



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

DIFRACCIÓN DE MATERIA DESDE EL ENFOQUE DE LA
ELECTRODINÁMICA ESTOCÁSTICA

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

Físico

PRESENTA:

Raúl Puente Mancilla

DIRECTOR:

Luis de la Peña Auerbach



Ciudad Universitaria, CDMX, 2021



Universidad Nacional
Autónoma de México



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.

*“Clama a mí, y yo te responderé,
y te enseñaré cosas grandes y ocultas que tú no conoces.”
- Jeremías 33:3*

*A mi Señor Jesucristo,
A mi esposa y compañera de travesía Elisa y a mi gato Gizmo, sin los cuales este trabajo hubiera
sido escrito un año antes.
A mis padres y hermano, especialmente durante los tiempos difíciles.
A mi amigo y compañero de desvelos Uzmar.
A Luis de la Peña y Ana María Cetto, mis lumbreras. En especial a Herman Batelaan, sin el cual
gran parte de este trabajo hubiera sido imposible.
A todos mis estudiantes que a lo largo de los años me recordaban que ya era tiempo de que
terminara la tesis.*

Reconocimientos

Quisiera reconocer al CONACYT por haber otorgado la beca de asistente de investigador SNI III durante gran parte de la elaboración de este trabajo, y al apoyo financiero otorgado por PAPIIT a través del proyecto IA101918.

Declaración de autenticidad

Por la presente declaro que, salvo cuando se haga referencia específica al trabajo de otras personas, el contenido de esta tesis es original y no se ha presentado total o parcialmente para su consideración para cualquier otro título o grado en esta o cualquier otra Universidad. Esta tesis es resultado de mi propio trabajo y no incluye nada que sea el resultado de algún trabajo realizado en colaboración, salvo que se indique específicamente en el texto.

Raúl Puente Mancilla. Ciudad Universitaria, CDMX, 2021

Índice general

Índice de figuras	IX
1. Introducción	1
1.1. Objetivo y metodología	3
1.2. Estructura de la tesis	3
2. Marco teórico	5
2.1. La teoría de la electrodinámica estocástica	5
2.2. Efecto Kapitza Dirac	9
2.2.1. Versión clásica	9
2.2.2. Versión cuántica	13
2.3. Mecánica cuántica estocástica	16
2.3.1. Cinemática	18
2.3.2. Dinámica	21
2.3.3. Integrando la ecuación de movimiento	23
3. Desarrollo	27
3.1. Fuerza sobre el electrón	27
3.2. Muestreo de los modos del CPC	31
4. Resultados y análisis	33
4.1. Efecto K-D sin Campo de Punto Cero	33
4.2. Efecto K-D con Campo de Punto Cero	35
4.3. Mecánica cuántica estocástica	40
5. Conclusiones	43
Referencias	45

