^2}{2\sigma_0^2} \right] dx = a^2 + \sigma_0^2. \quad (3.35)$$

Finalmente, al sustituir obtenemos la varianza en el caso continuo al tiempo  $t$ :

$$\begin{aligned} \sigma_C^2(t) &= \frac{t^2}{m^2} \left( \hbar^2 k^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma_0^2} \right) + \frac{t}{m} (2ka\hbar) + a^2 + \sigma_0^2 - \left( \frac{t}{m} k\hbar + a \right)^2 \\ &= \frac{t^2 \hbar^2}{4m^2 \sigma_0^2} + \sigma_0^2. \end{aligned} \quad (3.36)$$

De lo obtenido anteriormente, vemos que tanto en el caso discreto como en el caso continuo, el paquete Gaussiano se propaga con velocidad uniforme y su dispersión viene dada por una ley cuadrática. Este comportamiento se ha reportado con anterioridad en la literatura como se puede ver en [NSW06]. Finalmente, recordando que  $m = 1/2$  y  $\hbar = 1$  podemos resumir la dinámica en las siguientes cuatro ecuaciones:

$$\langle \hat{N}(t) \rangle = v_d t + x_0, \quad (3.37)$$

$$\langle \hat{x}(t) \rangle = 2kt + x_0, \quad (3.38)$$

$$\sigma_D^2(t) = t^2 \left( 2 - \sum_{n=0}^N a_n (a_{n-2}^* + a_{n+2}^*) - v_d^2 \right) + \sigma_0^2, \quad (3.39)$$

$$\sigma_C^2(t) = \frac{t^2}{\sigma_0^2} + \sigma_0^2. \quad (3.40)$$

Si comparamos su comportamiento en el límite  $k \rightarrow 0$ , vemos que en efecto empatan y sólo difieren para tiempos grandes, como se ve en la fig. 3.1. Esto quiere decir que en este límite, los coeficientes son en efecto aproximados,

$$v_d \approx 2k \quad (3.41)$$

$$\frac{1}{\sigma_0^2} \approx 2 - \sum_{n=0}^N a_n (a_{n-2}^* + a_{n+2}^*) - v_d^2. \quad (3.42)$$

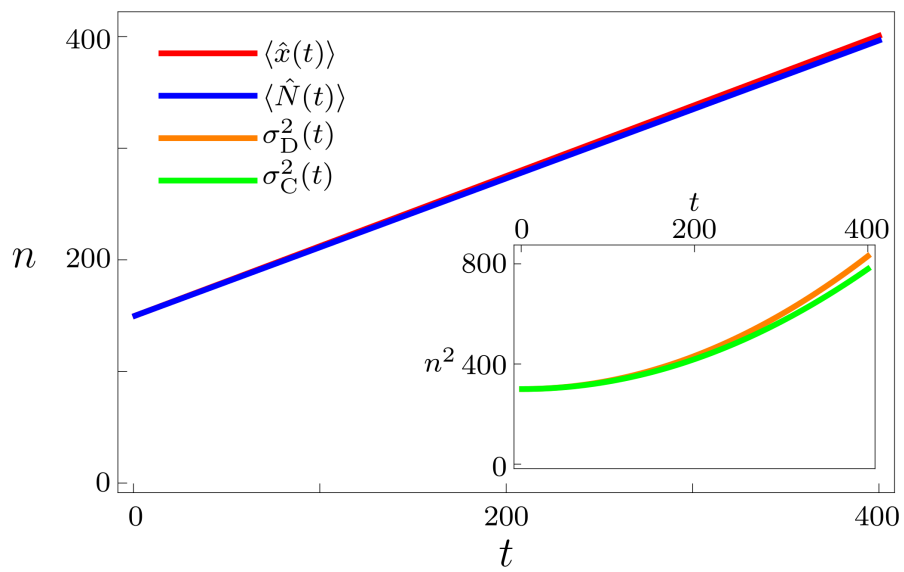


Figura 3.1: Desplazamiento balístico y expansión difusiva de los paquetes Gaussianos en el caso  $\mu = 0$ . Los parámetros utilizados para los cálculos numéricos fueron:  $N = 602$ ,  $x_0 = 150$ ,  $\sigma_o^2 = 300$ ,  $k = \pi/10$ .

### 3.3 Caso masivo: Hamiltoniano tipo Dirac, dinámica en el cuadro de Heisenberg y límite de Dirac

Recordando que  $E_o = 2$  y  $\Delta = -1$  retomamos el Hamiltoniano total del sistema

$$\begin{aligned} \hat{H} &= E_o + \Delta(\hat{T} + \hat{T}^\dagger) + \mu \sum_{n \text{ par}} |n\rangle\langle n| - \mu \sum_{n \text{ impar}} |n\rangle\langle n| \\ &= \begin{pmatrix} E_o + \mu & \Delta & 0 & 0 & \dots & \Delta \\ \Delta & E_o - \mu & \Delta & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Delta & E_o + \mu & \Delta & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & E_o - \mu & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta & 0 & 0 & 0 & \dots & E_o - \mu \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Podemos construir una matriz de permutaciones  $B$  tal que nos permita agrupar los sitios pares e impares en bloques de la siguiente manera,

$$B = \begin{pmatrix} \text{par-par} & \text{par-impar} \\ \text{impar-par} & \text{impar-impar} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.43)$$

por medio de esta matriz, podemos cambiar la antigua representación tri-diagonal, por una representación de espinores, donde la primera entrada de los mismos describe el estado de la cadena par, mientras que la segunda entrada describe el de la cadena impar. En cierto sentido, la matriz  $B$  tiene el efecto de plegar el sistema y como es de esperarse, estos nuevos espinores describen el estado de una cadena total efectiva con  $N/2$  sitios. Adicionalmente, dado que  $B$  es ortogonal, sabemos que esta



transformación deja invariante el espectro de  $H$ .

$$\hat{H} \rightarrow \hat{H}' = B\hat{H}B^\dagger$$

$$\begin{aligned}
&= \begin{pmatrix} E_o + \mu & 0 & 0 & \dots & \Delta & 0 & 0 & \dots & \Delta \\ 0 & E_o + \mu & 0 & \dots & \Delta & \Delta & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & E_o + \mu & \dots & 0 & \Delta & \Delta & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta & \Delta & 0 & \dots & E_o - \mu & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Delta & \Delta & \dots & 0 & E_o - \mu & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & \dots & 0 & 0 & E_o - \mu & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & E_o - \mu \end{pmatrix} \\
&= E_o I + \mu \sigma_z + \sigma_+ \otimes \begin{pmatrix} \Delta & 0 & 0 & \dots & \Delta \\ \Delta & \Delta & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Delta & \Delta & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \Delta \end{pmatrix} + \sigma_- \otimes \begin{pmatrix} \Delta & \Delta & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Delta & \Delta & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta & 0 & 0 & \dots & \Delta \end{pmatrix} \\
&= E_o I + \mu \sigma_z + \Delta \sigma_+ \otimes (I + \hat{\tau}) + \Delta \sigma_- \otimes (I + \hat{\tau}^\dagger). \tag{3.44}
\end{aligned}$$

Es necesario hacer una observación. Mientras que  $\hat{\tau}$  y  $\hat{\tau}^\dagger$  tienen la misma representación matricial que los operadores de traslación, debido a la descripción espinorial, estas matrices ya no conectan sitios adyacentes en la cadena total, sino sitios adyacentes dentro de una subcadena, ya sea la par o impar. En otras palabras  $\hat{\tau} = \hat{T}^2$ . Considerando lo anterior, llegamos a la siguiente forma del Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= E_o I + \mu \sigma_z + \Delta \sigma_+ (I + \hat{T}^2) + \Delta \sigma_- (I + (\hat{T}^\dagger)^2) \\
&= E_o I + \mu \sigma_z + \frac{\Delta}{2} (\sigma_x + i\sigma_y) (I + \hat{T}^2) + \frac{\Delta}{2} (\sigma_x - i\sigma_y) (I + (\hat{T}^\dagger)^2) \\
&= E_o I + \Delta \sigma_x \left( 1 + \frac{\hat{T}^2 + (\hat{T}^\dagger)^2}{2} \right) + \Delta \sigma_y \left( \frac{(\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2}{2i} \right) + \mu \sigma_z. \tag{3.45}
\end{aligned}$$

Las matrices de Pauli  $\sigma$  como es bien sabido, satisfacen que  $\{\sigma_a, \sigma_b\} = 2\delta_{ab}I$ , que es justamente el álgebra de Dirac considerando una métrica  $g = I$ .

Como se puede ver en [SSM10], [Nau07], es bien sabido que podemos utilizar la estructura tipo Dirac del Hamiltoniano, para obtener las eigenenergías del sistema de la siguiente manera,

$$\begin{aligned}
(\hat{H} - E_0)^2 &= \left[ \Delta\sigma_x \left( 1 + \frac{\hat{T}^2 + (\hat{T}^\dagger)^2}{2} \right) + \Delta\sigma_y \left( \frac{(\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2}{2i} \right) + \mu\sigma_z \right]^2 \\
&= \Delta^2 \left( 1 + \frac{\hat{T}^2 + (\hat{T}^\dagger)^2}{2} \right)^2 + \Delta^2 \left( \frac{(\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2}{2i} \right)^2 + \mu^2 \\
&= \Delta^2 (\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2
\end{aligned} \tag{3.46}$$

y por lo tanto:

$$E^\pm(k) = E_0 \pm \sqrt{\Delta^2(e^{-ik} + e^{ik})^2 + \mu^2} = E_0 \pm \sqrt{4\Delta^2 \cos^2(k) + \mu^2}. \tag{3.47}$$

En este nivel, podemos ver que el efecto neto de introducir el termino potencial en el Hamiltoniano, genera una brecha en la banda de energías. Esto a su vez separa los eigenestados de  $\hat{H}$  en positivos i.e. de partícula o en negativos i.e. de antipartícula de acuerdo con la elección de signo. Finalmente, si desarrollamos la función coseno alrededor de la brecha, es decir en  $k = \frac{\pi}{2}$  y definimos  $\kappa = (k - \frac{\pi}{2})$  vemos que

$$E^\pm(k) = E_0 \pm \sqrt{\Delta^2(2\kappa)^2 + \mu^2}. \tag{3.48}$$

Es decir que en este límite, la relación de dispersión toma la forma de las energías relativistas libres, donde los parámetros  $\Delta$  y  $\mu$  juegan el papel de velocidad de la luz y masa efectivas. El factor 2 que acompaña a  $\kappa$  es producto de la naturaleza bipartita de la cadena. Mas en concreto, al momento de obtener  $(\hat{H} - E_0)^2$ , hemos renormalizado el sistema lo que efectivamente esta duplicando la distancia entre sitios de la red y para mayor claridad, podemos definir  $\kappa' \equiv 2\kappa$ . Dado que el Hamiltoniano (3.45) solo depende de los operadores de traslación, es inmediato ver que  $[\hat{H}, \hat{T}] = 0$  y por lo tanto tienen una eigenbase común. Como ya vimos,  $k$  determina los eigenvalores de ambos operadores, por tanto será conveniente denotar a los eigenestados como  $|k, s\rangle$  donde el signo  $s = \pm$  hace referencia a la banda superior o inferior. Considerando lo anterior, para determinar la forma explícita de los eigenestados, será conveniente expresarlos como espinores de la siguiente manera

$$|k, s\rangle = \begin{pmatrix} \phi_{k,s}^+ \\ \phi_{k,s}^- \end{pmatrix}, \tag{3.49}$$

a partir de lo cual vemos que

$$\begin{aligned}
\hat{H}|k, s\rangle &= \begin{pmatrix} E_o + \mu & \Delta(I + \hat{T}^2) \\ \Delta(I + (\hat{T}^+)^2) & E_o - \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{k,s}^+ \\ \phi_{k,s}^- \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} (E_o + \mu)\phi_{k,s}^+ + \Delta(I + \hat{T}^2)\phi_{k,s}^- \\ \Delta(I + (\hat{T}^+)^2)\phi_{k,s}^+ + (E_o - \mu)\phi_{k,s}^- \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} (E_o + \mu)\phi_{k,s}^+ + \Delta(1 + e^{-2ik})\phi_{k,s}^- \\ \Delta(1 + e^{2ik})\phi_{k,s}^+ + (E_o - \mu)\phi_{k,s}^- \end{pmatrix}. \tag{3.50}
\end{aligned}$$

Por otro lado también tenemos que

$$\hat{H}|k, s\rangle = E^s(k)|k, s\rangle = \begin{pmatrix} E^s(k)\phi_{k,s}^+ \\ E^s(k)\phi_{k,s}^- \end{pmatrix}, \tag{3.51}$$

con lo que llegamos a las siguientes ecuaciones para las componentes del espinor

$$(E_o + \mu)\phi_{k,s}^+ + \Delta(1 + e^{-2ik})\phi_{k,s}^- = E^s(k)\phi_{k,s}^+, \tag{3.52}$$

$$\Delta(1 + e^{2ik})\phi_{k,s}^+ + (E_o - \mu)\phi_{k,s}^- = E^s(k)\phi_{k,s}^- \tag{3.53}$$

y a partir de la ecuación (3.53) es fácil ver que

$$\phi_{k,s}^- = \frac{\Delta(1 + e^{2ik})}{E^s(k) - E_o + \mu}\phi_{k,s}^+ = \frac{\Delta(1 + e^{2ik})}{s\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k)} + \mu}\phi_{k,s}^+. \tag{3.54}$$

Entonces para obtener  $\phi_{k,s}^+$  normalizamos la eigenbase

$$\begin{aligned}
1 = \langle k, s|k, s\rangle &= \left(1 + \frac{\Delta^2(1 + e^{2ik})(1 + e^{-2ik})}{(s\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k)} + \mu)^2}\right) |\phi_{k,s}^+|^2 \\
&= \left(\frac{(s\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k)} + \mu)^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k)}{(s\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k)} + \mu)^2}\right) |\phi_{k,s}^+|^2 \\
&= \left(\frac{2s\mu\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k)} + 2(\mu^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k))}{(s\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k)} + \mu)^2}\right) |\phi_{k,s}^+|^2 \\
&= \left(\frac{2\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k)}}{\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k)} + s\mu}\right) |\phi_{k,s}^+|^2. \tag{3.55}
\end{aligned}$$

Por lo tanto quedan determinados los módulos de las dos componentes del espinor de la siguiente manera

$$|\phi_{k,s}^\pm| = \sqrt{\frac{\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k)} \pm s\mu}{2\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k)}}}. \tag{3.56}$$

Como se mencionó anteriormente, las componentes  $\phi_{k,s}^{\pm}$  son a su vez eigenvectores del operador de traslación, entonces para determinarlas completamente, sólo basta introducirles una estructura de onda de Bloch

$$\phi_{k,s}^{\pm} = e^{\pm i\delta} \sqrt{\frac{\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k)} \pm s\mu}{2\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k)}}} \sum_n \sqrt{\frac{2}{N}} e^{ikn} |n\rangle \quad (3.57)$$

solo que aquí la base  $|n\rangle$  etiqueta los estados en la subcadena efectiva de  $N/2$  sitios. Por consideraciones que adelante quedarán claras, elegimos las fases como

$$e^{+i\delta} = se^{-i\frac{k}{2}}, e^{-i\delta} = e^{+i\frac{k}{2}}. \quad (3.58)$$

A continuación, vamos a proceder de la misma manera que en el caso  $\mu = 0$ . Obtendremos las ecuaciones de movimiento en el cuadro de Heisenberg, primero para el Hamiltoniano total y luego para el Hamiltoniano relativista positivo. Una vez hecho esto, contrastaremos sus dinámicas. Calculando

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{N}}{dt} &= \frac{[\hat{N}, \hat{H}]}{i} \\ &= \frac{1}{i} \left[ \hat{N}, E_o I + \Delta\sigma_x \left( 1 + \frac{\hat{T}^2 + (\hat{T}^\dagger)^2}{2} \right) + \Delta\sigma_y \left( \frac{(\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2}{2i} \right) + \mu\sigma_z \right] \\ &= \frac{\Delta\sigma_x}{2i} ([\hat{N}, \hat{T}^2] + [\hat{N}, (\hat{T}^\dagger)^2]) - \frac{\Delta\sigma_y}{2} ([\hat{N}, (\hat{T}^\dagger)^2] - [\hat{N}, \hat{T}^2]) \\ &= 2i\Delta \begin{pmatrix} 0 & -\hat{T}^2 \\ (\hat{T}^\dagger)^2 & 0 \end{pmatrix} = 2i\Delta(\sigma_- (\hat{T}^\dagger)^2 - \sigma_+ \hat{T}^2) \equiv \hat{\alpha}, \end{aligned} \quad (3.59)$$

donde hemos nombrado al operador velocidad como  $\hat{\alpha}$ , y

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\alpha}}{dt} &= i[\hat{H}, \hat{\alpha}] = i(\hat{H}\hat{\alpha} + \hat{\alpha}\hat{H}) - 2i\hat{\alpha}\hat{H} \\ &= i \left[ 2i\Delta \begin{pmatrix} \Delta((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2) & -2\hat{T}^2 E_o \\ 2(\hat{T}^\dagger)^2 E_o & \Delta((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2) \end{pmatrix} \right] - 2i\hat{\alpha}\hat{H} \\ &= i(2i\Delta^2((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2) \otimes I_{2 \times 2} + 2E_o \hat{\alpha}) - 2i\hat{\alpha}\hat{H}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Es fácil ver que el término  $((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2) \otimes I_{2 \times 2}$  conmuta con el Hamiltoniano y gracias a esto podemos integrar la ecuación diferencial de primer

orden para  $\hat{\alpha}$

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\alpha}}{dt} &= -2\Delta^2((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2) \otimes I_{2 \times 2} + 2i\hat{\alpha}(E_o - \hat{H}) \Rightarrow \\ \hat{\alpha}(t) &= \frac{\Delta^2((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2) \otimes I_{2 \times 2}}{i(E_o - \hat{H})} \\ &+ \left( \hat{\alpha}(0) - \frac{\Delta^2((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2) \otimes I_{2 \times 2}}{i(E_o - \hat{H})} \right) e^{2i(E_o - \hat{H})t} \end{aligned} \quad (3.61)$$

y finalmente obtenemos el operador de posición para todo tiempo

$$\begin{aligned} \hat{N}(t) &= \int_0^t \hat{\alpha}(u) du + \hat{N}(0) = \hat{N}(0) + \frac{\Delta^2((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2) \otimes I_{2 \times 2}}{i(E_o - \hat{H})} t \\ &+ \left( \hat{\alpha}(0) - \frac{\Delta^2((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2) \otimes I_{2 \times 2}}{i(E_o - \hat{H})} \right) \frac{e^{2i(E_o - \hat{H})t} - I}{2i(E_o - \hat{H})}. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Dado que en general para los operadores anteriores, no es posible obtener expresiones analíticas para sus valores esperados, no tiene caso realizar el cálculo explícito para  $\sigma_D^2(t)$  ya que sólo sería redundante. En el caso de  $\hat{N}(t)$  vale la pena notar que los dos primeros términos corresponden de nuevo a la propagación balística de una partícula libre. El término

$$\left( \hat{\alpha}(0) - \frac{\Delta^2((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2) \otimes I_{2 \times 2}}{i(E_o - \hat{H})} \right) \frac{e^{2i(E_o - \hat{H})t} - I}{2i(E_o - \hat{H})}, \quad (3.63)$$

corresponde al movimiento tremulante denominado “Zitterbewegung”. Como es bien sabido, estas oscilaciones son de amplitud muy pequeña y son consecuencia de la interferencia entre las componentes de energía positiva y negativa del paquete de ondas. Más adelante discutiremos este término a fondo y analizaremos algunas de sus características a detalle.

Para el caso relativista libre tomamos el Hamiltoniano

$$\hat{H} = \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (3.64)$$

De antemano sabemos que esta elección es ingenua, ya que al tomar solo la raíz positiva, esta solo captura la dinámica de las soluciones de energía positiva. Aun así compararemos con el Hamiltoniano total, para ver si hay ciertas similitudes en su comportamiento. Prosiguiendo, obtenemos

los operadores

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{[\hat{p}, \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4}]}{i\hbar} = 0 \Rightarrow \hat{p}(t) = \hat{p}(0), \quad (3.65)$$

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{[\hat{x}, \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4}]}{i\hbar} = \frac{\hat{p}c^2}{\sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4}} \Rightarrow$$

$$\hat{x}(t) = \frac{\hat{p}c^2}{\sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4}} t + \hat{x}(0). \quad (3.66)$$

De nuevo los valores esperados de dichos operadores, no pueden ser obtenidos de manera analítica, así que a continuación se dejan expresados los factores integrales que aparecen en el desarrollo.

$$\langle \hat{x}(t) \rangle = vt + x_0, \quad (3.67)$$

donde la velocidad del paquete  $v$  esta dada por

$$v \equiv \left\langle \frac{\hat{p}(0)c^2}{\sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4}} \right\rangle$$

$$= \frac{2c^2\sigma_0}{\hbar^2\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p}{\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}} \exp \left[ \frac{-2(p - k\hbar)^2 \sigma_0^2}{\hbar^2} \right] dp. \quad (3.68)$$

Para la varianza obtenemos de nuevo un comportamiento cuadrático en  $t$

$$\sigma_C^2(t) = \langle \hat{x}^2(t) \rangle - \langle \hat{x}(t) \rangle^2 = Bt^2 + Ct + \sigma_0^2, \quad (3.69)$$

donde los factores B y C están dados por

$$B \equiv c^2 \left( \left\langle \frac{\hat{p}^2(0)}{\hat{p}^2 + m^2 c^2} \right\rangle - \left\langle \frac{\hat{p}(0)}{\sqrt{\hat{p}^2 + m^2 c^2}} \right\rangle^2 \right), \quad (3.70)$$

$$C \equiv c \left( \left\langle \frac{\hat{x}(0)\hat{p}(0)}{\sqrt{\hat{p}^2 + m^2 c^2}} \right\rangle + \left\langle \frac{\hat{p}(0)\hat{x}(0)}{\sqrt{\hat{p}^2 + m^2 c^2}} \right\rangle - 2x_0 \left\langle \frac{\hat{p}(0)}{\sqrt{\hat{p}^2 + m^2 c^2}} \right\rangle \right)$$

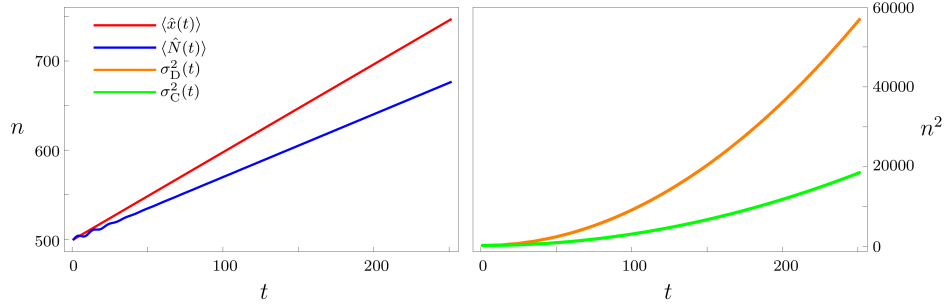


Figura 3.2: Desplazamiento balístico y expansión difusiva de los paquetes Gaussianos en el caso  $\mu \neq 0$ . Los parámetros utilizados para los cálculos numéricos fueron:  $N = 1002$ ,  $x_0 = 500$ ,  $\sigma_o^2 = 300$ ,  $k = 0.47\pi$ ,  $\mu = 1/4$ .

đ y además

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\hat{p}^2(0)}{\hat{p}^2 + m^2c^2} \right\rangle &= \frac{2\sigma_o}{\hbar^2\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{p^2 + m^2c^2} \exp \left[ \frac{-2(p - k\hbar)^2\sigma_o^2}{\hbar^2} \right] dp, \\ \left\langle \frac{\hat{p}(0)\hat{x}(0)}{\sqrt{\hat{p}^2 + m^2c^2}} \right\rangle &= \frac{2i\sigma_o}{\hbar^3\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p}{\sqrt{p^2 + m^2c^2}} \\ &\quad \times \exp \left[ \frac{-2(p - k\hbar)^2\sigma_o^2}{\hbar^2} \right] (-ia\hbar - 2(p - k\hbar)\sigma_o^2) dp, \\ \left\langle \frac{\hat{x}(0)\hat{p}(0)}{\sqrt{\hat{p}^2 + m^2c^2}} \right\rangle &= \frac{2i\sigma_o}{\hbar\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{p^2 + m^2c^2}} \exp \left[ \frac{-2(p - k\hbar)^2\sigma_o^2}{\hbar^2} \right] \\ &\quad \times \left( 1 - \frac{p^2}{p^2 + m^2c^2} + \frac{p}{\hbar^2} (-ia\hbar - 2(p - k\hbar)\sigma_o^2) \right) dp. \end{aligned}$$

Ahora, para contrastar la dinámica de los dos Hamiltonianos, en el caso de  $\langle \hat{x}(t) \rangle$  y  $\sigma_C^2(t)$  se consideraron unidades naturales, es decir:  $c = 1$  y  $\hbar = 1$  y se integró de manera numérica los factores A, B y C donde como era de esperarse y al igual que en los casos anteriores, el coeficiente C resulta idénticamente cero. En el caso de  $\langle \hat{N}(t) \rangle$  y  $\sigma_D^2(t)$ , estos fueron calculados con el propagador numérico que se describe al final de la sección 3.1. Finalmente obtenemos los comportamientos que se observan en la fig. 3.2. En ellos, ciertamente se puede apreciar que los paquetes se propagan con velocidades distintas, siendo la velocidad del Hamiltoniano positivo, la mayor. Esto se debe a que en el caso del Hamiltoniano total, como se menciono antes, todo paquete arbitrario estará compuesto tanto de eigenestados de energía positiva como de eigenestados de energía

negativa. En el contexto de la física del estado sólido, estos serán entendidos como electrones en la banda de conducción y huecos en la banda de valencia, por lo que como es bien sabido, tendrán quiralidad opuesta. Las simulaciones numéricas del propagador revelan que las componentes positivas y negativas del paquete inicial, siempre se propagan en sentidos opuestos, lo cual dependiendo del peso probabilístico y la velocidad de cada componente, resulta en una velocidad efectiva neta menor a la del caso puramente positivo. En el caso del comportamiento difusivo, se observa que el Hamiltoniano total rebasa al Hamiltoniano positivo. Esto de nuevo se explica por la contrapropagación de las componentes de energía positiva y negativa. Al estas alejarse una de la otra, el paquete total aparenta expandirse indefinidamente.

Entonces es claro que el Hamiltoniano relativista positivo no es el límite correcto. Para corregir esto, retomamos la ecuación (3.50) y desarrollamos:

$$\begin{aligned}\hat{H}|k, s\rangle &= \begin{pmatrix} (E_o + \mu)\phi_{k,s}^+ + \Delta(1 + e^{-2ik})\phi_{k,s}^- \\ \Delta(1 + e^{2ik})\phi_{k,s}^+ + (E_o - \mu)\phi_{k,s}^- \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (E_o + \mu) & \Delta(1 + e^{-2ik}) \\ \Delta(1 + e^{2ik}) & (E_o - \mu) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{k,s}^+ \\ \phi_{k,s}^- \end{pmatrix} \\ &= (E_o I + \Delta\sigma_x (1 + \cos 2k) + \Delta\sigma_y (\sin 2k) + \mu\sigma_z)|k, s\rangle. \quad (3.71)\end{aligned}$$

Al expandir las funciones alrededor de  $k = \pi/2$  y definiendo  $p \equiv -2(k - \pi/2)$ , llegamos, como debe de ser, al Hamiltoniano de Dirac en 1 dimensión

$$\hat{H} = E_o + \mu\sigma_z + \Delta\sigma_y \hat{p}, \quad (3.72)$$

lo que nos muestra que en este límite, los operadores toman la forma

$$\frac{(\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2}{i} \approx -\hat{p} \quad (3.73)$$

$$\hat{\alpha}(0) \approx \Delta\sigma_y(0) \quad (3.74)$$

y por lo tanto, comparando con (3.62) las ecuaciones de movimiento correctas en el límite de Dirac son

$$\hat{x}(t) = \hat{x}(0) - \frac{\Delta^2 \hat{p} \otimes I_{2 \times 2}}{(E_o - \hat{H})} t + \left( \Delta\sigma_y(0) + \frac{\Delta^2 \hat{p} \otimes I_{2 \times 2}}{(E_o - \hat{H})} \right) \frac{e^{2i(E_o - \hat{H})t} - I}{2i(E_o - \hat{H})}.$$



### 3.4 Caracterización de la dinámica general de los paquetes de onda ante variación paramétrica

Como vimos en la sección anterior, es de suma importancia entender la composición del paquete de ondas inicial, en términos de sus componentes de energía positiva y negativa, así como la dinámica e interacción de estos últimos. Para explorar más a fondo estas características, será conveniente definir los proyectores

$$\hat{P}_s = \sum_k |k, s\rangle \langle k, s|, \quad (3.75)$$

donde  $|k, s\rangle$  son los eigenestados de (3.45) y  $s = \pm$ . Dado que ambos proyectores son complementarios, vamos a realizar nuestro análisis con  $\hat{P}_+$  y a partir de éste calcular el contenido probabilístico total de estados de energía positiva presentes en el paquete de ondas

$$\langle \psi_o | \hat{P}_+ | \psi_o \rangle = \langle \psi_o | \hat{P}_+ \left( \sum_k \alpha_k^+ |k, +\rangle + \sum_k \alpha_k^- |k, -\rangle \right) = \sum_k |\alpha_k^+|^2. \quad (3.76)$$

Los resultados correspondientes a  $s = -$ , se pueden obtener notando que  $\hat{P}_+ + \hat{P}_- = \mathbb{1}$ . También vamos a definir una nueva función de onda inicial como

$$\langle n | \psi_o \rangle_{\theta, k} = \begin{cases} \mathcal{N} \sin(\theta) \exp \left[ ikn - \frac{(n-x_0)^2}{4\sigma_o^2} \right] & \text{para } n \text{ par,} \\ \mathcal{N} \cos(\theta) \exp \left[ ikn - \frac{(n-x_0)^2}{4\sigma_o^2} \right] & \text{para } n \text{ impar,} \end{cases} \quad (3.77)$$

donde  $\theta$  es un parámetro auxiliar que nos permite controlar el contenido del paquete en cada subcadena. Nótese que esta es casi una gaussiana centrada en  $x_0$  y con momento promedio  $k$ .

Ignorando el término de Zitterbewegung, hemos visto que el paquete obedece ecuaciones de movimiento de la forma  $\langle \hat{N}(t) \rangle \approx vt + N_o$ ,  $\sigma^2(t) \approx \mathcal{D}t^2 + \sigma_o^2$ . Entonces, para entender el comportamiento general del paquete sera conveniente caracterizar la velocidad  $v$ , el coeficiente de difusión  $\mathcal{D}$  y la probabilidad de estados positivos  $\langle \hat{P}_+ \rangle$  en función de  $\theta$  y  $k$ . Vamos a variar  $\theta$  en el rango  $[0, \pi/2]$  donde podemos notar que en 0 tenemos un paquete gaussiano completamente preparado en la subcadena par, en  $\pi/4$  recuperamos el paquete gaussiano completo (3.15) utilizado en las secciones anteriores y finalmente en  $\pi/2$  tenemos un paquete gaussiano completamente preparado en la subcadena impar. Aunque vamos a variar  $k$  sólo en  $[0, 2\pi]$ , la dinámica completa esta contenida en  $[0, \pi]$ .

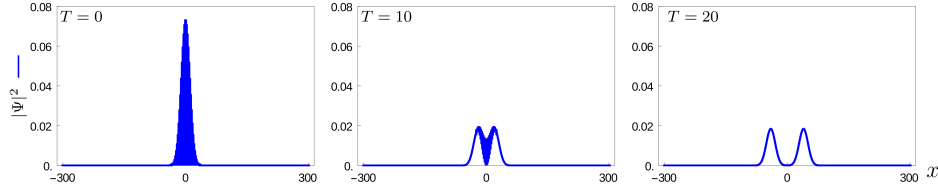


Figura 3.3: Evolución temporal del paquete de ondas inicial para los parámetros  $k = \pi/2$ ,  $\theta = 0$ ,  $N = 602$ ,  $x_0 = 0$ ,  $\sigma_0^2 = 117$  para  $\mu = 0$ .

Lo que se observa en el rango de  $[\pi, 2\pi]$  es simplemente el resultado de hacer el cambio:  $k \rightarrow -k$ .

Comenzaremos revisando los casos de  $\mu = 0$  que se muestran en la primer columna de la fig. 3.6 y primero analizaremos el comportamiento de  $\langle \hat{P}_+ \rangle$ . Vemos que la recta  $k = \pi/2$  define dos regiones; para valores menores de  $k$ , la probabilidad de obtener un estado de energía positiva es prácticamente nula, mientras que para valores mayores esta es prácticamente 1. Es decir que al atravesar el valor  $k = \pi/2$  hay una transición súbita de todos los estados de la banda inferior a la superior. Esto es de esperarse ya que es justamente en este punto donde las bandas exhiben degeneración y en el caso  $\mu \neq 0$  donde se encuentra la brecha entre las mismas. Adicionalmente sabemos que la pendiente de la transición esta relacionada a  $\sigma_0^2$ , ya que esta última, controla qué tan localizado se encuentra el paquete asociado en el espacio de momentos, vía un principio de incertidumbre.

Continuando, vemos que la transición aminora en los valores extremales  $\theta = 0, \pi/2$  donde la función de onda se compone a partes iguales de estados de energía positiva y negativa independientemente del valor de  $k$ . En el segundo renglón de la fig. 3.6, es posible ver que para el valor central  $\theta = \pi/4$  las velocidades de los paquetes, siguen exactamente la tendencia descrita por la relación de dispersión y la velocidad de grupo

$$E^\pm(k) = E_0 \pm 2\Delta \cos(k) \Rightarrow v_g = \frac{dE^\pm}{dk} = \mp 2\Delta \sin(k), \quad (3.78)$$

exhibiendo un máximo como es esperado en el punto de Dirac. Esta tendencia se respeta, aunque se atenúa progresivamente al aumentar o disminuir  $\theta$  hasta alcanzar velocidades completamente nulas en los valores extremales. En la fig. 3.3 el propagador numérico revela, que esto

se debe a que en estos puntos los paquetes de onda, siempre se disgregan en dos paquetes que viajan con velocidades opuestas. Estos paquetes contrapropagantes, a su vez presentan una velocidad y composición de estados  $|E_{\pm}\rangle$  distintas, de acuerdo a la elección de  $k$ , correspondiendo la velocidad máxima de estos de nuevo en el punto  $k = \pi/2$ .

Si observamos el tercer renglón de la fig. 3.6, es justamente en estos puntos que se observa la difusión máxima del paquete. Mientras tanto en los valores centrales de  $\theta$ , al encontrarse la mayoría de las componentes viajando en la misma dirección, el paquete total casi no exhibe ensanchamiento.

Para los casos  $\mu \neq 0$  en la segunda columna, vemos que  $v$ ,  $\mathcal{D}$  y  $\langle \hat{P}_+ \rangle$  preservan aproximadamente la estructura general de sus contra-partes, sólo que la simetría que exhibía el eje  $\theta$  se ha roto, adquiriendo una especie de desfase alrededor del valor  $\theta = \pi/4$ .

En el caso del contenido probabilístico, para  $k < \pi/2$  vemos que la región de mínima probabilidad se ha movido hacia abajo con respecto del caso  $\mu = 0$ , mientras que para  $k > \pi/2$  la región de máxima probabilidad se ha movido hacia arriba. Podemos ver que para  $\theta = 0$  la presencia de estados de energía positiva en el paquete de ondas cae y de hecho en  $k = \pi/2$  es totalmente nula. En  $\theta = \pi/2$  se observa exactamente lo opuesto, con el paquete completamente compuesto por estados de energía positiva en  $k = \pi/2$ . Como se puede observar en el segundo y tercer renglón, esta asimetría repercute tanto en la velocidad como en la difusión de los paquetes, ya que justamente en las regiones de mínima y máxima probabilidad, es donde estos exhiben mayor velocidad y menor difusión.

Este hecho sugiere, que para el caso  $\mu \neq 0$  siempre que tengamos presencia de componentes de ambas bandas en el paquete, estas se van a propagar invariablemente en direcciones contrarias. En la fig. 3.4 por medio del propagador, es posible ver que este hecho es en general cierto. También vale la pena notar que tanto la velocidad como la difusión, prácticamente se anulan en la recta  $k = \pi/2$ . Para todo valor de  $\theta$  podemos ver del propagador en la fig. 3.5 que el paquete de onda completo en efecto se queda estático en su posición inicial, exhibiendo difusión lenta.

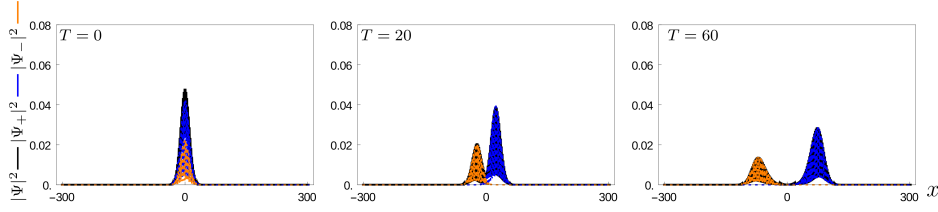


Figura 3.4: Evolución temporal del paquete de ondas inicial para los parámetros  $k = 0.55\pi$ ,  $\theta = 0.2\pi$ ,  $N = 602$ ,  $x_0 = 0$ ,  $\sigma_0^2 = 117$  para  $\mu = 0.4$ .

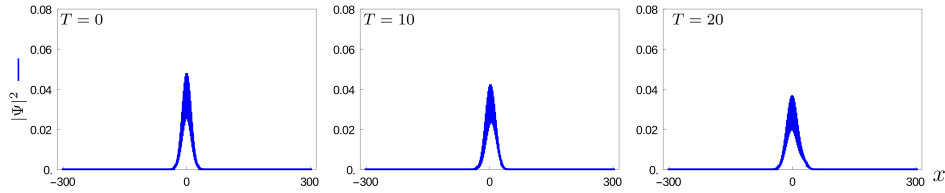


Figura 3.5: Evolución temporal del paquete de ondas inicial para los parámetros  $k = \pi/2$ ,  $\theta = 0.2\pi$ ,  $N = 602$ ,  $x_0 = 0$ ,  $\sigma_0^2 = 117$  para  $\mu = 0.4$ .