Índice de figuras

2.1.	Diagrama donde se muestran las variables para el cálculo del patrón clásico. La zona roja es la zona del láser, el cual está a una distancia z_{sc} de la pantalla y tiene un ancho D . Nótese cómo el electrón cuya trayectoria original coincide con un máximo del potencial (cercano a un punto con gradiente nulo) casi no se desvía, mientras que otro que incide en una zona cercana al punto de máximo gradiente es desviado mucho más, respecto a la dirección original.	11
2.2.	Gráfica de la nueva distribución de partículas $n(x')$ para un haz incidente $n(x) = 1$ utilizando los parámetros experimentales reportados en la ref. [1]. La intensidad del láser es $I = 1 \times 10^{14} \frac{W}{m^2}$, a una frecuencia $\omega = 3.54 \times 10^{15} \frac{rad}{s}$ y ancho del láser $D = 125 \mu m$. La velocidad de los electrones fue de $v_0 = 1.1 \times 10^7 \frac{m}{s}$, con lo que $\Delta t \simeq D/v = 1.13 \times 10^{-11} s$	12
2.3.	Patrones incidente y resultante obtenidos a través del método de convolución del haz en interacción con el láser utilizando los parámetros experimentales reportados en la ref. [1]. La pantalla se colocó a una distancia $z_{sc} = 24 cm$, con una intensidad del láser $I = 1 \times 10^{14} \frac{W}{m^2}$, a una frecuencia $\omega = 3.54 \times 10^{15} \frac{rad}{s}$ y ancho del láser $D = 125 \mu m$. La velocidad de los electrones fue de $v_0 = 1.1 \times 10^7 \frac{m}{s}$, y el FWHM (<i>Full Width at Half Maximum</i> por sus siglas en inglés) del haz de partículas $B_w = 25 \mu m$	13
2.4.	Coefficientes $ \xi_\nu ^2$ para la difracción en el efecto Kapitza-Dirac cuántico para una intensidad de láser $I = 0.25 \times 10^{14} W/m^2$. Nótese que para $x = \frac{V_0}{\hbar} t_{int} \simeq 1.14$ la probabilidad de que el electrón sea difractado al primer orden es de aproximadamente 0.49, al segundo orden aproximadamente 0.23, al tercer orden aproximadamente 0.02 y al cuarto orden aproximadamente 0.0008.	16
2.5.	Si la transferencia neta de momento del láser a un electrón es $2\nu\hbar k$, este será desviado (con una probabilidad $ \xi_\nu ^2$) con un ángulo $2\nu\hbar k/mv_0$ hacia el ν -ésimo orden de difracción, con lo que el patrón final en la pantalla se puede obtener multiplicando la distribución del haz de electrones antes de la zona del láser y la probabilidad de cada orden de difracción.	17
2.6.	Patrón de difracción para la versión cuántica del efecto Kapitza-Dirac para una intensidad de láser $I = 0.25 \times 10^{14} W/m^2$	17
4.1.	Perfil inicial del haz de $N = 100,000$ electrones, en donde las posiciones en el eje y fueron generadas al azar siguiendo una distribución gaussiana con $\sigma_y \simeq 10.6 \mu m$. Curva sólida para comparación.	33
4.2.	Distribución del momento transversal p_y del haz de $N = 100,000$ electrones generada al azar siguiendo una distribución gaussiana con $\sigma_{p_y} \simeq 2.12 \times 10^{-27} kg \cdot m/s$. Curva sólida para comparación.	34

4.3. Distribución en la pantalla del haz de $N = 100,000$ electrones después de interactuar con el láser, comparada con la curva obtenida a través de la convolución (curva en **anaranjado**). 35

4.4. Distribución en la pantalla del haz de $N = 100,000$ electrones después de interactuar con el láser, modificando la intensidad del láser en los resultados de la convolución por un factor de aproximadamente 0.7 (curva en **anaranjado**). 36

4.5. Distribución en la pantalla del haz de $N = 100,000$ electrones después de interactuar con el láser, integrando sobre la intensidad láser que depende de z de forma gaussiana en los resultados de la convolución (curva en **anaranjado**) 37

4.6. Distribución en la pantalla del haz de $N = 100,000$ electrones para diferentes intensidades del láser, integrando sobre la intensidad láser que depende de z de forma gaussiana en los resultados de la convolución (curva en **anaranjado**) 38

4.7. Muestreo de los modos del CPC en el espacio \vec{k} . A la *izquierda*, los puntos en color **azul** forman el cascarón esférico de grosor Δ/c para $\Delta = (10^7)\Gamma\omega_L^2 \simeq 10^{15} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$. El número de vectores de propagación es $N_{\vec{k}} = 20,000$. Los puntos en color **rojo** sobresaltan la rebanada del cascarón alrededor de $|\vec{k}_x| \simeq 0$. A la *derecha* se puede ver la proyección de esta rebanada en el plano $k_y k_z$. Al mismo tiempo se muestran círculos en **negro** los cuales fueron muestreados de manera cartesiana (para comparación). 39

4.8. Distribución en la pantalla del haz de $N = 2,000$ electrones después de interactuar con el láser, $N_{\vec{k}} = 5,000$ modos del CPC, integrando sobre la intensidad láser que depende de z de forma gaussiana en los resultados de la convolución (curva en **anaranjado**). 40

4.9. Promedio de ensemble (para un mismo tiempo t) sobre las trayectorias de $N = 1,000$ electrones al interactuar con el láser, tomando $N_{\vec{k}} = 5,000$ modos del CPC. La columna izquierda muestra los promedios de las posiciones x , y y z , mientras que la columna derecha muestra las velocidades promedio v_x , v_y y v_z 41