### 3.5 Término de Zitterbewegung y decaimiento de la amplitud para tiempos largos en la aproximación de fase estacionaria

Comenzaremos esta sección recordando el término de Zitterbewegung de la ecuación (3.62)

$$\hat{x}_{zitt}(t) \equiv \left( \hat{\alpha}(0) - \frac{\Delta^2((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2) \otimes I_{2 \times 2}}{i(E_0 - \hat{H})} \right) \frac{e^{2i(E_0 - \hat{H})t} - I}{2i(E_0 - \hat{H})}. \quad (3.79)$$

Como ya se mencionó anteriormente, este término solo tiene efecto en el movimiento del paquete de ondas cuando están presentes componentes de ambas bandas en su composición. En otras palabras, esto quiere decir que

$$\hat{P}_s \left( \hat{\alpha}(0) - \frac{\Delta^2((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2) \otimes I_{2 \times 2}}{i(E_0 - \hat{H})} \right) \frac{e^{2i(E_0 - \hat{H})t} - I}{2i(E_0 - \hat{H})} \hat{P}_s = 0. \quad (3.80)$$

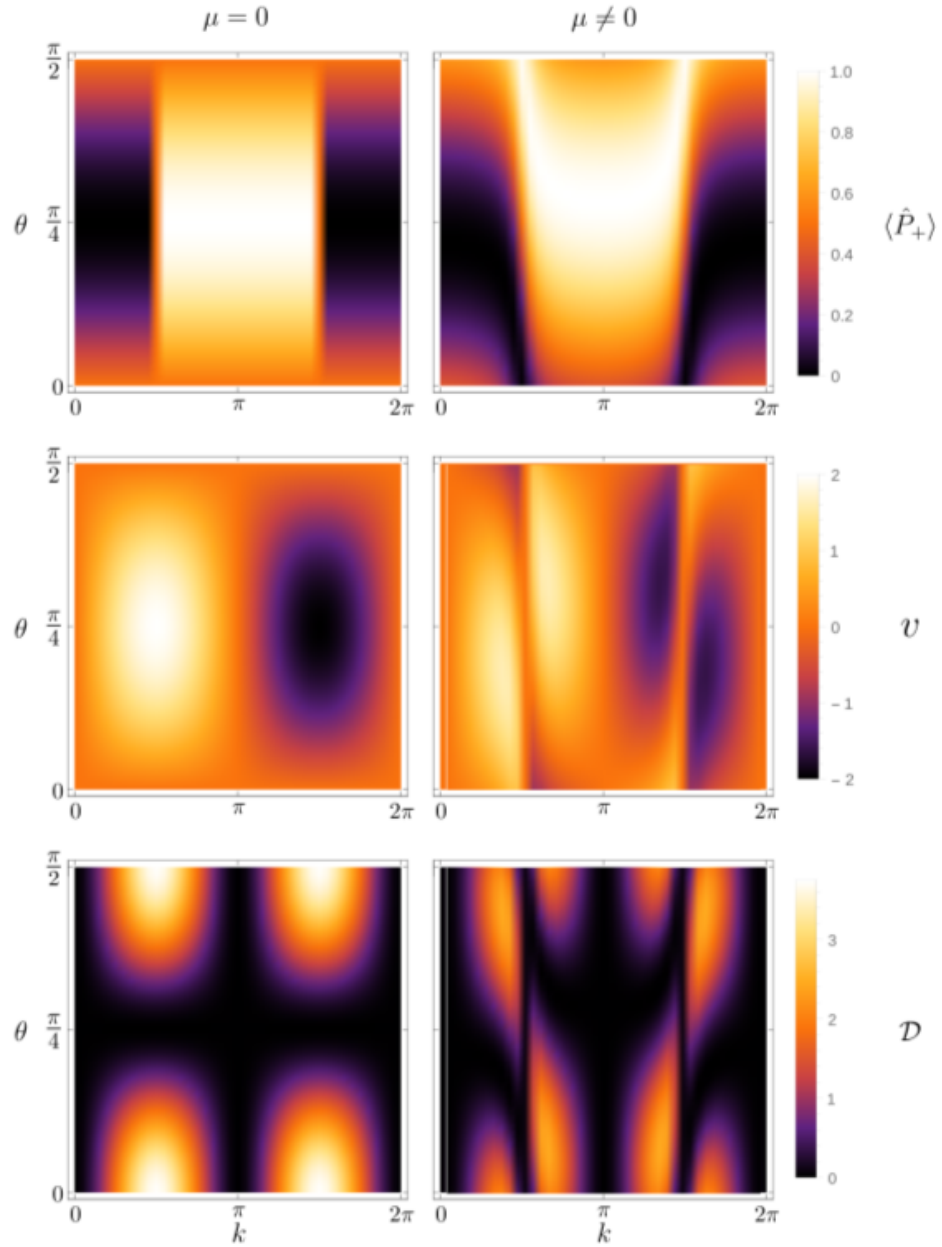


Figura 3.6: Contenido probabilístico total de estados de energía positiva  $\langle \hat{P}_+ \rangle$ , velocidad  $v$  y coeficiente de difusión  $\mathcal{D}$  del paquete de ondas inicial en función de  $k$  y  $\theta$ , para los casos  $\mu = 0$  y  $\mu = 0.4$ . Los parámetros utilizados para los cálculos numéricos fueron:  $N = 602$ ,  $x_o = 200$ ,  $\sigma_o^2 = 300$ .

Para mostrar que esto en efecto se cumple, será conveniente definir proyectores sobre cada estado energético  $\hat{\Gamma}_{k,s} = |k,s\rangle\langle k,s|$  de modo que

$$\hat{P}_s = \sum_k \hat{\Gamma}_{k,s}. \quad (3.81)$$

Ahora, vale la pena notar que

$$\hat{H}\hat{P}_s = \sum_k E^s(k)\hat{\Gamma}_{k,s} \quad (3.82)$$

y por tanto es fácil ver que  $\hat{H}$  y  $\hat{P}_s$  conmutan. Continuando, calculamos el siguiente operador

$$\begin{aligned} \hat{P}_s[\hat{H}\hat{P}_s, \hat{\alpha}]\hat{P}_s &= \sum_{ijk} E^s(j)\hat{\Gamma}_{i,s}[\hat{\Gamma}_{j,s}, \hat{\alpha}]\hat{\Gamma}_{k,s} = \sum_{ijk} E^s(j)\hat{\Gamma}_{i,s}(\hat{\Gamma}_{j,s}\hat{\alpha} - \hat{\alpha}\hat{\Gamma}_{j,s})\hat{\Gamma}_{k,s} \\ &= \sum_{ijk} E^s(j)(\delta_{ij}|i,s\rangle\langle j,s|\hat{\alpha}\hat{\Gamma}_{k,s} - \hat{\Gamma}_{i,s}\hat{\alpha}\delta_{jk}|j,s\rangle\langle k,s|) \\ &= \sum_i E^s(i)(\hat{\Gamma}_{i,s}\hat{\alpha}\hat{\Gamma}_{i,s} - \hat{\Gamma}_{i,s}\hat{\alpha}\hat{\Gamma}_{i,s}) = 0. \end{aligned} \quad (3.83)$$

Por otro lado, utilizando las propiedades del conmutador vemos que también equivale a

$$\begin{aligned} \hat{P}_s[\hat{H}\hat{P}_s, \hat{\alpha}]\hat{P}_s &= \hat{P}_s(\hat{H}[\hat{P}_s, \hat{\alpha}] + [\hat{H}, \hat{\alpha}]\hat{P}_s)\hat{P}_s \\ &= \hat{P}_s[\hat{H}, \hat{\alpha}]\hat{P}_s + \sum_{ijk} E^s(i)\hat{\Gamma}_{i,s}[\hat{\Gamma}_{j,s}, \hat{\alpha}]\hat{\Gamma}_{k,s} \end{aligned} \quad (3.84)$$

y por la ecuación (3.83) vemos que el último término del lado derecho es idénticamente cero. Esto nos lleva a concluir finalmente que

$$\hat{P}_s[\hat{H}, \hat{\alpha}]\hat{P}_s = 0. \quad (3.85)$$

De la ecuación (3.60) es inmediato ver que

$$[\hat{H}, \hat{\alpha}] = 2i\Delta^2((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2) \otimes I_{2 \times 2} + 2\hat{\alpha}(E_0 - \hat{H}) \quad (3.86)$$

y recordando que  $\hat{H}$  y  $\hat{P}_s$  conmutan tomamos la ecuación (3.85) y multiplicamos por la derecha con el factor

$$\frac{e^{2i(E_0 - \hat{H})t} - I}{4i(E_0 - \hat{H})^2} \quad (3.87)$$

con lo que finalmente obtenemos (3.80) y por tanto queda probado que el término de Zitterbewegung se desvanece en presencia de componentes

de una sola banda. Aunque no es posible mostrarlo en una figura, es importante señalar que las animaciones del propagador numérico verifican que es justamente en el traslape espacial entre componentes de energía positiva y negativa donde el paquete de ondas total exhibe movimiento tremulante y a medida que ambas componentes se separan el segmento oscilante del paquete disminuye hasta desaparecer.

Ahora queremos obtener el valor esperado del término de Zitterbewegung. Antes será conveniente expresar la función de onda inicial en términos de la eigenbase:

$$|\psi_0\rangle = \sum_n a_n |n\rangle = \sum_s \sum_k |k, s\rangle \langle k, s| \sum_n a_n |n\rangle = \sum_s \sum_k \psi_{k,s} |k, s\rangle, \quad (3.88)$$

donde ha sido definido  $\psi_{k,s} \equiv \sum_n a_n \langle k, s|n\rangle$ . Hecho esto, calculamos

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}_{zitt}(t) \rangle &= \left\langle \left( \hat{\alpha}(0) - \frac{\Delta^2((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2) \otimes I_{2 \times 2}}{i(E_0 - \hat{H})} \right) \frac{e^{2i(E_0 - \hat{H})t} - I}{2i(E_0 - \hat{H})} \right\rangle \\ &= \left\langle \left( \hat{\alpha}(0) - \frac{\Delta^2((\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2)}{i(E_0 - \hat{H})} \right) \sum_s \sum_k |k, s\rangle \langle k, s| \frac{e^{2i(E_0 - \hat{H})t} - I}{2i(E_0 - \hat{H})} \right\rangle \\ &= \sum_s \sum_k \left( \langle \psi_0 | \hat{\alpha}(0) | k, s \rangle - \langle \psi_0 | k, s \rangle \frac{\Delta^2(e^{2ik} - e^{-2ik})}{i(E_0 - E^s(k))} \right) \\ &\quad \times \frac{e^{2i(E_0 - E^s(k))t} - 1}{2i(E_0 - E^s(k))} \langle k, s | \psi_0 \rangle \\ &= \sum_{s,k} \langle \psi_0 | 2i\Delta \begin{pmatrix} 0 & -\hat{T}^2 \\ (\hat{T}^\dagger)^2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{k,s}^+ \\ \phi_{k,s}^- \end{pmatrix} \psi_{k,s} \frac{e^{i(E_0 - E^s(k))t} \sin((E_0 - E^s(k))t)}{(E_0 - E^s(k))} \\ &\quad - \sum_{s,k} |\psi_{k,s}|^2 \frac{2\Delta^2 \sin(2k)}{(E_0 - E^s(k))} \frac{e^{i(E_0 - E^s(k))t} \sin((E_0 - E^s(k))t)}{(E_0 - E^s(k))} \\ &= 2i\Delta \sum_{s,k,s',k'} \psi_{k',s'}^* (e^{2ik} (\phi_{k',s'}^-)^* \phi_{k,s}^+ - e^{-2ik} (\phi_{k',s'}^+)^* \phi_{k,s}^-) \psi_{k,s} \\ &\quad \times \frac{e^{i(E_0 - E^s(k))t} \sin((E_0 - E^s(k))t)}{(E_0 - E^s(k))} \\ &\quad - 2\Delta^2 \sum_{s,k} |\psi_{k,s}|^2 \frac{e^{i(E_0 - E^s(k))t} \sin((E_0 - E^s(k))t) \sin(2k)}{(E_0 - E^s(k))^2}. \quad (3.89) \end{aligned}$$

Como ya se ha mencionado antes,  $k \in [0, \pi]$  y la partición del intervalo viene dada por el tamaño de la cadena  $N$ . Si tomamos el límite  $N \rightarrow \infty$ ,

podemos sustituir las sumas sobre  $k$  por integrales

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}_{zitt}(t) \rangle &= 2i\Delta \sum_{s,s'} \int_0^\pi f(k, s, s') e^{i(E_o - E^s(k))t} \sin((E_o - E^s(k))t) dk \\ &\quad - 2\Delta^2 \sum_s \int_0^\pi g(k, s) e^{i(E_o - E^s(k))t} \sin((E_o - E^s(k))t) dk. \end{aligned} \quad (3.90)$$

Las funciones  $f$  y  $g$  han sido definidas como

$$f(k, s, s') = \int_0^\pi \frac{\Psi_{k',s'}^* (e^{2ik}(\phi_{k',s'}^-)^* \phi_{k,s}^+ - e^{-2ik}(\phi_{k',s'}^+)^* \phi_{k,s}^-) \Psi_{k,s}}{(E_o - E^s(k))} dk', \quad (3.91)$$

$$g(k, s) = \frac{|\psi_{k,s}|^2 \sin(2k)}{(E_o - E^s(k))^2}. \quad (3.92)$$

Las integrales oscilatorias presentes en  $\langle \hat{x}_{zitt}(t) \rangle$  no son sencillas de evaluar pero debido a su forma, para  $t \gg 1$  podemos utilizar la aproximación de fase estacionaria para estimar su valor. Por lo tanto, primero buscamos los puntos de fase estacionaria, i.e. los  $k^*$  tales que

$$\frac{d(E_o - E^s(k))}{dk} = \frac{4s\Delta^2 \cos(k) \sin(k)}{\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 \cos^2(k)}} = 0. \quad (3.93)$$

Esta condición se cumple cuando  $k^* = 0, \pi/2, \pi$ . Para el punto de Dirac  $k^* = \pi/2$ , vemos que la frecuencia de oscilación es  $2(E_o - E^s(\pi/2)) = -2s\mu$ , mientras que para  $k^* = 0, \pi$  la frecuencia es  $-2s\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2}$ . Además, en los puntos  $k^*$  la función  $g(k, s)$  se anula. Habiendo hecho estas observaciones, el termino de Zitterbewegung queda bien aproximado por

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}_{zitt}(t) \rangle &\approx 2i\Delta \sqrt{\frac{2\pi}{t}} \sum_{s,s'} |(E^s(\pi/2))''|^{-\frac{1}{2}} f(\pi/2, s, s') e^{-2is\mu t} \\ &\quad + \frac{1}{2} |(E^s(0))''|^{-\frac{1}{2}} f(0, s, s') e^{-2is\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2}t} \\ &\quad + \frac{1}{2} |(E^s(\pi))''|^{-\frac{1}{2}} f(\pi, s, s') e^{-2is\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2}t}, \end{aligned} \quad (3.94)$$

$$(3.95)$$

donde las contribuciones de los puntos  $k^* = 0, \pi$  van acompañados de factores  $1/2$  ya que estos se encuentran en los extremos del intervalo de integración. La característica importante a notar de la ecuación anterior es que la amplitud del Zitterbewegung decae como  $\sqrt{1/t}$  para tiempos largos. Este hecho lo verificamos por medio del propagador numérico



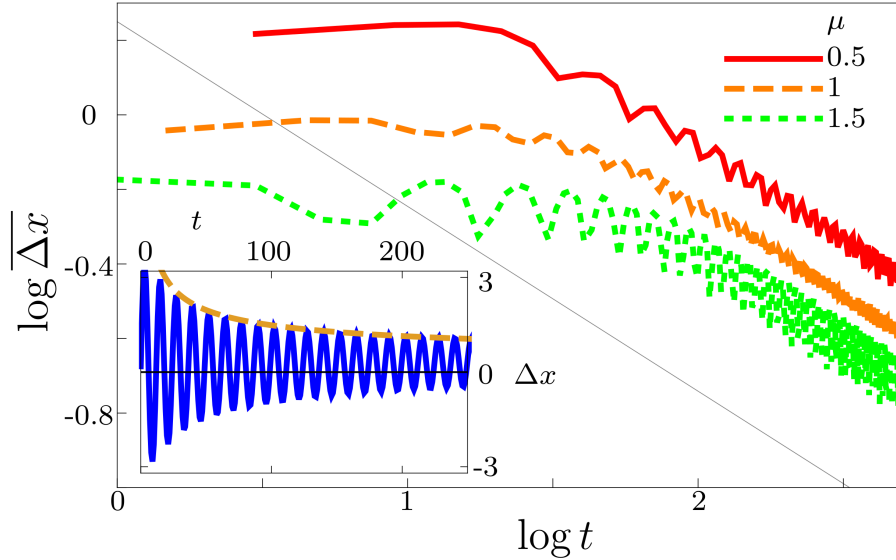


Figura 3.7: Zitterbewegung del paquete de ondas. El panel de la izquierda muestra las oscilaciones de  $\langle \hat{x}_{zitt}(t) \rangle$  al haber ya removido los términos de propagación balística. La curva envolvente que se muestra en amarillo, representa el decaimiento de amplitud predicho por la aproximación de fase estacionaria. En el panel de la derecha podemos ver en escala log-log la misma tasa de decaimiento de amplitud del Zitterbewegung para 3 valores distintos de  $\mu$ .  $\overline{\Delta x}$  representa el promedio de los máximos de amplitud en las oscilaciones. Los parámetros utilizados para los cálculos numéricos fueron:  $N = 1402$ ,  $k = .49\pi$ ,  $x_o = 700$ ,  $\sigma_o^2 = 117$ .

Tabla 3.1: Potencia de decaimiento y frecuencia del Zitterbewegung

$\mu$	ajuste lineal	frecuencia
0.5	$\log \overline{\Delta x} = 0.9086223487 - 0.5001169897 \log t$	1.0012021531
1	$\log \overline{\Delta x} = 0.7632265934 - 0.4995604197 \log t$	2.0022839983
1.5	$\log \overline{\Delta x} = 0.6437524481 - 0.4975382562 \log t$	3.0009966860

como se observa en la fig. 3.7.

Para ser más específicos, la potencia de decaimiento numérica para cada valor de  $\mu$  la obtenemos de realizar un ajuste lineal a las curvas log-log de la figura fig. 3.7 después de haber descartado las amplitudes de tiempos tempranos. Estos ajustes así como las frecuencias de oscilación numéricas se muestran en la tabla 3.1, donde podemos ver claramente que en cada caso la frecuencia dominante es  $2\mu$  y por tanto el término que más contribuye en la aproximación de fase estacionaria es el asociado al punto de Dirac.

## Capítulo 4

# Potencial Polarizador

### 4.1 Transformación de Foldy-Wouthuysen para el Hamiltoniano de amarre fuerte y su límite continuo

Comenzamos esta sección recordando el Hamiltoniano de nuestro sistema

$$\hat{H} = E_o I + \Delta \sigma_x \left( 1 + \frac{\hat{T}^2 + (\hat{T}^\dagger)^2}{2} \right) + \Delta \sigma_y \left( \frac{(\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2}{2i} \right) + \mu \sigma_z. \quad (4.1)$$

De nuevo, gracias a su estructura tipo Dirac, podemos hacer uso de una herramienta bien conocida, la transformación de Foldy-Wouthuysen. Si identificamos a cada matriz de Pauli con un eje cartesiano, podemos representar a  $\hat{H}$  como un vector en un espacio espinorial tal como se muestra en la fig. 4.1, donde A y B han sido definidos como

$$A \equiv \Delta \left( 1 + \frac{\hat{T}^2 + (\hat{T}^\dagger)^2}{2} \right), B \equiv \Delta \left( \frac{(\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2}{2i} \right). \quad (4.2)$$

Entonces por medio de rotaciones, podemos construir una transformación unitaria que nos lleve a una imagen donde  $\hat{H}$  es diagonal por bloques, es decir, una imagen donde  $\hat{H}$  es paralelo a  $\sigma_z$  y las dinámicas de las soluciones negativas y positivas se encuentren completamente desacopladas. Para lograr esto, primero aplicaremos una rotación por un ángulo  $-\phi$  alrededor del eje  $z$  y luego una rotación por un ángulo  $\theta$  alrededor del eje  $y$ . Dada la naturaleza del espacio, es propicio notar que ambos ángulos  $\theta$  y  $\phi$  no son escalares, sino mas bien operadores y tal como sugiere la fig. 4.1 podemos calcular algunas de sus funciones

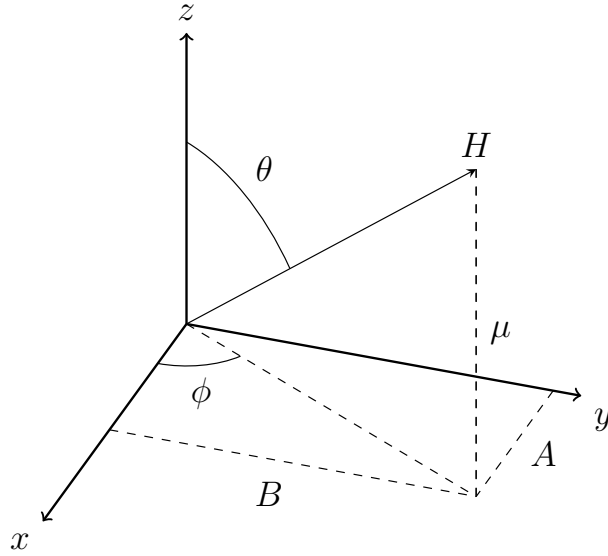


Figura 4.1: Visualización vectorial del Hamiltoniano de amarre fuerte. Aquí se puede apreciar la relación entre los ángulos y los operadores A, B y  $\mu$ .

trigonométricas de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \cos \phi &= \frac{A}{\sqrt{|A|^2 + |B|^2}} = \frac{\Delta \left( I + \frac{\hat{T}^2 + (\hat{T}^\dagger)^2}{2} \right)}{\sqrt{|\Delta \left( 1 + \frac{\hat{T}^2 + (\hat{T}^\dagger)^2}{2} \right)|^2 + |\Delta \left( \frac{(\hat{T}^\dagger)^2 - \hat{T}^2}{2i} \right)|^2}} \\ &= \frac{I + \frac{\hat{T}^2 + (\hat{T}^\dagger)^2}{2}}{\sqrt{2 + \hat{T}^2 + (\hat{T}^\dagger)^2}} = \frac{1}{2} \sqrt{(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2} = \frac{\hat{T} + \hat{T}^\dagger}{2}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \sin \phi &= \sqrt{1 - \cos^2 \phi} = \sqrt{1 - \left( \frac{\hat{T} + \hat{T}^\dagger}{2} \right)^2} = \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{1}{4}(\hat{T}^2 + (\hat{T}^\dagger)^2)} \\ &= \sqrt{\left( \frac{\hat{T} - \hat{T}^\dagger}{2i} \right)^2} = \frac{\hat{T} - \hat{T}^\dagger}{2i}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\cos \theta = \frac{\mu}{\sqrt{|A|^2 + |B|^2 + \mu^2}} = \frac{\mu}{\sqrt{\Delta^2 (\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}}, \quad (4.5)$$

$$\sin \theta = \sqrt{1 - \frac{\mu^2}{\Delta^2 (\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} = \frac{\Delta (\hat{T} + \hat{T}^\dagger)}{\sqrt{\Delta^2 (\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}}. \quad (4.6)$$

Para una rotación de un ángulo  $-\phi$ , alrededor del eje  $z$  sabemos que el operador indicado es

$$U_z = e^{\frac{-i\sigma_z(-\phi)}{2}} = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

y utilizando las ecuaciones (4.3) y (4.4) podemos ver que

$$e^{\pm \frac{i\phi}{2}} = \sqrt{\cos \phi \pm i \sin \phi} = \sqrt{\frac{\hat{T} + \hat{T}^\dagger}{2} \pm i \frac{\hat{T} - \hat{T}^\dagger}{2i}}, \quad (4.8)$$

con lo que se obtiene

$$U_z = \begin{pmatrix} T^{\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & (T^\dagger)^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Ahora, para una rotación de un ángulo  $\theta$  alrededor del eje  $y$  tenemos

$$U_y = e^{\frac{-i\sigma_y\theta}{2}} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1+\cos \theta}{2}} & -\sqrt{\frac{1-\cos \theta}{2}} \\ \sqrt{\frac{1-\cos \theta}{2}} & \sqrt{\frac{1+\cos \theta}{2}} \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

y utilizando la ecuación (4.5), resulta

$$U_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{\mu}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}}} & -\sqrt{1 - \frac{\mu}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}}} \\ \sqrt{1 - \frac{\mu}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}}} & \sqrt{1 + \frac{\mu}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}}} \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Finalmente, haciendo la composición de ambas rotaciones obtenemos la transformación de Foldy-Wouthuysen

$$\begin{aligned} U_{FW} &= \begin{pmatrix} e^{\frac{i\phi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} & -e^{\frac{i\phi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{-\frac{i\phi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} & e^{-\frac{i\phi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{\mu}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}}} \hat{T}^{\frac{1}{2}} & -\sqrt{1 - \frac{\mu}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}}} \hat{T}^{\frac{1}{2}} \\ \sqrt{1 - \frac{\mu}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}}} (\hat{T}^\dagger)^{\frac{1}{2}} & \sqrt{1 + \frac{\mu}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}}} (\hat{T}^\dagger)^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Por medio de esta última, podemos llevar al Hamiltoniano a una nueva imagen  $\hat{H}_{FW} = U_{FW}^\dagger \hat{H} U_{FW}$ , donde en efecto es diagonal por bloques. Para

ver que esto es cierto, a continuación calculamos sus elementos de matriz

$$\begin{aligned}
(\hat{H}_{\text{FW}})_{1,1} &= (U_{\text{FW}})_{1,1}^* (\hat{H})_{1,1} (U_{\text{FW}})_{1,1} + (U_{\text{FW}})_{1,1}^* (\hat{H})_{1,2} (U_{\text{FW}})_{2,1} \\
&\quad + (U_{\text{FW}})_{2,1}^* (\hat{H})_{2,1} (U_{\text{FW}})_{1,1} + (U_{\text{FW}})_{2,1}^* (\hat{H})_{2,2} (U_{\text{FW}})_{2,1} \\
&= \left( 1 + \frac{\mu}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} \right) \frac{(E_o + \mu)}{2} \\
&\quad + \hat{T}^\dagger \sqrt{1 - \frac{\mu^2}{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} \frac{\Delta(I + \hat{T}^2)}{2} \\
&\quad + \hat{T} \sqrt{1 - \frac{\mu^2}{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} \frac{\Delta(I + (\hat{T}^\dagger)^2)}{2} \\
&\quad + \left( 1 - \frac{\mu}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} \right) \frac{(E_o - \mu)}{2} \\
&= E_o + \frac{\mu^2}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} + \sqrt{1 - \frac{\mu^2}{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} \Delta(\hat{T} + \hat{T}^\dagger) \\
&= E_o + \sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}. \tag{4.13}
\end{aligned}$$

Ahora obtenemos

$$\begin{aligned}
(\hat{H}_{\text{FW}})_{2,1} &= -\sqrt{1 - \frac{\mu^2}{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} \frac{(E_o + \mu)}{2} \\
&\quad - \left( 1 - \frac{\mu}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} \right) \frac{\Delta(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)}{2} \\
&\quad + \left( 1 + \frac{\mu}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} \right) \frac{\Delta(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)}{2} \\
&\quad + \sqrt{1 - \frac{\mu^2}{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} \frac{(E_o - \mu)}{2} \\
&= -\mu \sqrt{1 - \frac{\mu^2}{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} \\
&\quad + \frac{\mu \Delta(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} = 0. \tag{4.14}
\end{aligned}$$

De manera análoga se obtiene que

$$(\hat{H}_{\text{FW}})_{1,2} = 0, \quad (4.15)$$

$$(\hat{H}_{\text{FW}})_{2,2} = E_o - \sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}, \quad (4.16)$$

con lo que finalmente llegamos a

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{FW}} &= U_{\text{FW}}^\dagger \hat{H} U_{\text{FW}} \\ &= \begin{pmatrix} E_o + \sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2} & 0 \\ 0 & E_o - \sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2} \end{pmatrix} \\ &= E_o + \sigma_z \sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

donde claramente el bloque superior esta asociado a las energías positivas, mientras que el inferior a las negativas. Como consecuencia de esta estructura totalmente desacoplada, vamos a mostrar que es realmente sencillo obtener los eigenvalores y eigenvectores de  $\hat{H}_{\text{FW}}$ . Dado que ambos bloques solo dependen de los operadores de traslación, si definimos los espinores de Bloch

$$|k, +\rangle_{\text{FW}} = \begin{pmatrix} \sum \sqrt{\frac{2}{N}} e^{ikn} |n\rangle \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |k\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

$$|k, -\rangle_{\text{FW}} = \begin{pmatrix} 0 \\ \sum \sqrt{\frac{2}{N}} e^{ikn} |n\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ |k\rangle \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

es inmediato ver que

$$\hat{H}_{\text{FW}}|k, s\rangle_{\text{FW}} = (E_o + s\sqrt{4\Delta^2 \cos^2 k + \mu^2})|k, s\rangle_{\text{FW}} = E^s(k)|k, s\rangle_{\text{FW}} \quad (4.20)$$

y los eigenvalores coinciden con los obtenidos anteriormente (3.47). Además si notamos que

$$\begin{aligned} U_{\text{FW}} \hat{H}_{\text{FW}} |k, s\rangle_{\text{FW}} &= U_{\text{FW}} U_{\text{FW}}^\dagger \hat{H} U_{\text{FW}} |k, s\rangle_{\text{FW}} \\ &= \hat{H} (U_{\text{FW}} |k, s\rangle_{\text{FW}}) \\ &= E^s(k) (U_{\text{FW}} |k, s\rangle_{\text{FW}}), \end{aligned} \quad (4.21)$$

esto implica que  $U_{\text{FW}}|k, s\rangle_{\text{FW}}$  son eigenvectores de  $\hat{H}$  y de nuevo es fácil ver que en efecto estos coinciden con (3.57). Adicionalmente esto explica la elección de fase realizada previamente (3.58). Gracias a la transformación de Foldy-Wouthuysen también es posible encontrar la forma

explícita de los proyectores de estados de energía positiva y negativa

$$\begin{aligned}
\hat{P}_s &= \sum_k |k, s\rangle \langle k, s| = \sum_k U_{\text{FW}} |k, s\rangle_{\text{FW}} \langle k, s|_{\text{FW}} U_{\text{FW}}^\dagger \\
&= \sum_k U_{\text{FW}} \left( |k\rangle \langle k| \otimes \frac{1}{2} (I + s\sigma_z) \right) U_{\text{FW}}^\dagger = U_{\text{FW}} \frac{1}{2} (I + s\sigma_z) U_{\text{FW}}^\dagger \\
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{s\mu}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} & s\sqrt{1 - \frac{\mu^2}{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} \hat{T} \\ s\sqrt{1 - \frac{\mu^2}{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} \hat{T}^\dagger & 1 - \frac{s\mu}{\sqrt{\Delta^2(\hat{T} + \hat{T}^\dagger)^2 + \mu^2}} \end{pmatrix}. \quad (4.22)
\end{aligned}$$

Finalmente para ver la forma que toma la transformación FW en el límite de Dirac, recordamos que en este caso el Hamiltoniano se ve como (3.72) y dado que desaparece el término asociado a  $\sigma_x$ , basta con hacer una sola rotación alrededor de ese mismo eje

$$\begin{aligned}
U_{\text{FW}} &= e^{-\frac{i\sigma_x\theta}{2}} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{\mu}{\sqrt{\mu^2 + \Delta^2 \hat{p}^2}}} & -i \sqrt{1 - \frac{\mu}{\sqrt{\mu^2 + \Delta^2 \hat{p}^2}}} \\ -i \sqrt{1 - \frac{\mu}{\sqrt{\mu^2 + \Delta^2 \hat{p}^2}}} & \sqrt{1 + \frac{\mu}{\sqrt{\mu^2 + \Delta^2 \hat{p}^2}}} \end{pmatrix}. \quad (4.23)
\end{aligned}$$

Esta, naturalmente, diagonaliza en bloques de energía positiva y negativa a su respectivo Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\text{FW}} &= U_{\text{FW}}^\dagger \begin{pmatrix} E_o + \mu & -i\Delta\hat{p} \\ i\Delta\hat{p} & E_o - \mu \end{pmatrix} U_{\text{FW}} \\
&= \begin{pmatrix} E_o + \sqrt{\mu^2 + \Delta^2 \hat{p}^2} & 0 \\ 0 & E_o - \sqrt{\mu^2 + \Delta^2 \hat{p}^2} \end{pmatrix}. \quad (4.24)
\end{aligned}$$

## 4.2 Potencial polarizador y paquetes de onda compuestos

Como ya se mencionó anteriormente, la gran importancia de la imagen de Foldy-Wouthuysen recae en la posibilidad de ver completamente desacopladas las dinámicas de la banda superior e inferior. Una consecuencia inmediata de esto es la capacidad de poder introducir términos de interacción tales que afecten de manera diferente a los dos tipos de soluciones energéticas. La motivación principal de este trabajo es poder construir un filtro que nos permita separar espacialmente las componentes



de energía positiva, de las de energía negativa de un paquete de ondas arbitrario. En otras palabras lo que buscamos construir es un polarizador, en particular una barrera tal que refleje a las soluciones positivas mientras que permita pasar a las negativas. En la imagen FW la manera mas sencilla de conseguir esto, es introduciendo un potencial de la forma

$$V_{\text{FW}}(n) = \begin{pmatrix} V(n) & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{I + \sigma_z}{2} \otimes V(n) \quad (4.25)$$

Donde  $V(n)$  es de especificaciones arbitrarias, pero nosotros por simplicidad lo consideraremos de soporte acotado, siendo este un conjunto finito de barreras y pozos de potencial adyacentes en sitio.

$$V(n) = \sum_n v_n |n\rangle \langle n| \quad (4.26)$$

En particular para las simulaciones del propagador numérico, colocamos el conjunto de barreras y pozos en el centro de la cadena atómica y elegimos los valores

$$V(n) = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Ahora, para obtener el potencial completo en la imagen de Dirac, es necesario aplicar la transformación FW inversa

$$V_D = U_{\text{FW}} V_{\text{FW}}(n) U_{\text{FW}}^\dagger \quad (4.28)$$

$$= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{\frac{i\phi}{2}} V(n) \cos \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\phi}{2}} & \cos \frac{\theta}{2} e^{\frac{i\phi}{2}} V(n) \sin \frac{\theta}{2} e^{\frac{i\phi}{2}} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\phi}{2}} V(n) \cos \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\phi}{2}} & \sin \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\phi}{2}} V(n) \sin \frac{\theta}{2} e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Utilizando la completitud de la base de ondas de Bloch, podemos definir los factores

$$T_{n,j}^{s,s'}(\mu, \Delta) = \sum_k \exp \left[ ik \left( n - \frac{s'}{2} - j \right) \right] \sqrt{1 + \frac{s\mu}{\sqrt{4\Delta^2 \cos^2(k) + \mu^2}}}, \quad (4.30)$$

donde  $n, j$  son etiquetas de la base de posiciones y  $s, s' = \pm$ . Habiendo hecho esto, podemos ver que los elementos de matriz toman la forma

$$\begin{aligned}
\langle n|(V_D)_{1,1}|n'\rangle &= \frac{4}{N^2} \sum_j v_j \mathcal{I}_{n,j}^{+,+}(\mu, \Delta) (\mathcal{I}_{n',j}^{+,+}(\mu, \Delta))^*, \\
\langle n|(V_D)_{1,2}|n'\rangle &= \frac{4}{N^2} \sum_j v_j \mathcal{I}_{n,j}^{+,+}(\mu, \Delta) (\mathcal{I}_{n',j}^{-,-}(\mu, \Delta))^*, \\
\langle n|(V_D)_{2,1}|n'\rangle &= \frac{4}{N^2} \sum_j v_j \mathcal{I}_{n,j}^{-,-}(\mu, \Delta) (\mathcal{I}_{n',j}^{+,+}(\mu, \Delta))^*, \\
\langle n|(V_D)_{2,2}|n'\rangle &= \frac{4}{N^2} \sum_j v_j \mathcal{I}_{n,j}^{-,-}(\mu, \Delta) (\mathcal{I}_{n',j}^{-,-}(\mu, \Delta))^*. \quad (4.31)
\end{aligned}$$

Hemos visto que para un paquete de ondas de la forma (3.77) con  $\mu \neq 0$ , las componentes de energía positiva y negativa se propagan en direcciones opuestas. Esta es una condicionante adversa, ya que no nos permite probar la efectividad del polarizador. De hecho, lo único que necesitamos para separar las componentes es esperar. Por lo anterior, vamos a definir un nuevo paquete de ondas tal que retenga el perfil gaussiano antes utilizado y que además tenga ambas componentes energéticas viajando con la misma velocidad. Si recordamos la discusión realizada en la sección 3.4, junto con las fig. 3.4, fig. 3.5, fig. 3.6 vemos que al hacer el cambio  $k$  por  $-k$  en los paquetes de la forma (3.77), podemos conservar la composición probabilística de estos últimos, invirtiendo su velocidad total, lo que a su vez significa que invertimos las velocidades de las componentes energéticas individuales. Entonces la manera mas clara de definir el nuevo paquete de ondas es tomar estos dos paquetes con momentos opuestos y aplicarles proyectores de manera complementaria. Por simplicidad tomaremos  $\theta = \pi/4$ . Condensando lo anterior, el nuevo paquete de ondas queda definido en términos de los anteriores de la siguiente manera

$$|\Psi_0\rangle = \alpha \frac{\hat{P}_+ |\psi_0\rangle_{\frac{\pi}{4}, \kappa}}{\|\hat{P}_+ |\psi_0\rangle_{\frac{\pi}{4}, \kappa}\|} + \beta \frac{\hat{P}_- |\psi_0\rangle_{\frac{\pi}{4}, -\kappa}}{\|\hat{P}_- |\psi_0\rangle_{\frac{\pi}{4}, -\kappa}\|}, \quad (4.32)$$

donde  $\alpha$  y  $\beta$  son coeficientes que nos permiten controlar directamente el contenido de estados de las diferentes bandas presentes en el paquete de ondas, restringidos únicamente por  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Adicionalmente  $\kappa$  ha sido definido como anteriormente a partir del punto de Dirac  $\kappa = \delta - \frac{\pi}{2}$ .

Una vez definido el paquete de ondas apropiado, ponemos a prueba el potencial polarizador por medio del propagador numérico. En la fig. 4.2 se muestra como los paquetes se mueven de izquierda a derecha hasta

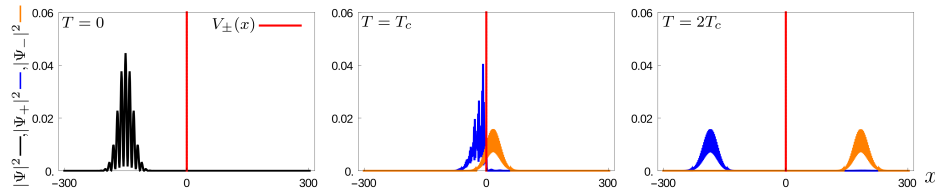


Figura 4.2: Evolución temporal del paquete de ondas al atravesar por el polarizador. La densidad de probabilidad completa se muestra en negro, mientras que la componente positiva en azul y la negativa en naranja. La dinámica es descrita en 3 pasos; la primera imagen corresponde a tiempos previos a la colisión. La segunda imagen muestra la interferencia producida por la colisión y finalmente, la tercera imagen muestra como las componentes han sido separadas y ahora se mueven en sentidos opuestos. El tiempo de colisión con el polarizador es  $T_c = N/2\Delta\kappa$ , los parámetros utilizados en la simulación numérica son:  $N = 602$ ,  $\kappa = -.4\pi$ ,  $\theta = \pi/4$ ,  $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$ ,  $x_o = -150$ ,  $\sigma_o^2 = 300$ ,  $\mu = .25$ .

alcanzar el polarizador centrado en el origen. Antes de alcanzarlo, el paquete exhibe una cantidad significativa de Zitterbewegung; éste se puede apreciar como una serie de oscilaciones montadas sobre el perfil gaussiano que se desplaza íntegro. Una vez que el paquete colisiona con el potencial, tal como se esperaba, las componentes de energía positiva son reflejadas, mientras que las de energía negativa son transmitidas. Cabe señalar dos cosas respecto de la fig. 4.2, primero el perfil del potencial ahí mostrado como una línea vertical, no coincide con el real y es más bien sólo una ayuda visual para enfatizar la naturaleza local del efecto de separación. En segundo término, aunque en la figura no se puede apreciar tan claramente, una exploración más minuciosa, revela que el paquete transmitido todavía exhibe un poco de Zitterbewegung. Esto quiere decir que la separación del paquete de ondas no es perfecta y que una pequeña porción de la componente positiva se alcanza a filtrar. Para cuantificar qué tanto de esta última logra atravesar y para caracterizar en general las capacidades de reflexión y transmisión del polarizador, será conveniente

definir los siguientes coeficientes

$$R_+ = \frac{|\hat{P}_+|\psi(t)\rangle|_i|^2}{|\alpha|^2}, \quad T_+ = \frac{|\hat{P}_+|\psi(t)\rangle|_d|^2}{|\alpha|^2}, \quad (4.33)$$

$$R_- = \frac{|\hat{P}_-|\psi(t)\rangle|_i|^2}{|\beta|^2}, \quad T_- = \frac{|\hat{P}_-|\psi(t)\rangle|_d|^2}{|\beta|^2}, \quad (4.34)$$

donde  $t \geq T_c$  y los subíndices  $i, d$  indican que la suma de probabilidades se hace sólo del lado izquierdo o derecho del polarizador respectivamente. Vale la pena notar que los coeficientes son complementarios, es decir  $R_\pm + T_\pm = 1$ , por lo que nosotros sólo enfocaremos nuestro análisis en  $R_+$  y  $T_-$ . En particular para el caso que se muestra en la fig. 4.2 encontramos que  $R_+ = 0.98943$  y  $T_- = 1$ .