4.10. Promedio de ensemble sobre la energía de $N = 1,000$ electrones al interactuar con el láser, tomando $N_{\vec{k}} = 5,000$ modos del CPC. 42

4.11. Promedio de ensemble sobre las trayectorias de $N = 1,000$ electrones al interactuar con el láser, tomando $N_{\vec{k}} = 5,000$ modos del CPC, para calcular las velocidades de flujo \vec{v} (curva en color **rojo**) y de difusión \vec{u} (curva en color **azul**). 42

Capítulo 1

Introducción

Al estudiar por primera vez mecánica cuántica, el estudiante típico pasa por al menos tres etapas no necesariamente disjuntas: primero curiosidad y asombro por el intimidante aparato matemático, luego frustración por la falta de imágenes claras en la dinámica, y finalmente resignación. Es posible que el lector recuerde en cuál de estas etapas pasó más tiempo, o probablemente sigue.

Es interesante notar que ésto no sólo sucede a los estudiantes, pues no es difícil encontrar a gente notable como Richard Feynman¹, Gell-Mann², o aún fundadores de la teoría confesando su falta de entendimiento de la teoría. Por ejemplo, al leer los 4 artículos en donde Erwin Schrödinger introdujo su ecuación y discutió algunas implicaciones inmediatas [4], se puede notar cómo la seguridad del autor sobre la realidad física de la función ψ va en decremento³, al punto en donde el autor cuestiona la falta de realidad física de su ecuación. Esta dificultad de asignar significado físico a los elementos más fundamentales derivó en la multitud de interpretaciones a la teoría.

La interpretación más popular, profesada consciente o inconscientemente por la mayoría de los físicos es la llamada *interpretación ortodoxa* (también conocida como interpretación de Copenhage), la cual propone básicamente que la mecánica cuántica describe de manera completa y exhaustiva un único sistema físico (un electrón en presencia de un potencial, por ejemplo), entre cuyos principales representantes se encuentran Niels Bohr, Werner Heisenberg, Max Born, Pascual Jordan, etcétera. Al adoptar esta interpretación, inmediatamente uno se enfrenta con algunos problemas conceptuales, como el famoso problema de la medición: Si se tiene una función de onda en términos de la posición del sistema, al realizar una medición de éste, la función de onda “colapsa” instantáneamente a la posición medida. La pregunta es, entonces ¿cuál era la posición del sistema antes de que se realizara la medición? Intentando resolver este problema, algunos de los fundadores de la interpretación comenzaron a proponer ideas cada vez más radicales, como el que las mediciones *crean* el resultado como Jordan⁴, o incluso hasta llegaron a negar la realidad física del sistema como Heisenberg⁵. Todo este embrollo interpretativo se expresa mejor en palabras de Edwin Jaynes: “[la

¹En sus palabras “...Me parece que puedo decir con toda seguridad que nadie entiende la mecánica cuántica” durante su sexta lectura en la Universidad de Cornell el 18 de noviembre de 1964 [2].

²Quien expresó “La mecánica cuántica, esa misteriosa, confusa disciplina, que nadie entiende realmente pero que sabemos cómo utilizar.” [3].

³En los primeros dos artículos, Schrödinger señala que la función ψ debe ser de origen electromagnético, posiblemente de alguna *vibración* del sistema. Sin embargo, al final del último de sus 4 artículos, indica que dicha interpretación es muy probablemente errónea, pues todo le parece indicar que la función ψ no es más que un objeto matemático que permite describir, y nada más.