### 4.3 Robustez del polarizador

Antes de proseguir con nuestro análisis de los coeficientes de reflexión y transmisión, vamos a hacer unas cuantas observaciones referentes al potencial polarizador. Recordamos que originalmente definimos matrices de permutación (3.43) que nos permitieron reescribir el Hamiltoniano del sistema como una ecuación de Dirac. Si le aplicamos la transformación inversa al polarizador, llegamos a la forma matricial del potencial que se muestra en la parte superior de la fig. 4.3. En esta imagen, la interpretación de los elementos de matriz, es la usual para la cadena atómica de nuestro sistema. Los elementos en la diagonal central representan las variaciones a las energías en sitio o potenciales en sitio, mientras que los elementos en la segunda, tercera y subsecuentes diagonales, representan los acoplamientos a primeros, segundos y subsecuentes vecinos respectivamente. El primer hecho a notar, es que aunque en la imagen FW, el potencial era de soporte compacto (4.27), aquí en la imagen original es completamente no local, ya que tiene términos no nulos a lo largo de toda la matriz. La forma alternante similar a un tablero de ajedrez se explica por los coeficientes (4.31) que fueron obtenidos para los bloques de sitios con índices par-par, impar-impar, impar-par y par-impar. Aún así, en la parte superior de la fig. 4.3 es posible ver que hay una región central de interacción bien definida donde los valores de los elementos de matriz del polarizador son de mayor magnitud que el resto. Contrastando con el potencial en la imagen FW, vemos que esta región central es cerca del doble de tamaño que la región no nula en la imagen FW, lo cual tiene sentido debido al plegamiento de la cadena en la transición a la

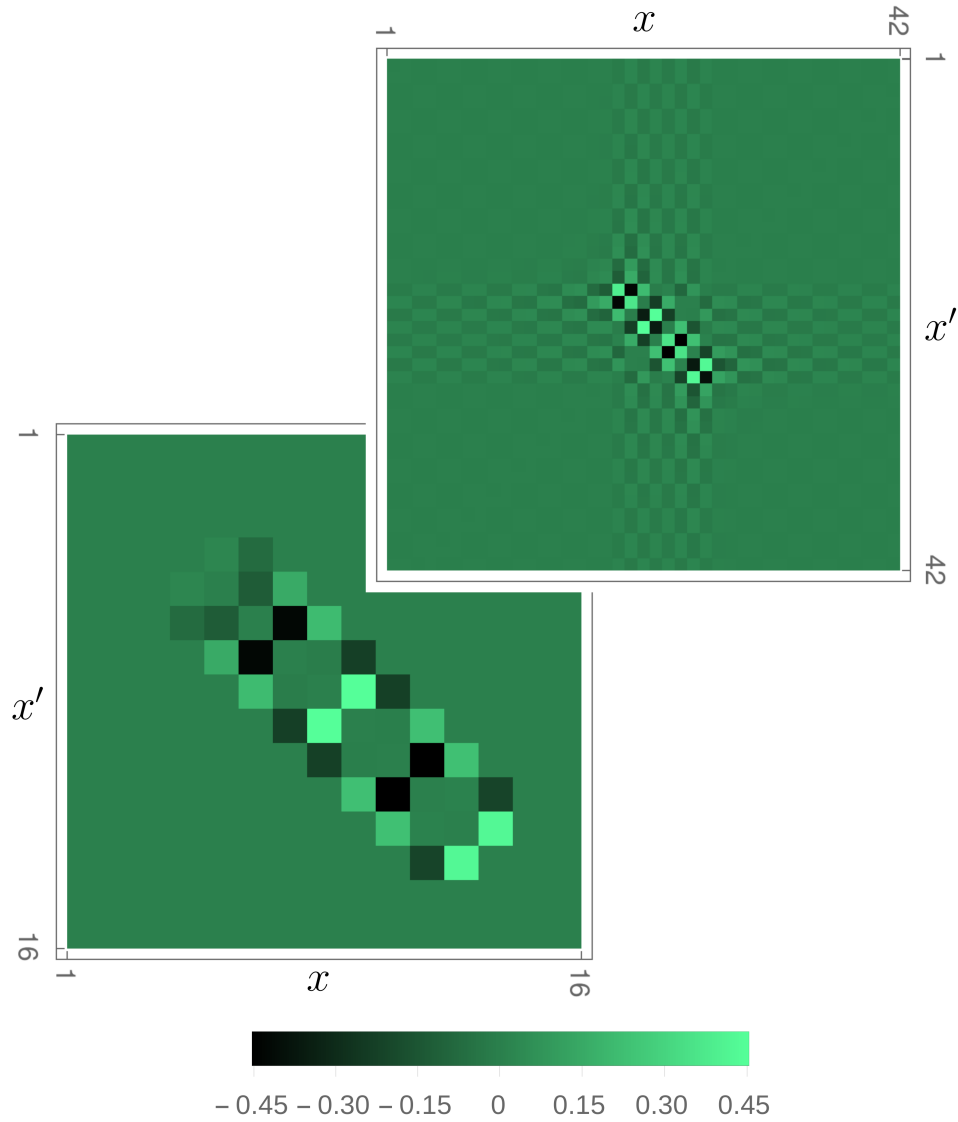


Figura 4.3: (Arriba) Forma matricial del potencial polarizador completo para  $\mu = 0.25$ . (Abajo) Forma matricial del potencial polarizador geométrico localizado para  $\mu = 0.00001$ . La longitud del potencial es  $\rho = 10$  y sólo se han considerado acoplamientos hasta segundos vecinos i.e.  $\chi = 2$ .

imagen de Dirac. Esto nos motiva a pensar que quizá los acoplamientos de orden mayor no juegan un papel tan significativo en la efectividad del polarizador.

Más aún, queremos conocer el comportamiento de las capacidades de reflexión y transmisión si sólo introducimos un número reducido de elementos de matriz no nulos, es decir, si aproximamos nuestro polarizador completo, por un polarizador localizado y de soporte compacto. Es de interés analizar estos casos reducidos, ya que si ambas capacidades se mantienen suficientemente robustas, la compacidad de estos potenciales haría posible implementarlos y probarlos en futuras realizaciones experimentales. Para esto, vamos a definir a  $\rho$  como la longitud o el ancho donde el polarizador es no nulo y  $\chi$  el orden máximo de acoplamientos considerados. En la parte inferior de la fig. 4.3 se muestra un ejemplo de dichos polarizadores de soporte compacto. En este caso se han descartado los potenciales en sitio, teniendo en mente la posibilidad de diseñar un polarizador en una red bidimensional de sitios idénticos. Los acoplamientos presentes, se han elegido hasta segundos vecinos, considerando que podrían ser implementados meramente a través de deformaciones geométricas en la red. Finalmente, para este polarizador local, se encuentra que  $R_+ = 0.679$  y  $T_- = 0.926$ .

En un escenario ideal, las capacidades del polarizador solo dependen de sus parámetros intrínsecos y son totalmente independientes del paquete de ondas que atraviesa por él. Para probar lo anterior, también cuantificaremos el comportamiento de  $R_+$  y  $T_-$  en función de  $\kappa$ , el momento del paquete, y  $|\alpha|^2$  el contenido probabilístico de estados de la banda positiva. En la fig. 4.4 podemos ver que en efecto, para  $\rho \gg 1$  en general se retienen valores óptimos de  $R_+$  y  $T_-$ , vale la pena notar que dado que el polarizador sólo refleja las componentes de energía positiva, al disminuir el valor de  $\rho$ , es justamente  $R_+$  la capacidad que empieza a oscilar y degradarse mas rápidamente, mientras que  $T_-$  permanece casi invariante. Es solo para valores muy pequeños de  $\rho$  como se muestra en la tabla 4.1 que el polarizador se vuelve una barrera completa y deja de ser transparente para las componentes de energía negativa. En el caso de  $\kappa$ , podemos ver que  $R_+$  y  $T_-$  en general se mantienen constantes en todo el dominio y solo caen en los límites  $\kappa = 0$  y  $\kappa = \pi/2$ . Estas aberraciones se deben a que en estos puntos el paquete de ondas tiene un comportamiento meramente difusivo sin desplazamiento, lo cual hace imposible medir las capacidades del polarizador de manera adecuada. Para  $\chi$ , como se puede ver en la fig. 4.5, tenemos un comportamiento análogo al de  $\rho$ . De nueva cuenta esto reafirma el hecho de que los acoplamientos de may-

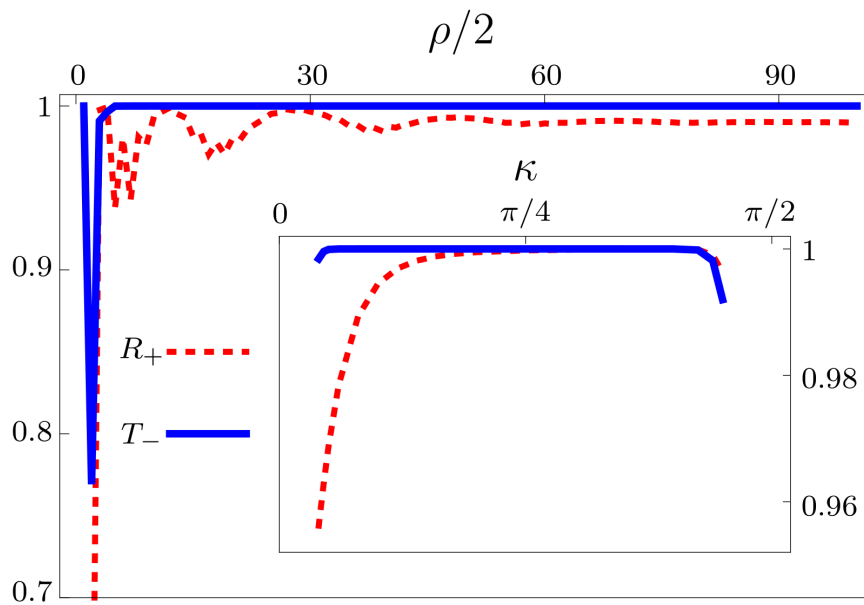


Figura 4.4: Coeficiente de reflexión para la componente de la banda superior y coeficiente de transmisión para la componente de la banda inferior en función de la longitud del polarizador  $\rho$  y el momento promedio del paquete gaussiano  $\kappa$ . Los parámetros utilizados en la simulación numérica son:  $N = 602$ ,  $\mu = .25$ ,  $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$ ,  $x_0 = 150$ ,  $\sigma_0^2 = 300$ , ( $\kappa = -.4\pi$ , solo para la figura de  $\rho$ ).

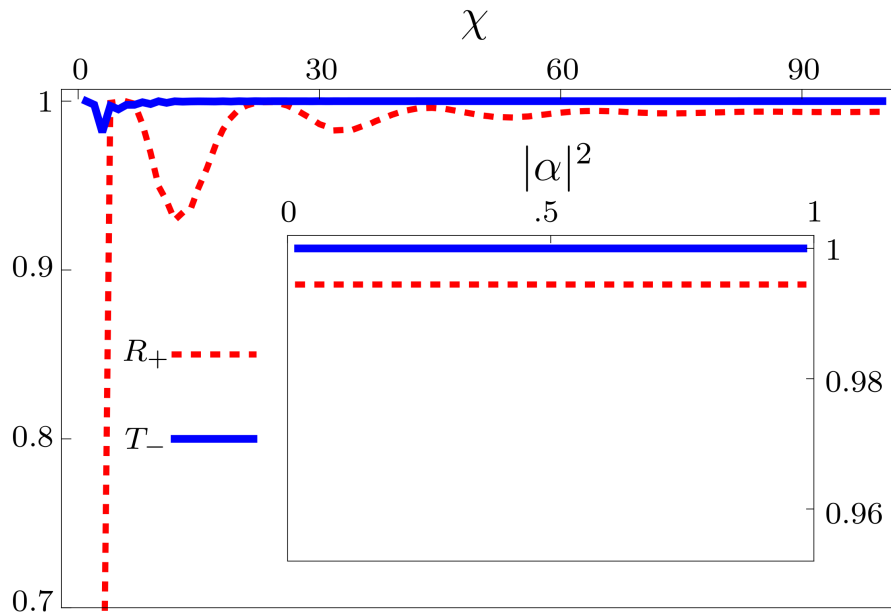


Figura 4.5: Coeficiente de reflexión para la componente de la banda superior y coeficiente de transmisión para la componente de la banda inferior en función del orden máximo de acoplamiento  $\chi$  y de la probabilidad total de estados de la banda superior  $|\alpha|^2$ . Los parámetros utilizados en la simulación numérica son:  $N = 602$ ,  $\mu = .25$ ,  $\kappa = -.4\pi$ ,  $x_0 = 150$ ,  $\sigma_0^2 = 300$ , ( $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$ , solo para la figura de  $\chi$ ).



or orden realmente no son significativos para la eficacia del polarizador y, como se observa en la tabla 4.2, es sólo al remover los acoplamientos de vecinos más cercanos que se observan variaciones significativas en las capacidades. En el caso de  $|\alpha|^2$  se obtiene lo esperado: sin importar la composición del paquete de ondas, las capacidades permanecen constantes. En resumen, como muestran las tablas 4.1 y 4.2, siguiendo la

Tabla 4.1: Coeficientes de reflexión y transmisión de ambas bandas para valores pequeños de  $\rho$ .

$\rho$	$R_+$	$T_+$	$R_-$	$T_-$
18	0.9937702	0.0062297	$3.3748915 \cdot 10^{-6}$	0.9999966
16	0.9760983	0.0239016	$2.6663832 \cdot 10^{-6}$	0.9999973
14	0.981028	0.0189718	$5.10265 \cdot 10^{-6}$	0.999995
12	0.942986	0.0570142	$3.62457 \cdot 10^{-6}$	0.999996
10	0.980486	0.0195142	0.0000316064	0.999968
8	0.937744	0.0622562	0.0000502697	0.99995
6	0.999219	0.000781441	0.00359898	0.996401
4	0.99757	0.00243037	0.00915802	0.990842
2	0.52476	0.47524	0.230839	0.769161
0	$1.01357 \cdot 10^{-16}$	1.	$1.11535 \cdot 10^{-16}$	1.

Tabla 4.2: Coeficientes de reflexión y transmisión de ambas bandas para ordenes de acoplamientos menores.

$\chi$	$R_+$	$T_+$	$R_-$	$T_-$
9	0.9496288	0.0503711	0.0000408	0.9999591
8	0.9695862	0.0304137	0.0017487	0.9982512
7	0.986265	0.0137349	0.0006628	0.9993371
6	0.9984558	0.0015441	0.0021825	0.9978174
5	0.9997847	0.0002152	0.0021996	0.9978003
4	0.9995793	0.0004206	0.0048581	0.9951418
3	0.9989529	0.001047	0.0027918	0.9972081
2	0.5596215	0.4403784	0.0183813	0.9816186
1	0.0217206	0.9782793	0.0021402	0.9978597
0	$1.0135694 \cdot 10^{-16}$	1.	$1.1153507 \cdot 10^{-16}$	1.

intuición previa podemos ver que los acoplamientos de menor orden son los mas significativos para el polarizador y sólo vemos una caída consid-

erale en las capacidades, para valores por debajo de  $\rho = 4$  y  $\chi = 3$  lo cual es un hecho favorable.

## Capítulo 5

# Conclusiones

A lo largo del presente trabajo, se analizó el Hamiltoniano de amarre fuerte de una cadena unidimensional periódica. Como se ha reportado extensamente en la literatura, se verificó que el efecto de introducir un potencial de intensidad alternante, genera una brecha en la banda de energías del sistema y tanto la amplitud de la brecha como la intensidad del potencial son proporcionales entre si. Más adelante se mostró que el Hamiltoniano en efecto se puede escribir de manera exacta, al hacer las definiciones pertinentes, como un Hamiltoniano tipo Dirac. A consecuencia de esto se hizo evidente que la intensidad del potencial se puede interpretar directamente como la masa efectiva de partículas relativistas, en esta nueva forma. Por tanto y como es de esperarse, las dinámicas de los casos  $\mu = 0$  y  $\mu \neq 0$  exhiben diferencias considerables. Haciendo uso de paquetes Gaussianos, se encontró que las diferencias dinámicas más notorias se observaban cuando estos eran preparados con un momento inicial cercano al punto de Dirac, es decir el punto donde aparece la brecha entre las bandas energéticas. Otra diferencia importante, es que en la propagación espacial de los paquetes, para el caso de masa nula no se observó Zitterbewegung, mientras que en el caso masivo sí. Respecto del Zitterbewegung, se calculó numéricamente su frecuencia y la tasa de decaimiento de su amplitud para diferentes masas efectivas y se verificó que en efecto coinciden con aquellas predichas por la aproximación de fase estacionaria desarrollada en esta tesis.

Se construyó una transformación de Foldy-Wouthuysen acorde al Hamiltoniano de amarre fuerte y se verificó que en efecto lo diagonaliza por bloques. Haciendo uso de esta, se construyó el potencial polarizador deseado tal que bloquea la propagación espacial de un solo tipo de estados energéticos. Una inspección más detallada reveló que la reflexión de

dichos estados no es perfecta aunque sí es muy cercana a la total. Finalmente se comprobó la robustez de las capacidades de reflexión y transmisión del polarizador, al ver que estas en general se preservan óptimas al variar dos tipos de parámetros, los referentes al paquete de ondas y los parámetros intrínsecos del polarizador mismo. Como se mencionó anteriormente, es nuestra intención proponer una forma local y de soporte compacto del polarizador a modo de hacer posibles, futuras realizaciones experimentales del mismo. Al encontrar que aún en estos casos reducidos las capacidades se conservan, el siguiente paso es realizar el experimento.

# Apéndice A

## Artículo

El siguiente artículo fue enviado y publicado en la revista *Phys. Rev B*.

# Stern-Gerlach splitters for lattice quasispin

A. S. Rosado<sup>2</sup>, J. A. Franco-Villafañe<sup>1</sup>, C. Pineda<sup>2</sup>, and E. Sadurní<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, 72570 Puebla, México*

<sup>2</sup>*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, 01000 México D.F., Mexico*

(Dated: July 18, 2016)

We design a Stern-Gerlach apparatus that separates quasispin components on the lattice, without the use of external fields. The effect is engineered using intrinsic parameters, such as hopping amplitudes and on-site potentials. A theoretical description of the apparatus relying on a generalized Foldy-Wouthuysen transformation beyond Dirac points is given. Our results are verified numerically by means of wave-packet evolution, including an analysis of *Zitterbewegung* on the lattice. The necessary tools for microwave realizations, such as complex hopping amplitudes and chiral effects, are simulated.

PACS numbers: 03.65.Pm, 03.67.Ac, 72.80.Vp

## I. INTRODUCTION

Quantum emulations have been increasingly important for theorists and experimentalists in areas such as ultracold atoms [1–5], quantum and microwave billiards [6–9], plasmonic circuits [10], and artificial solids in general [11, 12]. The concept can be used to engineer quantum dynamics not readily accessible in naturally occurring physical systems, e.g., elementary particles or charge carriers in solids [13, 14]. For some years, the effective Dirac theories emerging in honeycomb lattices and linear chains [15–20] have led researchers to consider the use of quasispin as an internal degree of freedom capable of supporting the long-pursued realization of qubits in solid-state physics. This interesting degree of freedom has the property of being nonlocal, inherent to the crystalline structure, and sufficiently robust as to provide upper and lower bands around conical (Dirac) points in the spectrum. In the same context, there has been a recent interest in Majorana fermions [21–23], as their topological nature may provide robustness with respect to decoherence, hence increasing the life of qubits, and thus extending the reach of potential applications. Several theoretical developments take advantage of quasispin [24, 25] and some experiments in lattices have observed their effects, e.g., *Zitterbewegung* in photonic structures [26].

But how does one measure quasispin on the lattice? One of the goals of this paper is to gain access to this degree of freedom by designing an interaction on bipartite lattices with the following features: (a) an adjustable coupling with particles' quasispin, (b) a localized region where the interaction occurs, and (c) an intrinsic generation of the interaction using lattice parameters. It is worth mentioning that the electron's true spin is not easily accessible when immersed in a solid [27].

Our tasks demand an exploration of tight-binding models, oriented to an experimental setup in microwave

resonators. We establish the realization of Dirac's equation in a one-dimensional setting and solve the problem of how to split the two components of the wave function, namely particle-antiparticle components, or, in the language of solid-state physics, the upper and lower bands. Under these circumstances, and using the Foldy-Wouthuysen (FW) transformation, we design and test a spatially localized Stern-Gerlach splitter represented by a banded matrix, to be used in the context of Dirac-like dynamics. In this case, the experimental restrictions imposed by most realizations come in the form of short-range interactions. We provide a successful geometric proposal in compliance with such restrictions, using microwave resonators coupled by proximity.

We approach the problem in three different stages. First, in Sec. II, we study the lattice structure using full-band Dirac equations [20] and provide a generalized FW transformation in Sec. II A. The explicit construction of the beam splitter as a potential is achieved in Sec. II B. In Sec. III, we study wave-packet dynamics using numerical simulations with two important results: in Sec. III A, we show that unpolarized beams exhibit *Zitterbewegung*, while in Secs. III B and III C, we test the splitter efficiency. With the aim of ensuring the feasibility of our model, in Sec. IV we establish the robustness of the system under random perturbations of parameters. Our study is applicable to any tight-binding (TB) array with the aforementioned structure, but, as a final step, in Sec. V we focus on plausible experiments in microwave cavities. Section V A describes the necessary specifications for the implementation and Sec. V B gives an explicit construction that produces negative couplings and level inversion. We conclude in Sec. VI.

## II. INTRINSIC STERN-GERLACH APPARATUS

### A. Quasispin and generalized FW transformations

Let us define our periodic system, with the aim of generalizing the usual FW unitary rotation [28, 29]. Con-

---

\* sadurni@ifuap.buap.mx

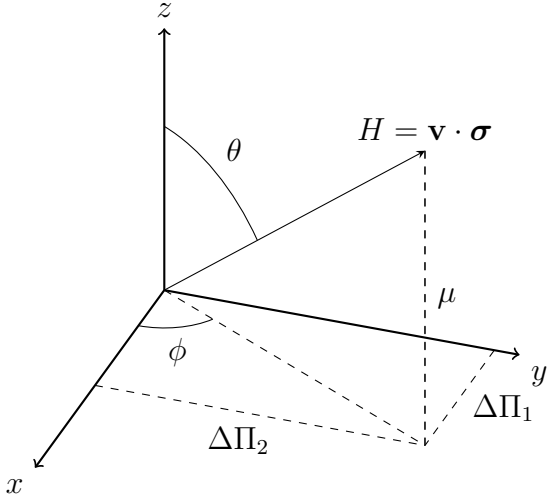


FIG. 1. A visualization of the FW transformation. Using a rotation around the  $z$  axis by an angle  $\phi$ , followed by a rotation around  $y$  by an angle  $\theta$ , would rotate the eigenstates of  $\sigma_z$  to the eigenstates of the Hamiltonian given by Eq. (1). In this visualization, the angles are considered to be scalars since they are operators that commute with the Hamiltonian.

sider a one-dimensional lattice, with sites characterized by the positions  $n \in \mathbb{Z}$ , and position basis  $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{Z}}$ . We deal with a typical TB model in this setting, with hopping parameter  $\Delta$  and potential  $V$ ,

$$H = \Delta T + \Delta T^\dagger + V = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta |n\rangle \langle n+1| + \text{h.c.} + V_n |n\rangle \langle n| \quad (1)$$

where the translation operator is defined via  $T|n\rangle = |n+1\rangle$  and a position-dependent potential  $V = \sum_n V_n |n\rangle \langle n|$  has been introduced. We have shown [20] that this Hamiltonian can be written in Dirac form without approximations, with suitable definitions of Dirac matrices  $\alpha$  in terms of projectors onto even and odd site numbers,

$$H = \Delta \alpha \cdot \Pi + V \quad (2)$$

with the kinetic operators

$$\begin{aligned} \Pi_1 &\equiv 1 + \frac{1}{2} \sum_n |n-2\rangle \langle n| + |n\rangle \langle n-2| = 1 + \frac{T^2 + (T^\dagger)^2}{2} \\ \Pi_2 &\equiv \frac{i}{2} \sum_n |n-2\rangle \langle n| - |n\rangle \langle n-2| = \frac{T^2 - (T^\dagger)^2}{2i} \end{aligned} \quad (3)$$

and the Dirac matrices

$$\begin{aligned} \alpha_1 &\equiv \sum_{n \text{ even}} |n+1\rangle \langle n| + |n\rangle \langle n+1| \\ \alpha_2 &\equiv i \sum_{n \text{ even}} |n+1\rangle \langle n| - |n\rangle \langle n+1| \end{aligned} \quad (4)$$

satisfying the usual conditions, as proved in [20].

Bipartite lattices with alternating on-site potential energies  $E_1, E_2$  entail the use of the potential

$$V = E_0 + \mu\beta, \quad (5)$$

where the average energy  $E_0 = (E_1 + E_2)/2$  and splitting  $\mu = (E_1 - E_2)/2$  are used. Additionally, we have considered the operator  $\beta$ , here defined as

$$\beta \equiv \sum_{n \text{ even}} |n\rangle \langle n| - |n+1\rangle \langle n+1|. \quad (6)$$

Our lattice operators (4) and (6) satisfy the relations  $\{\alpha_i, \beta\} = 0, \{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij}, [\alpha_1, \alpha_2] = 2i\beta$ . This reordering of our original TB Hamiltonian leads to an effective Dirac Hamiltonian of the form

$$H = \Delta \alpha \cdot \Pi + \mu\beta + E_0. \quad (7)$$

The spectrum of  $H$  is  $E_{k,\pm} = E_0 \pm \sqrt{4\Delta^2 \cos^2 k + \mu^2} \equiv E_0 \pm E_k$  and, most importantly, its eigenfunctions are written as spinors with up and down components represented by amplitudes in the even and odd sublattices. Here we remark that this spinorial form of the eigenfunctions and, in general, of any wave packet on the lattice is in itself an additional discrete degree of freedom, and thus gives rise to the name: quasispin. As previously noted, quasispin is entirely nonlocal, given that it is a direct manifestation of the bipartite nature of the lattice. Returning to the discussion, we have the following complete set of eigenfunctions

$$\langle n|k, s\rangle = e^{ikn} \begin{pmatrix} u_{k,s}^+ \\ u_{k,s}^- \end{pmatrix}, \quad u_{k,s}^\pm = s^{\pm 1/2} \sqrt{\frac{E_k \pm s\mu}{4\pi E_k}}, \quad (8)$$

where  $n$  is an even index,  $k$  is the wave number in the reduced Brillouin zone  $0 < k < \pi$ , and  $s = \pm$  is the index of upper and lower bands. For the latter use, we introduce the parameter  $\kappa$  around the conical point  $k = \pi/2 - \kappa/2$ . This yields the following eigenvalues  $p_i$  of  $\Pi_i$ :

$$p_1 \approx -\frac{\kappa^2}{2}, \quad p_2 \approx \kappa \quad (9)$$

for momenta near the conical point. This shows that  $p_2$  survives, playing the role of an effective momentum of a one-dimensional (1D) Dirac equation.

In order to show the role of quasispin in the solutions, one can solve the eigenvalue problem without any approximation by means of a rotation in the space  $(\alpha_1, \alpha_2, \beta)$ . This is the FW transformation explained in Fig. 1, which maps the site model (even/odd sites) to a qubit system of positive and negative energies [19, 20]. In terms of Pauli matrices, we write  $\alpha_1 = \sigma_1, \alpha_2 = \sigma_2, \beta = \sigma_3$  and we define a vector  $\mathbf{v}$  with components  $v_1 = \Delta\Pi_1, v_2 = \Delta\Pi_2, v_3 = \mu$ . With these definitions,  $H$  becomes a pure spin-orbit interaction,

$$H - E_0 = \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad [v_i, v_j] = [v_i, \sigma_j] = 0. \quad (10)$$

This allows one to rotate the vector  $\mathbf{v}$  independently of  $\sigma$ , with the aim of making it parallel to  $\mathbf{z}$ . Equivalently, the rotation is represented by a unitary transformation  $U_{\text{FW}}$  which block diagonalizes  $H$ ,

$$U_{\text{FW}} = \exp\left(-\frac{i\phi}{2}\sigma_3\right) \exp\left(-\frac{i\theta}{2}\sigma_2\right) \quad (11)$$

In our case, this rotation allows us to guide the design of the polarizer. The exponential is understood in terms of trigonometric functions, where the angles are operators defined by

$$\begin{aligned} \sin \theta &= \frac{\Delta(T + T^\dagger)}{\sqrt{\Delta^2(T + T^\dagger)^2 + \mu^2}}, \\ \cos \theta &= \frac{\mu}{\sqrt{\Delta^2(T + T^\dagger)^2 + \mu^2}} \end{aligned} \quad (12)$$

and

$$\cos \phi = \frac{1}{2}(T + T^\dagger), \quad \sin \phi = \frac{1}{2i}(T - T^\dagger). \quad (13)$$

Formula (11) involves trigonometric functions of half angles, so we provide their expressions for completeness [we note here that  $(H - E_0)^2$  is independent of Pauli matrices],

$$\begin{aligned} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) &= \sqrt{\frac{\sqrt{(H - E_0)^2 + \mu}}{2\sqrt{(H - E_0)^2}}}, \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) &= \sqrt{\frac{\sqrt{(H - E_0)^2 - \mu}}{2\sqrt{(H - E_0)^2}}}, \end{aligned} \quad (14)$$

and

$$\begin{aligned} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) &= \frac{1}{2}(T^{1/2} + (T^\dagger)^{1/2}), \\ \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) &= \frac{1}{2i}(T^{1/2} - (T^\dagger)^{1/2}). \end{aligned} \quad (15)$$

With the unitary operator  $U_{\text{FW}}$ , the transformation yields, in a very clean way,

$$\begin{aligned} H_{\text{FW}} &= U_{\text{FW}}^\dagger H U_{\text{FW}} \\ &= \begin{pmatrix} E_0 + \sqrt{(H - E_0)^2} & 0 \\ 0 & E_0 - \sqrt{(H - E_0)^2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

where  $\sqrt{(H - E_0)^2} = \sqrt{\Delta^2(T + T^\dagger)^2 + \mu^2}$ .

Adding the next-to-nearest-neighbor interaction in Eq. (1) would require a modification of the definitions (3). However, the program of the present section could also be carried out in a very similar fashion. The addition of the quartic translational terms in Eq. (3) would change Eqs. (12) and (13), and would thus make the propagation in the two bands slightly different. A splitter could thus also be designed, but an asymmetry in the two components would indeed show up in the asymptotic evolution.

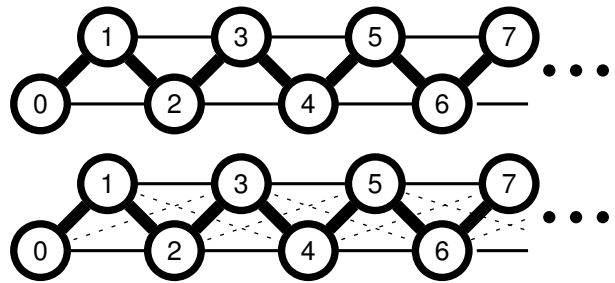


FIG. 2. Lattice topologies corresponding to the polarizer, up to second neighbors (top) and third neighbors (bottom). Thick lines correspond to the (strongest) nearest-neighbor interaction, thin lines are the next-to-nearest-neighbor interactions, and, finally, dashed lines are the weakest (and in the top model neglected) third-nearest-neighbor interactions.

## B. The Stern-Gerlach apparatus as an interaction

Now that we have derived a block-diagonal Hamiltonian, we are in the position to introduce an interaction which couples differently with positive- and negative-energy solutions. Moreover, we shall see that the range of such interaction can be controlled at pleasure. A diagram is shown in Fig. 2.

In classical relativistic dynamics, the double sign of the kinetic energy could be used to produce two types of behavior in the presence of a potential well. If  $V(x)$  interacts attractively for positive solutions (charges), the opposite case will be a potential barrier acting on negative solutions (holes):

$$E = \pm\sqrt{c^2p^2 + m^2c^4} + V(x). \quad (16)$$

Thus, one type of solution would be allowed to enter in a certain region while the other would be rejected; we may regard  $V(x)$  as a gate keeper. We must note, however, that quantum dynamics gives rise to interference phenomena producing transmission and reflection in both of the aforementioned situations. The simplest way to separate both types of waves is by introducing a potential of the type

$$V_{\pm}(x) = \begin{cases} V(x) & \text{for particles} \\ 0 & \text{for holes} \end{cases} \quad (17)$$

Since the FW transformation does the job of decoupling both types of solutions, we introduce at the level of  $H_{\text{FW}}$  a potential  $V_{\text{FW}}$  that separates the components as in (17),

$$\tilde{H}_{\text{FW}} = H_{\text{FW}} + \frac{\mathbf{1} + \sigma_3}{2} \otimes V_{\text{FW}} \quad (18)$$

or in matrix form,

$$\begin{pmatrix} E_0 + V_{\text{FW}} + \sqrt{(H - E_0)^2} & 0 \\ 0 & E_0 - \sqrt{(H - E_0)^2} \end{pmatrix}.$$



In order to find the true potential  $V$  operating at the level of lattice sites and neighbor couplings, we must return to our original description by means of the inverse FW transformation,

$$V(N) = U_{\text{FW}} V_{\text{FW}} U_{\text{FW}}^\dagger. \quad (19)$$

Direct computations lead to a  $2 \times 2$  block form of  $V$ . For instance,

$$V_{11} = e^{-i\phi/2} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) V_{\text{FW}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi/2} \quad (20)$$

Here we may choose  $V_{\text{FW}}$  at will, but using site number kets makes it easier to provide locality:  $\langle n|V_{\text{FW}}|n'\rangle = \delta_{n,n'} V_{\text{FW}}(n)$ . The site dependence of  $V$  can be obtained by inserting a complete set of Bloch waves. Let us define

$$I_n^{s,s'}\left(\frac{\mu}{\Delta}\right) \equiv \int_{-\pi}^{\pi} dk \sqrt{\frac{E_k + s\mu}{E_k}} e^{ik(n-s'/2)}, \quad (21)$$

with  $s, s' = \pm$  and  $n \in \mathbf{Z}$ . The potential blocks are then

$$\langle n|V_{11}|n'\rangle = \frac{1}{8\pi^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} V_{\text{FW}}(m) I_{n'-m}^{++} (I_{n-m}^{++})^* \quad (22)$$

for even  $n$  and  $n'$ ,

$$\langle n|V_{21}|n'\rangle = \frac{1}{8\pi^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} V_{\text{FW}}(m) I_{n'-m}^{-+} (I_{n-m}^{+-})^* \quad (23)$$

for even  $n$  and odd  $n'$ , and finally

$$\langle n|V_{22}|n'\rangle = \frac{1}{8\pi^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} V_{\text{FW}}(m) I_{n'-m}^{-+} (I_{n-m}^{-+})^* \quad (24)$$

for odd  $n$  and  $n'$ . It is advantageous to write our result in the form of the series over  $m$  above: when the range of  $V_{\text{FW}}$  is limited, the summation over  $m$  involves only a few terms. In the extreme case of a pointlike gate keeper in the FW picture,  $m = 0$  is the only contribution in  $V$ . Moreover, the limits  $\mu \gg \Delta$  and  $\mu \ll \Delta$  provide useful approximations,

$$I_n^{s,s'} \approx \frac{4\sqrt{1+ss'}(-)^n}{s' - 2n} + O\left(\frac{\Delta}{\mu}\right) \quad (25)$$

and in the opposite regime,

$$I_n^{s,s'} \approx \frac{4s'(-)^n}{s' - 2n} + O\left(\frac{\mu}{\Delta}\right). \quad (26)$$

According to (22)-(24), these expansions show that the resulting potentials in space are represented by banded matrices, which we proceed to display as densities without approximations in Fig. 3. The numerical evaluation of matrix elements shows that a finite number of neighbors is a reasonable approximation. For second- and third-nearest-neighbor interactions, we depict the resulting localized arrays in Fig. 2.

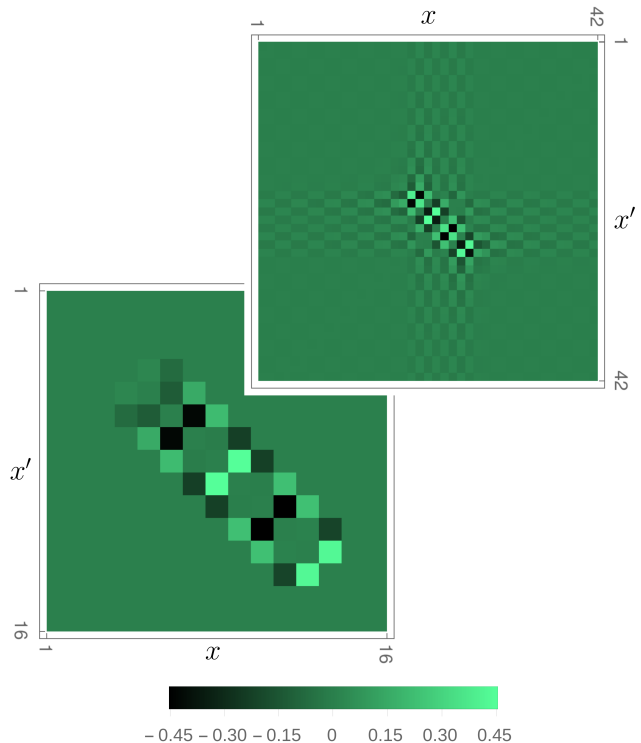


FIG. 3. Top: Matrix form of the nonlocal complete polarizer potential. The interaction zone contains different on-site energies indicated by the alternating pixel intensities in the diagonal. Bottom: Matrix form of a geometrical polarizer potential with range  $\rho = 10$  and no on-site potential. Only couplings to first and second order have been included. Both potentials are given in units of  $\Delta$ .

### III. DYNAMICAL STUDY

In this section, we shall study two different phenomena. The first is a “free-particle” effect: *Zitterbewegung*. Since its proposal by Schrödinger, *Zitterbewegung* has been understood as a rapid oscillatory motion that is a product of the interference between positive- and negative-energy states present in the initial composition of a Dirac spinor. For this oscillatory phenomena to be observed, these positive- and negative-energy states must have a sufficiently large overlap in position space. This has, in fact, been emulated in other experimental realizations of the Dirac equation [26, 30, 31]. In this work, we develop a clean derivation that will allow us to make a stationary phase approximation leading to a  $\sqrt{1/t}$  decay of the oscillatory part of the amplitude. In addition, we shall consider the effect of a designed potential that can spatially separate efficiently a function in its “big” and “small” contribution. The efficiency of the splitter shall be characterized by means of reflection and transmission coefficients for each spin component.

### A. Wave packet dynamics

*Zitterbewegung* is the hallmark of unpolarized beams. Effective relativistic wave equations produce oscillatory phenomena in the evolution of single-component spinors on the lattice [26]. At the heart of this effect lies the FW picture and the corresponding rotated quasispin: an observable associated to upper and lower energy bands. The outcome of the evolution will be a superposition of "particles" and "antiparticles" as long as the initial condition is a mixture of such quantum number. An obvious implication is that *Zitterbewegung* should be present in any theory with binary lattices. Noteworthy is the fact that the approximation of Bloch momenta around Dirac points is not the essential ingredient; we may find *Zitterbewegung* in situations where the initial wave packet is a superposition of all energies in both bands, with non-negligible momentum components. We proceed to analyze such physical situations.