⁴Quien, de acuerdo con Max Jammer, Jordan declaró que las “observaciones no sólo perturban lo que sea que se desea medir, sino que producen el resultado.”[5]

⁵Quien escribe “...los átomos o las partículas elementales no son reales en sí mismas; forman un mundo de probabilidades y posibilidades en lugar de objetos o hechos.” [6]

interpretación ortodoxa] es un peculiar agregado, en parte de elementos reales en la naturaleza, en parte de información humana incompleta acerca de la naturaleza –todo revuelto por Heisenberg y Bohr en un omelette que nadie a la fecha ha sido capaz de separar.”[7]

En total contraste (tanto en el tipo de lectura como en cantidad de profesantes) con la interpretación de Copenhage se encuentra la interpretación de ensemble o interpretación estadística. Algunos de los principales expositores de esta interpretación son John Slater, Schrödinger y Einstein. Esta interpretación propone que la mecánica cuántica describe la estadística de un conjunto muy grande (idealmente infinito) de sistemas idénticamente preparados, sin describir específicamente a ninguno de los miembros del ensemble en particular. Esta interpretación intenta recuperar la postura realista usual en el resto de las teorías físicas⁶. Desde este punto se señala que cualquier referencia en este trabajo a la mecánica cuántica será desde el enfoque de la interpretación estadística.

Siguiendo la interpretación estadística de la mecánica cuántica, la siguiente pregunta es ¿cuál es la razón de que la descripción sea estadística, es decir sin dar detalles en particular de un subsistema del ensemble? ¿será un asunto de incompletez descriptiva (como en la mecánica estadística)? o será que realmente los sistemas cuánticos se comportan aleatoriamente sin razón alguna. Dicho de otro modo, usando el argot de la literatura sobre este tema ¿el comportamiento aleatorio que brinda la teoría es de carácter epistemológico (es decir de la descripción) o de carácter ontológico (es decir de la naturaleza)? Si, además de recuperar el realismo⁷ tácito del resto de la física, se busca una explicación causal y determinista, la conclusión inmediata es que la descripción que brinda la mecánica cuántica es incompleta. La mayoría de los esfuerzos para encontrar dicha descripción ha sido desde la misma teoría, suponiendo que hay variables adicionales a los que estudia la mecánica cuántica que permitan dar una descripción más completa de los sistemas cuánticos. A este tipo de variables se les conoce en la literatura como “variables ocultas”. Desde aquí vale la pena señalar que, pese a que la mayoría de los físicos califica de manera generalizada a cualquier intento de teoría más fundamental como de variables ocultas, ésta no es la única posibilidad⁸.

Uno de los primeros intentos en este sentido es el artículo de Einstein, Podolsky y Rosen[10], en donde los autores intentan mostrar la incompletez de la mecánica cuántica⁹ para motivar la búsqueda de una teoría más fundamental. Tales esfuerzos han ido en decremento a lo largo de los años principalmente debido a la aparición de los *teoremas de imposibilidad*. Sin duda, el más famoso de ellos es el teorema de Bell [12], el cual (en su lectura más común) plantea que una descripción local realista de la naturaleza que sea compatible con la mecánica cuántica es imposible. Sin embargo, aún hay discusión asociada a dicha posición, particularmente por la suposición de “independencia de la medición”, necesaria para la obtención de las desigualdades [13, 14]. Es decir, aún es discutido si es posible plantear una teoría local realista que coincida con la mecánica cuántica. Por ejemplo, hay una propuesta de que dicha descripción se puede construir a través de la electrodinámica clásica del campo de vacío, o Campo de Punto Cero (CPC) y la mecánica (clásica o relativista) de

⁶Siguiendo la posición de Einstein, quien escribe “Al momento en que uno intenta sostener la tesis de que la mecánica cuántica estadística es en principio capaz de producir una descripción completa de un sistema físico individual, se arriba a concepciones demasiado implausibles. Por otro lado, tales dificultades de la interpretación teórica desaparecen, si uno interpreta la descripción de la mecánica cuántica como una descripción estadística de un conjunto de sistemas idénticamente preparados.” [8]. El lector que desee conocer un poco más de esta discusión, además de algunas de las críticas a esta interpretación, se invita a revisar el primer capítulo de la ref. [9].

⁷Entiéndase aquí por realismo a “la creencia de que existe un mundo externo e independiente de nosotros, el cual actúa en nosotros, y nosotros actuamos en él para saber más de él.” [9](ligeramente modificado).

⁸Cuesta trabajo en este punto no preguntarse qué hubiera pasado si, en lugar de partir de los primeros principios de la mecánica estadística, se hubieran agregado “variables ocultas” a la termodinámica al intentar encontrar una teoría más fundamental.