Setting  $\hbar = 1$ , we define the initial wave packet as

$$|\psi_0\rangle = \int_0^\pi dk \sum_{s=\pm} \psi_{k,s} |k, s\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle. \quad (27)$$

We are interested in the average position at time  $t$ . In order to recover the usual definition of position  $x$  and momentum  $p = -i\partial/\partial x$  in the continuous limit, we work with position operators defined over dimers (pairs of sites) and lattice constant  $a$ ,

$$X = \frac{a}{2} \sum_{n \text{ even}} n [|n\rangle\langle n| + |n+1\rangle\langle n+1|] \quad (28)$$

with the property

$$[T^2, X] = -aT^2, \quad [X, \sigma_\pm] = 0 \quad (29)$$

(note though that it is the operator  $T^2$  and not  $T$  that satisfies this property). In the Heisenberg picture, we obtain

$$\dot{X} = a\sigma_2, \quad \dot{\Pi} = 0, \quad (30)$$

which leads to

$$X(t) = X(0) - 2at \frac{\Delta\Pi_2}{H} + a \left[ \sigma_2(0) - 2 \frac{\Delta\Pi_2}{H} \right] \int_0^t dt e^{-2itH}. \quad (31)$$

The first two terms describe the usual classical dynamics for a free particle, while the oscillations (i.e., the *Zitterbewegung*) come from the third term. The relevant part of the expectation value with respect to the state  $|\psi_0\rangle$  is thus

$$x_{\text{zitt}} \equiv \left\langle \left[ \sigma_2(0) - 2 \frac{\Delta\Pi_2}{H} \right] \int_0^t dt e^{-2itH} \right\rangle_\psi. \quad (32)$$

After inserting energy kets (8) and performing the time integral, we can write

$$x_{\text{zitt}} = \sum_{s,s'} J_{s,s'} + \sum_s I_s \quad (33)$$

where  $I$  and  $J$  are Bloch-momentum integrals of the type

$$J_{s,s'} \equiv \int_0^\pi dk \frac{e^{-iE_{k,s}t} \sin(E_{k,s}t)}{E_{k,s}} \psi_{k,s} \psi_{k,s'}^* \times i \left[ u_{k,s}^+ (u_{k,s'}^-)^* - u_{k,s}^- (u_{k,s'}^+)^* \right] \quad (34)$$

and

$$I_s \equiv \int_0^\pi dk \frac{e^{-iE_{k,s}t} \sin(E_{k,s}t) \sin k}{(E_{k,s})^2} |\psi_{k,s}|^2. \quad (35)$$

These integrals can be estimated in a long-time regime using the stationary phase approximation, where the stationary points are approximately determined by  $dE_{k,s}/dk = 0$ , i.e.,  $k = 0, \pi/2, \pi$ . Since our description involves only  $0 < k < \pi$ , we see that two stationary points lie at the edge of the interval, and therefore their contribution appears with a factor of  $1/2$ . On the other hand, the midpoint  $k = \pi/2$  is also the point of maximal approach between bands, and it only contributes when  $\mu \neq 0$ . From (34) and (35), we see that  $x_{\text{zitt}}$  contains terms with a time dependence of the form  $e^{i\omega t} \sqrt{1/t}$ , after applying the stationary phase approximation. Therefore, the frequencies of oscillation take the values  $\omega_1 = \pm\mu$  (from  $k = \pi/2$ ) and  $\omega_2 = \pm\sqrt{4\Delta^2 + \mu^2}$  (from  $k = 0, \pi$ ), while the effect vanishes with an envelope curve  $\sqrt{1/t}$ . We have an expression of the form

$$x_{\text{zitt}} \approx \sqrt{\frac{1}{t}} [A(\mu, \Delta) e^{-2i\omega_1 t} + B(\mu, \Delta) e^{-2i\omega_2 t} + \text{c.c.}], \quad (36)$$

where  $A$  and  $B$  are coefficients related to second derivatives of the phase in (34) and (35). In Fig. 4, we describe the oscillations of  $x_{\text{zitt}}$  in log scale, showing clearly an envelope  $\sqrt{1/t}$  for long times.

### B. The potential as a beam splitter

We prepare wave packets with an adjustable width and a proper "thrust" or "kick" by means of an additional plane-wave factor, imprinting an average drift. Our choice corresponds to motion from left to right. Eventually, our packets reach the gate keeper centered at the origin described in Fig. 3, but before they do so, *Zitterbewegung* is significantly observed. After the packets collide with the potential, positive-energy components are reflected and negative-energy components are transmitted. This type of behavior has been verified numerically with specific wave packets, as we discuss now. In Fig. 5, we plot the full probability density in black, upper

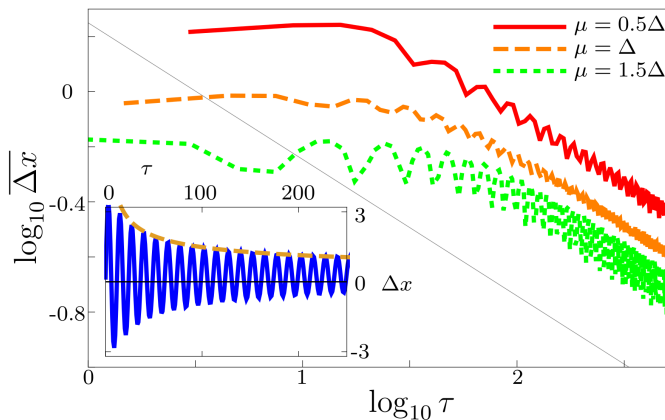


FIG. 4. *Zitterbewegung* of the wave packet. On the left panel, we see the oscillations of  $x_{\text{zitt}}$  without ballistic motion, as well as the decay of amplitude predicted by stationary phase approximations. On the right panel, we see the same rate of amplitude decay for three different effective masses,  $\mu$ .  $\overline{\Delta x}$  is the averaged maximum amplitude of the oscillations, while  $\tau = t/T_\chi$  and  $T_\chi$  is the characteristic time of the simulation given by  $T_\chi = \hbar/\Delta$ .

spin component in blue, and lower spin in orange. The dynamics is described in three steps: the first column corresponds to times before the collision with the polarizer, the second column shows the interference produced by the collision, and the third column finally demonstrates how the components of the wave packet are separated after the collision. Upper spin is reflected and lower spin is transmitted. To make a quantitative analysis in terms of probabilities, first we define the initial wave packet as

$$\psi_n(0) = \alpha \mathcal{N}_- P_- e^{-an^2/4\lambda^2} e^{i\kappa n} + \beta \mathcal{N}_+ P_+ e^{-an^2/4\lambda^2} e^{-i\kappa n}, \quad (37)$$

where  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ ,  $\lambda$  is the width of the discrete probability density, and  $\kappa$  is the average momentum of the packet.  $P_\pm$  are the projectors onto each energy band given by

$$P_s = \int_0^\pi dk |k, s\rangle \langle k, s| = U_{FW} \left( \frac{\mathbf{1} + s\sigma_3}{2} \right) U_{FW}^\dagger. \quad (38)$$

The matrix elements of these projectors are used after the scattering event takes place in the simulation, in order to test the sign of the spin. The results in Fig. 6 show that after our Stern-Gerlach apparatus has done its job, only 1.2% of the upper spin component and 100% of the lower spin component have been transmitted. The wave packet moving to the right still exhibits a slight hint of *Zitterbewegung* as it is a mixture of components, while the wave packet moving to the left propagates without *Zitterbewegung*, as it is only comprised by the remainder 98.8% of the upper spin component. This quantitative analysis requires the reflection capacity of the upper spin component, denoted by  $R_+$ , and transmission capacity of the lower spin component,  $T_-$ , of the polarizer for different values of the thrust  $\kappa$  and the range of the polarizer

$\rho$ . These quantities are given by

$$R_+ = \frac{|P_+|\psi(t)\rangle|_l^2}{|\alpha|^2}, \quad T_+ = \frac{|P_+|\psi(t)\rangle|_r^2}{|\alpha|^2}, \\ R_- = \frac{|P_-|\psi(t)\rangle|_l^2}{|\beta|^2}, \quad T_- = \frac{|P_-|\psi(t)\rangle|_r^2}{|\beta|^2}, \quad (39)$$

where subscripts  $l, r$  stand for sums over sites to the left and right of the polarizer location, respectively. Due to complementarity,  $R_+ + T_+ = 1$  and  $R_- + T_- = 1$ , so  $T_+$  and  $R_-$  are redundant. The results for  $R_+, T_-$  are shown in Fig. 6. When  $\rho$  is varied, both capacities remain near optimal values and fall to zero only for small polarizer sizes, as expected. Since the "kick" is a property of the wave packet—i.e., external to the structure of the polarizer—the capacities are expected to remain invariant for different values of  $\kappa$ . This is confirmed in our simulations, except for values near  $\kappa = 0, \pi/2$  which correspond to purely diffusive propagation.

The results are quite satisfactory, but we should mention that the type of polarizer  $(1 + \sigma_3) \otimes V$  could be modified with more refined constructions, even with transparent potentials previously designed using supersymmetric methods [32].

We would like to point out that the inset in Fig. 6 shows the reflection  $R_+$  rising up very close to 1 for values of  $\kappa > \pi/4$  (but far from  $\pi/2$ ). This corresponds to fast wave packets. Since our simulations consist of time-dependent scattering, we need fast and broad distributions that overcome the spreading of components before scattering; we are, however, limited to a finite size of the grid. In addition, our model also allows one to increase the intensity  $V$ , which blocks incident beams with increasing efficiency as long as  $\kappa$  does not correspond to a Ramsauer resonance.

### C. A purely geometric beam splitter

Engineering beam splitters by means of nonlocal potentials include the possibility of removing all diagonal contributions in  $V$ , in favor of the off-diagonal elements representing interactions to a certain range, as shown in Fig. 3 (our approximations may include nearest neighbors, next-to-nearest neighbors, and so on). In the experimental setup to be described in later sections, the couplings can be determined by proximity between sites. With this technique, we can control the interaction range, as well as the zone where it operates, only using lattice deformations. Wave-packet evolution is studied numerically in this extreme situation and our results show a surprisingly efficient separation of components. In particular, for a  $\rho = 10$  polarizer with couplings to second-order neighbors, we see a reflection of 67.9% of the upper spin component and a transmission of 92.6% of the lower spin component.

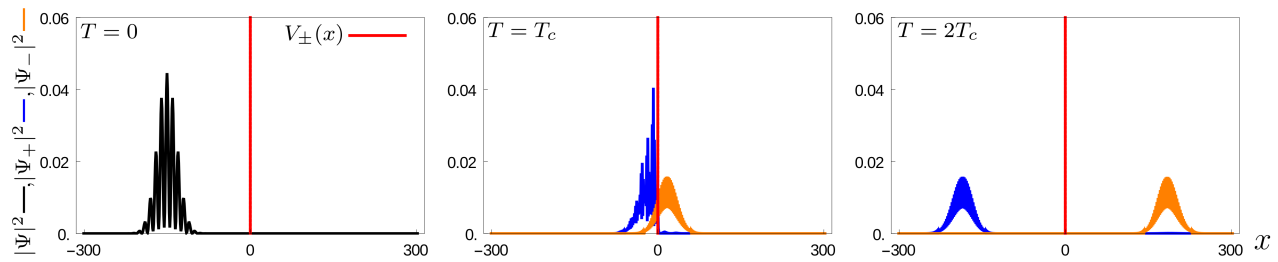


FIG. 5. (Color online) Evolution of a wave packet going through the lattice polarizer. The first picture shows the initial condition of the complete wave packet, whereas the second and third pictures portray the dynamics of the upper and lower band components of the wave packet. The collision time with the polarizer is  $T_c = \frac{\hbar N}{2\Delta\kappa}$ , where  $N$  is the number of sites on the lattice.

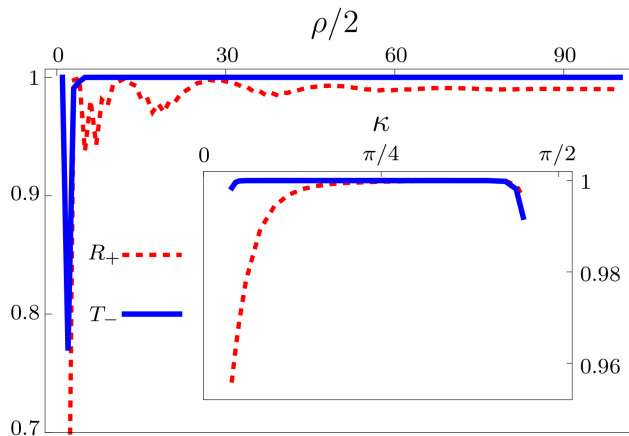


FIG. 6. (Color online) The dotted line represents the reflection coefficient for the upper band component of the wave packet as a function of the variables  $\kappa$  and the polarizer size  $\rho$ . The continuous line represents the transmission coefficient for the lower band component of the wave packet as a function of the same variables.

#### IV. FEASIBILITY

In this section, we test the robustness of the splitter with respect to the known experimental limitations. In the splitter, three parameters must be controlled: the overall absorption, the on-site energy, and the coupling terms. This analysis will not include the overall absorption because it mainly affects the width and height of the resonances without significantly disturbing the spectral positions; therefore, it is expected that the transmission and reflection coefficients decrease by a factor related to the strength of the absorption.

Experiments show [9] that the on-site energy can be controlled better than the coupling. This is the case for microwave experiments since the variation of couplings is at least two orders of magnitude greater than the variation of the on-site energy. Thus, to estimate the robustness of the splitter, we will consider a Gaussian disorder introduced randomly on the couplings. We modify  $\Delta \rightarrow (1 - \delta)\Delta$ , where  $\delta$  is a random variable with a stan-

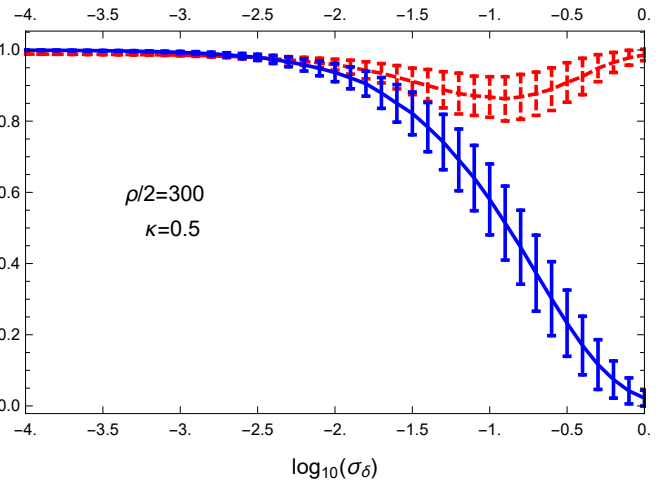


FIG. 7. (Color online) Mean reflection (red) and transmission (blue) coefficients as functions of the standard deviation of the coupling  $\sigma_\delta$  (see text), for a  $\rho = 600$  splitter. The error bars represent the fluctuations obtained from multiple realizations. The value  $\kappa = 0.5$  has been chosen for optimality.

dard deviation  $\sigma_\delta$ . Figure 7 shows that the expected coefficients and deviations are satisfactory, even for a poor coupling control ( $\sigma_\delta \sim 0.1$ ). As expected, an extremely poor coupling control ( $\sigma_\delta \gg 0.1$ ) destroys the efficiency of the splitter, with the latter becoming a regular wall unable to separate the upper and lower band components. Thus, we have shown robustness and feasibility in laboratory implementations.

#### V. EXPERIMENTAL PROPOSALS

In this section, we describe a realization of the splitter through a microwave cavity containing a set of cylindrical resonators between parallel plates, establishing a tight-binding configuration. This type of experimental implementation has been very useful for the emulation of Dirac equations [18], graphenelike structures [6–9], chiral states [33], and anomalous Anderson localization [34], among others. It is important to mention that the follow-

ing experimental proposal is not unique since the splitter can also be achieved by plasmonic circuits [10], optical waveguides [35], or acoustic waves [36]. The reader can notice that these implementations rely on classical aspects of the systems mentioned. However, the equations of motion are equivalent to, say, the Schrödinger or Dirac's equation, depending on the regime studied. In this sense, we are *emulating* Dirac's equation.

We show in further detail how to produce complex coupling constants with the aim of fabricating purely geometric beam splitters. The effect, important in its own right, rests on the possibility of breaking the chiral symmetry of polygonal geometries using dimers as individual sites. This opens the possibility of producing directed couplings, emerging from dimeric states.

### A. Experimental specifications

A set of cylindrical dielectric disks can act as the sites of the chain, for example, Temex-Ceramics disks, E2000 series, with high dielectric permittivity ( $\epsilon = 37$ ) and low loss (quality factor  $Q = 7000$ ). Each disk has an isolated resonance defined by the dimensions of the cylinder, e.g., for a height of 5mm and a radius of 4mm, a resonance close to 6.64 GHz appears corresponding to the lowest transverse electric mode ( $TE_1$ ). This resonant frequency is equivalent to the on-site energy. For purely geometric splitters, we have seen that on-site energies are the same throughout the array; therefore, identical dielectric disks must be used. On the other hand, a general type of splitter would require disks of different dimensions and/or dielectric constants.

Between two parallel metallic plates, each isolated resonance behaves like a  $J_0$ -Bessel function inside of a cylinder, and as a  $K_0$ -Bessel function outside of it. The function  $K_0$  can be represented fairly well by an exponential tail as a function of the distance with respect to the center. Therefore, any set of disks interacts by proximity through the overlap of their individual functions  $K_0$ , in such a way that the response of the whole set is well described by a tight-binding model. The intensity of the interaction and the main contribution of first and second neighbors can be further manipulated by changing the distance between the plates [19].

It is possible to study the wave dynamics of the splitter by introducing two antennas into the microwave cavity connected to different ports of a vector network analyzer (VNA). It is possible to measure both the spectrum and the intensity of the wave functions by using only one probing antenna. However, for the reconstruction of wave packet dynamics, it is necessary not only to measure the intensity but also the phase. Hence a second antenna probing the transmission of the system is mandatory.

We fix one of the antennas near to a disk whereby the electromagnetic waves are injected, while the position of the other antenna is varied throughout the structure, allowing one to measure the transmission spectrum on

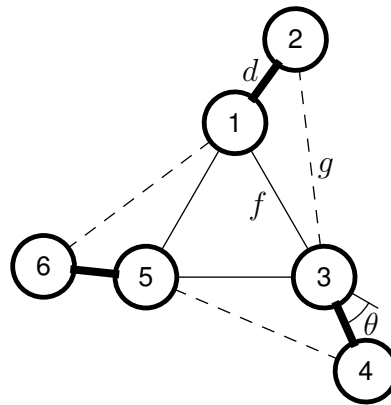


FIG. 8. Configuration of disks (indicated as circles, with a number) giving rise to the coupling structure specified by Eq. (43). The six disks are organized in pairs (1, 2), (3, 4), and (5, 6), each of which interacts strongly via the coupling constant  $d$ . The inner disks interact via the coupling constant  $f$ . The outer disks interact with just one of the other four disks (for example, 2 with 3), as the others remain screened geometrically. The  $C_{3v}$  symmetry is broken by tilting the outer disks with an angle  $\theta$ .

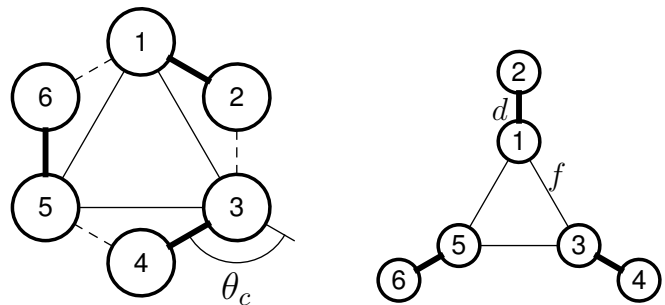


FIG. 9. Two particular realizations that keep the full  $C_{3v}$  symmetry are illustrated, one in which  $\theta = \theta_c$ , and the other for  $\theta = 0$  in which screening sets  $g = 0$ .

each disk.

The evolution of the wave packet at each point of the structure is reconstructed through a Fourier transform of the measured spectrum at that point [37]. This is allowed because we have access to the full spectrum of the complex transmission.