⁹Es sobre todo interesante remarcar que Einstein quedó insatisfecho con la forma que tomó el argumento debido a que “...el punto principal quedó, por decirlo de alguna manera, enterrado en la erudición.”[11].

la partícula. A esta descripción se le llama Electrodinámica Estocástica, como la propuesta por el grupo del Dr. de la Peña en la ref. [9]. Esta tesis, por tanto, intenta estudiar un poco más la versión de la electrodinámica estocástica presentada por el grupo del Dr. de la Peña en un problema en específico: la difracción de materia.

1.1. Objetivo y metodología

El problema específico bajo estudio en este trabajo es el de la difracción de materia debida a un láser, mejor conocido en la literatura como el efecto Kapitza-Dirac. Asimismo, esta tesis pretende establecer un puente con trabajos de índole numérico sobre el tema como los de las referencias [15, 16], las cuales han arrojado discrepancias aparentemente irreconciliables con la propuesta del grupo del Dr. de la Peña. Todo apunta a que las discrepancias entre estas dos líneas de investigación se deben a que los trabajos numéricos utilizan descripciones estrictamente clásicas, mientras que el grupo del Dr. de la Peña insiste en que la descripción no puede ser clásica. Sin embargo, la conexión entre ambas líneas no es clara, por lo que en esta tesis se intenta elucidar algunas condiciones necesarias para que ambas líneas sean compatibles. Aún se desconoce la manera de reconciliar ambos enfoques.

Richard Feynman describió el problema de la difracción de electrones como un fenómeno “el cual tiene el corazón de la mecánica cuántica. En realidad, contiene el único misterio”[17]. La primera dificultad surge al momento de intentar simular la interacción del CPC con la partícula sometido a las condiciones de frontera impuestas por la pantalla opaca como elemento difractor. Es principalmente por esta razón que se buscó simplificar el problema a una versión del fenómeno de difracción de materia en el que el elemento difractor es más simple: un haz de luz de una frecuencia específica que forma una onda estacionaria. A dicho efecto se le conoce como el efecto Kapitza-Dirac[18]. Este efecto tiene dos versiones:

- Clásica, en donde el haz de luz es de frecuencia arbitraria, y
- Cuántica, en donde la frecuencia del haz de luz es del orden de la frecuencia de de Broglie de las partículas difractadas.

En esta tesis se estudia primero la versión clásica del fenómeno, particularmente con el objetivo de probar el algoritmo de simular un electrón a la vez en presencia del láser, para construir así la estadística corriendo una gran cantidad de electrones simulados en paralelo. Luego, se prueba el mismo algoritmo pero introduciendo una muestra de modos del CPC para ver si ésto produce algún cambio en la estadística del sistema, y discutir la razón de dichos resultados en comparación con otros trabajos de carácter numérico que se encuentran en la literatura.

1.2. Estructura de la tesis

Este trabajo está dividido en 5 capítulos.

- En el capítulo 2 se discuten los fundamentos teóricos para entender esta tesis. Primero una breve introducción a la electrodinámica estocástica, empezando por la forma general de los modos del Campo de Punto Cero, mostrando que su densidad espectral de energía depende de la frecuencia de cada modo normal ω de manera necesariamente proporcional a ω^3 , y que la energía por modo normal es proporcional a ω , hasta explicar la manera de introducir

el volumen V a la simulación numérica y así establecer una expresión para la amplitud de los campos de cada modo normal. Luego se estudian las dos versiones del efecto Kapitza-Dirac, clásica y cuántica, obteniendo en ambos casos analíticamente el patrón que se observa en la pantalla después de la difracción del haz de electrones debido a un láser de manera experimental. Finalmente se introduce a la teoría de la mecánica cuántica estocástica, la cual permite ver algunas condiciones necesarias para observar efectos cuánticos en un ensemble expuesto a una fuente de estocasticidad.

- En el capítulo 3 se desarrolla el método numérico utilizado para seguir cada electrón en interacción con el láser (y el CPC para la versión cuántica), buscando obtener los patrones del capítulo 2 usando trayectorias de electrones individuales.
- En el capítulo 4 se muestran los patrones obtenidos a través del método presentado en el capítulo 3 y se discuten las similitudes y diferencias con los patrones del capítulo 2.
- En el último capítulo se discuten las razones del por qué el método descrito en el capítulo 3 reproduce adecuadamente la versión clásica del efecto KD, pero falla en obtener los resultados de la versión cuántica. En particular, se exploran las características necesarias expuestas en la última sección del capítulo 2, comparando también con trabajos de naturaleza similar para otros sistemas. Además se plantean algunas preguntas finales indicando posibles direcciones de trabajo futuro.

Todo desarrollo en este trabajo utiliza implícitamente el Sistema Internacional de unidades.

Capítulo 2

Marco teórico

Este trabajo está basado, esencialmente, en tres secciones: Los fundamentos de la electrodinámica estocástica (EDE), el efecto Kapitza-Dirac (KD) en sus dos versiones, clásica y cuántica, y finalmente la mecánica cuántica estocástica.

2.1. La teoría de la electrodinámica estocástica

La pregunta inicial de la que parte la teoría es la que aparece naturalmente al intentar identificar cómo entra la estocasticidad a un sistema cuántico. De hecho, esta pregunta ha sido analizada repetidas veces a lo largo de los años, especialmente por el carácter probabilístico de la mecánica cuántica, por ejemplo en las transiciones radiativas (aparentemente espontáneas) en sistemas atómicos y moleculares. La teoría que se revisa en esta sección atribuye la estocasticidad a la interacción de las partículas con un campo electromagnético aleatorio de fondo (o Campo de Punto Cero), las cuales a su vez emiten radiación electromagnética por las aceleraciones complicadas a las que se someten. Así, esta teoría propone que se llega a un estado de equilibrio en donde la partícula emite tanta energía por la radiación como la que absorbe del campo. A esta teoría se le conoce como la Electrodinámica Estocástica (EDE por sus siglas, o tal vez más conocida como SED por sus siglas en inglés). Entre los resultados más sobresalientes que brinda esta teoría están la posibilidad de una explicación de la estabilidad atómica [19], el efecto Casimir [20], la obtención de las expresiones correctas de los coeficientes de Einstein [9], entre otros.

Ahora, como se discute en la ref. [21], se propone como hipótesis que el Campo de Punto Cero posea ciertas propiedades razonables, como la homogeneidad (es decir, que sea invariante bajo traslaciones), la isotropía (que sea invariante bajo rotaciones) y la invariancia de Lorentz (que sea invariante bajo cambios de sistema inercial)¹. De estas propiedades se puede derivar de manera sencilla la estructura general del campo como sigue. Si se considera que el campo está formado por ondas planas de frecuencia angular ω que se propagan en dirección arbitraria \vec{k} y tienen polarización dada por el vector $\hat{\varepsilon}$, el campo se escribe sumando sobre todas las direcciones y polarizaciones

$$\vec{E}_{\text{cpc}}(\vec{r}, t) = \text{Re} \sum_{\lambda=1}^2 \int \hat{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) h(\omega) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega t + i\eta(\vec{k}, \lambda)} d^3 k, \quad (2.1a)$$

¹Vale la pena aquí señalar que esta no es la única manera de interpretar la EDE. Por ejemplo, Boyer propone que la radiación del Campo de Punto Cero es algún tipo de radiación remanente que simplemente afecta la elección de las condiciones de frontera para los campos.

$$\vec{B}_{\text{cpc}}(\vec{r}, t) = \text{Re} \sum_{\lambda=1}^2 \int \frac{\vec{k} \times \hat{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda)}{\omega} h(\omega) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t + i\eta(\vec{k}, \lambda)} d^3 k, \quad (2.1b)$$

donde η es un ángulo de fase aleatorio uniformemente distribuido en $[0, 2\pi)$ que representa la componente estocástica del campo y depende, al igual que la polarización de cada onda, de la dirección de propagación \vec{k} , al igual que de la base de polarizaciones $\lambda = 1, 2$. Luego, como para cualquier onda plana transversal, se cumple que

$$\hat{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \vec{k} = 0, \quad \hat{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \hat{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda') = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (2.2)$$