### B. Negative couplings and level inversion

In our purely geometric splitter, we find matrix elements that are real but not positive; see, e.g., Fig. 3. Negative couplings require the control of an extra degree of freedom in the form of a phase factor. We show that indeed such phases can be produced by adding more structure in our arrays. It is worth mentioning that non-removable phase factors in hopping amplitudes are the equivalent of magnetic fields applied to charged particles [38], but our goal is to emulate these effects for a scalar

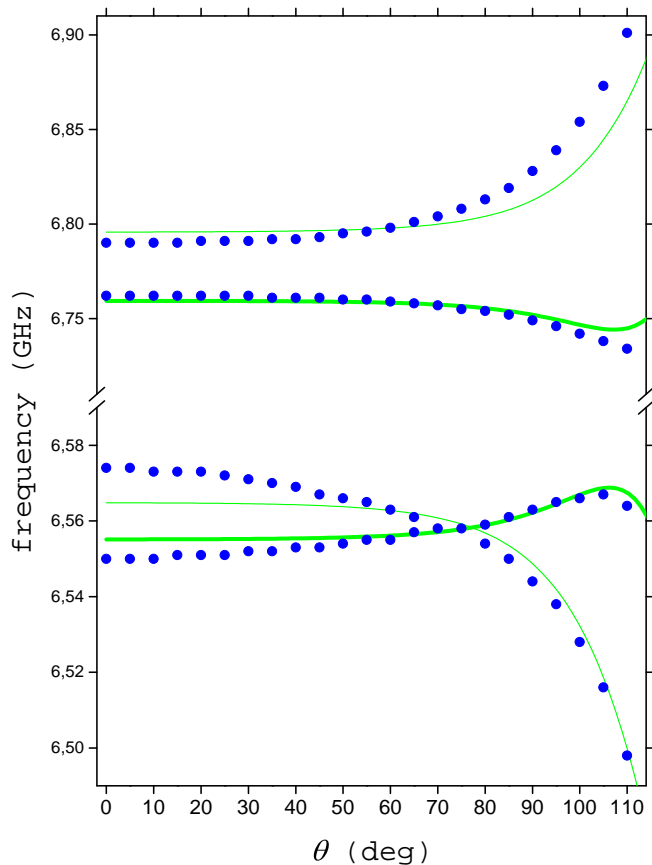


FIG. 10. Spectrum of the configuration shown in Fig. 8; dots correspond to a full 3D simulation of a microwave cavity using COMSOL 5.2 and continuous lines correspond to tight-binding calculations. The lower band shows the desired inversion level due to effective negative coupling.

wave.

First we note that any Hermitian matrix  $H$  can be rewritten as a matrix with semipositive secondary diagonals by means of a unitary transformation. We proceed to turn  $H$  into a purely positive nearest-neighbor array. Consider

$$U_{\text{sign}} = \text{diag} \{ e^{-i\Delta_n} \}, \quad (40)$$

where  $\Delta_n = \sum_{m < n} \arg H_{m+1,m}$  is the accumulated phase of the elements in the first diagonal. This trivial "gauge" transformation moves all possible phases to third diagonals or next-to-nearest neighbors; we must now analyze the influence of sign flips in the hopping amplitudes. The zigzag arrays shown in Fig. 2 are made of alternating triangular blocks; therefore, every negative sign occurring in our polarizer corresponds to those bonds lying on the outer part of the array (see Fig. 2). For this reason, we focus on a single triangular block.

The effect of a negative matrix element in this case

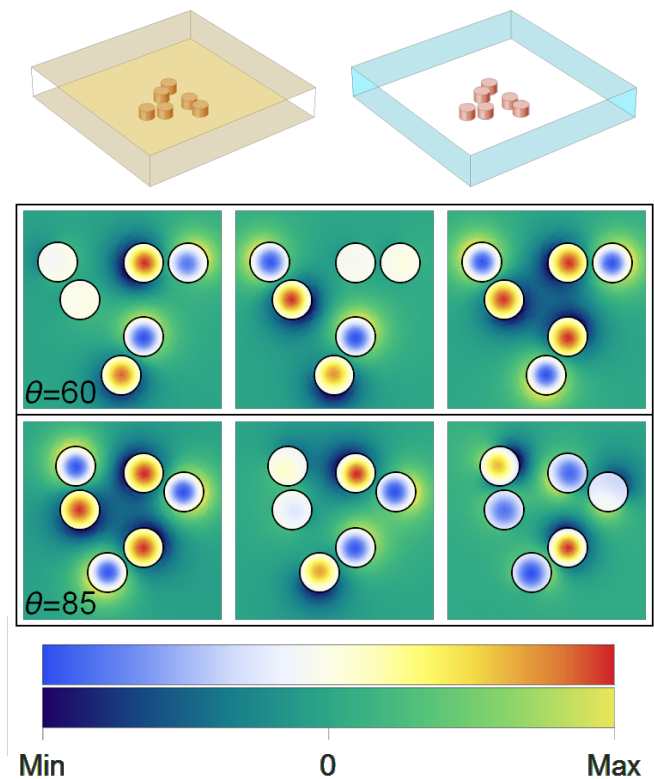


FIG. 11. Upper row: simulated 3D system; dielectric disks depicted in light brown, nonreflective walls in cyan, and perfect conductors in yellow. Lower row: lowest modes for  $\theta = 60$  (before level inversion) and  $\theta = 85$  (after level inversion). Two different scales have been used inside and outside the cylinders for better visibility. The wave functions outside the cylinders exhibit the nature of couplings.

produces level inversion, as shown by the Hamiltonians

$$H_{\text{Block}}^{\pm} = \begin{pmatrix} E_0 & \Delta & \pm\Delta \\ \Delta & E_0 & \Delta \\ \pm\Delta & \Delta & E_0 \end{pmatrix} \quad (41)$$

which are related by the unitary transformation  $U_{\text{Block}} = \text{diag} \{-1, 1, -1\}$  in the form

$$U_{\text{Block}} H_{\text{Block}}^{-} U_{\text{Block}}^{\dagger} = 2E_0 - H_{\text{Block}}^{+}. \quad (42)$$

This compels one to consider each triangular block on the polarizer as a level-inverting interaction. The simplest way to produce a level-inverted band is by the introduction of dimers instead of single-resonance sites; see Fig. 8.

In the ideal situation where only a change of sign is intended, the dimers are placed such that the  $C_3$  symmetry of the array is not destroyed. To this end, the orientation of the dimers must be constrained, as shown in Fig. 9. Note, however, that the full symmetry of an equilateral triangle  $C_{3v}$  is now, in general, broken. The resulting shapes are hexagonal variants described by the

following tight-binding matrix:

$$\begin{pmatrix} 0 & d & f & 0 & f & g \\ d & 0 & g & 0 & 0 & 0 \\ f & g & 0 & d & f & 0 \\ 0 & 0 & d & 0 & g & 0 \\ f & 0 & f & g & 0 & d \\ g & 0 & 0 & 0 & d & 0 \end{pmatrix}. \quad (43)$$

The spectrum contains two degenerate doublets and two singlets. Moreover, their eigenfrequencies are symmetrically disposed around  $E_0$ . In essence, we have produced an additional inverted copy of the spectrum due to a splitting caused by strong intradimer coupling. For dielectric disks, a numerical simulation of Maxwell equations with space-dependent dielectric functions has been run. The results in Fig. 10 show that the inverted copy corresponds to eigenfrequencies sitting to the left of the original isolated resonance at  $E_0$ . Moreover, this occurs only for  $\theta > \theta_c \sim 78$  deg, which establishes the existence of a diabolic (crossing) point in the spectrum [39]. Transverse modes are shown in Fig. 11, where the panels exhibit a change in the sign of the wave function inside at least one dimer, due to the transition at  $\theta_c$ .

Finally, our results show that the assembled structure of alternating triangles must produce two bands opening around each level of a single dimer: we may choose to work in one or the other. A similar spectral structure has been achieved in other contexts: nuclear resonances [40], flat microwave cavities [41, 42], and electronic circuits [43].

## VI. CONCLUSION AND OUTLOOK

In this paper, we have studied a tight-binding model that is described by a Dirac equation. We have focused on the time-dependent dynamics in the positive- and negative-energy bands. In the language of the Dirac equation, this corresponds to particles and antiparticles. We have developed the theory that allows one to split these components by means of a localized potential; this in turn could be a first step towards the actual measurement of quasispin using wave packets. We have further shown that even though the interactions are long ranged, taking as few as next-to-nearest-neighbor interactions, in a very localized region in space, yields reasonable results. In connection with the possibility of generating pure spin waves with our splitter, we would like to add that waves with vanishing average momentum have been achieved and that quasispin can be indeed spatially transported. However, the mechanism relies on deformations rather than the application of external magnetic fields as in the usual case of spin. The local nature of the interaction is highly desirable if an experimental emulation is pursued. We have indeed explored such scenario in the context of a bidimensional array of dielectrics in a microwave cavity. In such an array, it has been necessary to consider

level inversion, which we have demonstrated using a simple geometric array. The next obvious step would be to carry out the experiment.

## ACKNOWLEDGMENTS

Financial support from CONACyT under Projects CB No. 2012-180585 and No. 153190 and UNAM-PAPIIT IN111015 is acknowledged. We are grateful to LNS-BUAP for allowing extensive use of their supercomputing facility.

### Appendix: An alternative splitter

A simple alternative splitter can be designed if we replace Eq. (17) by

$$V_{\pm}(x) = \begin{cases} V(x) & \text{for particles} \\ -V(x) & \text{for holes} \end{cases}. \quad (A.1)$$

Then, Hamiltonian (18) would be replaced by

$$\tilde{H}_{\text{FW}} = H_{\text{FW}} + \sigma_3 \otimes V_{\text{FW}}. \quad (A.2)$$

In formula (20), one would need an extra term,

$$\begin{aligned} V_{11} = e^{-i\phi/2} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) V_{\text{FW}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi/2} \\ + e^{-i\phi/2} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) V_{\text{FW}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi/2}, \end{aligned}$$

which leads to the following changes in the matrix elements:

$$\begin{aligned} \langle n|V_{11}|n'\rangle = \frac{1}{8\pi^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} V_{\text{FW}}(m) \\ \times \left[ I_{n'-m}^{++} (I_{n-m}^{++})^* + I_{n'-m}^{--} (I_{n-m}^{--})^* \right], \quad (A.3) \end{aligned}$$

for even  $n$  and  $n'$ ,

$$\begin{aligned} \langle n|V_{21}|n'\rangle = \frac{1}{8\pi^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} V_{\text{FW}}(m) \\ \times \left[ I_{n'-m}^{--} (I_{n-m}^{+-})^* - I_{n'-m}^{++} (I_{n-m}^{-+})^* \right], \quad (A.4) \end{aligned}$$

for even  $n$  and odd  $n'$ , and, finally,

$$\begin{aligned} \langle n|V_{22}|n'\rangle = \frac{1}{8\pi^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} V_{\text{FW}}(m) \\ \times \left[ I_{n'-m}^{-+} (I_{n-m}^{-+})^* + I_{n'-m}^{+-} (I_{n-m}^{+-})^* \right], \quad (A.5) \end{aligned}$$

for odd  $n$  and  $n'$ .

- 
- [1] O. Morsch and M. K. Oberthaler, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 179 (2006).
- [2] I. Bloch, *Nat. Phys.* **1**, 23 (2005).
- [3] M. K. Oberthaler, R. Abfaltrer, S. Bernet, J. Schmiedmayer, and A. Zeilinger, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4980 (1996).
- [4] T. Uehlinger, G. Jotzu, M. Messer, D. Greif, W. Hofstetter, U. Bissbort, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 185307 (2013).
- [5] J. Struck, C. Ölschläger, M. Weinberg, P. Hauke, J. Simonet, A. Eckardt, M. Lewenstein, K. Sengstock, and P. Windpassinger, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 225304 (2012).
- [6] U. Kuhl, S. Barkhofen, T. Tudorovskiy, H.-J. Stöckmann, T. Hosain, L. de Forges de Parny, and F. Mortessagne, *Phys. Rev. B* **82**, 094308 (2010).
- [7] S. Barkhofen, M. Bellec, U. Kuhl, and F. Mortessagne, *Phys. Rev. B* **87**, 035101 (2013).
- [8] S. Bittner, B. Dietz, M. Miski-Oglu, P. Oria-Iriarte, A. Richter, and F. Schäfer, *Phys. Rev. B* **82**, 014301 (2010).
- [9] M. Bellec, U. Kuhl, G. Montambaux, and F. Mortessagne, *Phys. Rev. B* **88**, 115437 (2013).
- [10] A. J. Martínez-Galera, I. Brihuega, A. Gutiérrez-Rubio, T. Stauber, and J. M. Gómez-Rodríguez, *Sci. Rep.* **4**, 7314 (2014), arXiv:1411.5805 [cond-mat.mes-hall].
- [11] M. Polini, F. Guinea, M. Lewenstein, H. C. Manoharan, and V. Pellegrini, *Nat. Nanotechnol.* **8**, 625 (2013).
- [12] K. K. Gomes, W. Mar, W. Ko, F. Guinea, and H. C. Manoharan, *Nature* **483**, 306 (2012).
- [13] G. W. Semenoff, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2449 (1984).
- [14] A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nat. Mater.* **6**, 183 (2007).
- [15] A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [16] G. Roati, M. Zaccanti, C. D'Errico, J. Catani, M. Modugno, A. Simoni, M. Inguscio, and G. Modugno, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 010403 (2007).
- [17] L. Fallani, J. E. Lye, V. Guarrera, C. Fort, and M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 130404 (2007).
- [18] J. A. Franco-Villafañe, E. Sadurní, S. Barkhofen, U. Kuhl, F. Mortessagne, and T. H. Seligman, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 170405 (2013).
- [19] E. Sadurní, J. A. Franco-Villafañe, U. Kuhl, F. Mortessagne, and T. H. Seligman, *New J. Phys.* **15**, 123014 (2013).
- [20] E. Sadurní, T. H. Seligman, and F. Mortessagne, *New J. Phys.* **12**, 053014 (2010).
- [21] M. Mancini, G. Pagano, G. Cappellini, L. Livi, M. Rider, J. Catani, C. Sias, P. Zoller, M. Inguscio, M. Dalmonte, and L. Fallani, *Science* **349**, 1510 (2015).
- [22] F. Wilczek, *Nat. Phys.* **5**, 614 (2009).
- [23] J. Alicea, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 076501 (2012).
- [24] V. Kagalovsky, B. Horovitz, Y. Avishai, and J. T. Chalker, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3516 (1999).
- [25] D. Bernard and A. LeClair, *Phys. Rev. B* **64**, 045306 (2001).
- [26] F. Dreisow, M. Heinrich, R. Keil, A. Tünnermann, S. Nolte, S. Longhi, and A. Szameit, *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010).
- [27] L. Meier, G. Salis, I. Shorubalko, E. Gini, S. Schön, and K. Ensslin, *Nat. Phys.* **3**, 650 (2007).
- [28] L. L. Foldy and S. A. Wouthuysen, *Phys. Rev.* **78**, 29 (1950).
- [29] E. D. Vries, *Fortschr. Phys.* **18**, 149 (1970).
- [30] T. M. Rusin and W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* **76**, 195439 (2007).
- [31] R. Gerritsma, G. Kirchmair, F. Zahringer, E. Solano, R. Blatt, and C. F. Roos, *Nature* **463**, 68 (2010).
- [32] E. Sadurní, *Phys. Rev. E* **90**, 033205 (2014).
- [33] C. Dembowski, B. Dietz, H.-D. Gräf, H. L. Harney, A. Heine, W. D. Heiss, and A. Richter, *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003).
- [34] A. A. Fernández-Marín, J. A. Méndez-Bermúdez, J. Carbonell, F. Cervera, J. Sánchez-Dehesa, and V. A. Gopar, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 233901 (2014).
- [35] S. Longhi, *Laser & Photon. Rev.* **3**, 243 (2009).
- [36] J. D. Maynard, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 401–417 (2001).
- [37] J. Böhm, M. Bellec, F. Mortessagne, U. Kuhl, S. Barkhofen, S. Gehler, H.-J. Stöckmann, I. Foulger, S. Gnutzmann, and G. Tanner, *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015).
- [38] D. R. Hofstadter, *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976).
- [39] M. V. Berry, *Proc. R. Soc. Lond. A* **392**, 45 (1984).
- [40] P. von Brentano and M. Philipp, *Phys. Lett. B* **454**, 171 (1999).
- [41] C. Dembowski, H.-D. Gräf, H. L. Harney, A. Heine, W. D. Heiss, H. Rehfeld, and A. Richter, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 787 (2001).
- [42] S. Bittner, B. Dietz, H. L. Harney, M. Miski-Oglu, A. Richter, and F. Schäfer, *Phys. Rev. E* **89** (2014).
- [43] T. Stehmann, W. D. Heiss, and F. G. Scholtz, *J. Phys. A* **37**, 7813 (2004).



# Bibliografía

- [AM76] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin. *Solid state physics*. Science: Physics. Saunders College, 1976.
- [BD64] J.D. Bjorken and S.D. Drell. *Relativistic quantum mechanics*. International series in pure and applied physics. McGraw-Hill, 1964.
- [BDMO<sup>+</sup>10] S. Bittner, B. Dietz, M. Miski-Oglu, P. Oria-Iriarte, A. Richter, and F. Schäfer. Observation of a dirac point in microwave experiments with a photonic crystal modeling graphene. *Phys. Rev. B*, 82:014301, 2010.
- [BKMM13] M. Bellec, U. Kuhl, G. Montambaux, and F. Mortessagne. Tight-binding couplings in microwave artificial graphene. *Phys. Rev. B*, 88:115437, 2013.
- [BMDS07] A. Bermudez, M. A. Martin-Delgado, and E. Solano. Exact mapping of the 2 + 1 dirac oscillator onto the jaynes-cummings model: Ion-trap experimental proposal. *Phys. Rev. A*, 76:041801, Oct 2007.
- [DHK<sup>+</sup>10] Felix Dreisow, Matthias Heinrich, Robert Keil, Andreas Tünnermann, Stefan Nolte, Stefano Longhi, and Alexander Szameit. Classical simulation of relativistic zitterbewegung in photonic lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 105(14), 2010.
- [FW50] Leslie L. Foldy and Siegfried A. Wouthuysen. On the dirac theory of spin 1/2 particles and its non-relativistic limit. *Phys. Rev.*, 78:29–36, Apr 1950.
- [GKZ<sup>+</sup>10] R. Gerritsma, G. Kirchmair, F. Zahringer, E. Solano, R. Blatt, and C. F. Roos. Quantum simulation of the dirac equation. *Nature*, 463:68–71, 2010.

- [Gre00] W. Greiner. *Relativistic Quantum Mechanics. Wave Equations*. Springer, 2000.
- [KBT<sup>+</sup>10] U. Kuhl, S. Barkhofen, T. Tudorovskiy, H.-J. Stöckmann, T. Hosain, L. de Forges de Parny, and F. Mortessagne. Dirac point and edge states in a microwave realization of tight-binding graphene-like structures. *Phys. Rev. B*, 82:094308, 2010.
- [Kit86] C. Kittel. *Introduction to solid state physics*. Wiley, 1986.
- [LLSS07] L. Lamata, J. León, T. Schätz, and E. Solano. Dirac equation and quantum relativistic effects in a single trapped ion. *Phys. Rev. Lett.*, 98:253005, Jun 2007.
- [Mes61] Albert Messiah. *Quantum Mechanics*. Dover books on physics. Dover Publications, 1961.
- [MO06] O. Morsch and M. K. Oberthaler. Dynamics of bose-einstein condensates in optical lattices. *Rev. Mod. Phys.*, 78:179, 2006.
- [Nau07] Gerardo G. Naumis. Internal mobility edge in doped graphene: Frustration in a renormalized lattice. *Phys. Rev. B*, 76:153403, Oct 2007.
- [NSW06] G. G. Naumis, F. Salazar, and C. Wang. Phonon diffusion in harmonic and anharmonic one-dimensional quasiperiodic lattices. *Philosophical Magazine*, 86(6-8):1043–1049, 2006.
- [PB10] J. Patterson and B. Bailey. *Solid-State Physics: Introduction to the Theory*. Springer, 2010.
- [Ram10] P. Ramond. *Group Theory: A Physicist's Survey*. Cambridge University Press, 2010.
- [SÖW<sup>+</sup>12] J. Struck, C. Ölschläger, M. Weinberg, P. Hauke, J. Simonet, A. Eckardt, M. Lewenstein, K. Sengstock, and P. Windpassinger. Tunable gauge potential for neutral and spinless particles in driven lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 108:225304, 2012.
- [SSM10] E. Sadurní, T. H. Seligman, and F. Mortessagne. *New J. Phys.*, 12:053014, 2010.
- [UJM<sup>+</sup>13] T. Uehlinger, G. Jotzu, M. Messer, D. Greif, W. Hofstetter, U. Bissbort, and T. Esslinger. Artificial graphene with tunable interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 111:185307, 2013.

- 
- [Wei95] S. Weinberg. *The Quantum Theory of Fields*. Number v. 1 in The Quantum Theory of Fields 3 Volume Hardback Set. Cambridge University Press, 1995.
- [Zha08] Xiangdong Zhang. Observing *Zitterbewegung* for photons near the dirac point of a two-dimensional photonic crystal. *Phys. Rev. Lett.*, 100:113903, Mar 2008.