Nótese cómo se introdujo la función $h(\omega_k)$ para describir la amplitud del campo (en general compleja), la cual depende sólo de la frecuencia $\omega_k = c|\vec{k}|$ por la hipótesis de isotropía. Ahora, para encontrar una expresión entre la densidad espectral de energía $\rho(\omega_k)$ y la función $h(\omega_k)$, se calcula la densidad de energía del campo [22]

$$u = \int \rho(\omega) d\omega = \frac{1}{2} \left\langle \epsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \vec{B}^2 \right\rangle, \\ \text{i.e. } u = \frac{2\epsilon_0}{2} \sum_{\lambda_1=1}^2 \sum_{\lambda_2=1}^2 \int \int \hat{\varepsilon}(\vec{k}_1, \lambda_1) \cdot \hat{\varepsilon}(\vec{k}_2, \lambda_2) h(\omega_1) h(\omega_2) \delta^3(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \delta_{\lambda_1\lambda_2} \times \frac{1}{2} d^3 k_1 d^3 k_2, \quad (2.3)$$

donde $\langle \cdot \rangle$ representa el promedio temporal en un período completo y ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío. Así, el 2 que aparece al inicio de la última expresión se debe a la igualdad de contribución de la energía de $\epsilon_0 \vec{E}^2$ y \vec{B}^2/μ_0 , mientras que el factor $\frac{1}{2}$ del final aparece debido a que

$$\left\langle \cos(\vec{k}_1 \cdot \vec{r} - \omega_1 t + \eta) \cos(\vec{k}_2 \cdot \vec{r} - \omega_2 t + \eta) \right\rangle = \frac{1}{2} \delta^3(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \delta_{\lambda_1\lambda_2}, \quad (2.4)$$

por tanto, la densidad de energía del campo queda como

$$u = \frac{1}{2} \left\langle \epsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \vec{B}^2 \right\rangle = \frac{\epsilon_0}{2} \sum_{\lambda=1}^2 \int h^2(\omega) d^3 k = \int \epsilon_0 h^2(\omega) d^3 k = \int f(\omega) d^3 k, \quad (2.5)$$

donde $f(\omega) = \epsilon_0 h^2(\omega)$ representa la energía por modo normal. Si se resuelve esta última integral usando coordenadas esféricas polares y haciendo $k = \omega/c$

$$u = \frac{1}{2} \left\langle \epsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \vec{B}^2 \right\rangle = \int \rho(\omega) d\omega = \int 4\pi f(\omega) \frac{\omega^2}{c^3} d\omega, \quad (2.6)$$

llegamos a que la densidad espectral de energía es

$$\rho(\omega) = \frac{4\pi}{c^3} \omega^2 f(\omega). \quad (2.7)$$

Finalmente, para encontrar la forma explícita de la función $f(\omega)$, se utiliza la hipótesis de la

invariancia de Lorentz del campo.

Si suponemos un sistema inercial que se mueve con velocidad $\vec{v} = v\hat{x}$ respecto al sistema anterior, las ondas electromagnéticas planas (transversales) se transforman en ondas electromagnéticas planas (también transversales) con vectores de onda y frecuencias transformadas, de acuerdo con las ecuaciones

$$k'_x = \gamma \left(k_x - \frac{v}{c^2} \omega \right), \quad k'_y = k_y, \quad k'_z = k_z, \quad (2.8a)$$

$$\omega' = \gamma(\omega - vk_x), \quad (2.8b)$$

con $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$, por lo que $d^3k = d^3k' \gamma(1 - vk_x/\omega)$, y al substituir en la integral de la densidad de energía en el sistema primado se obtiene

$$u' = \int f'(\omega') d^3k' = \int f' \left[\gamma \left(1 - \frac{v}{\omega} k_x \right) \omega \right] \gamma^{-1} \left(1 - \frac{v}{\omega} k_x \right)^{-1} d^3k. \quad (2.9)$$

Si se exige que $u' = u$, entonces f y f' se relacionan a través de la ecuación

$$f' \left[\gamma \left(1 - \frac{v}{\omega} k_x \right) \omega \right] = \gamma \left(1 - \frac{v}{\omega} k_x \right) f(\omega). \quad (2.10)$$

Vemos inmediatamente que sólo cuando f' y f son funciones lineales de su argumento, la dependencia direccional de vk_x desaparece, por lo que se concluye que

$$f(\omega) = \text{const} \times \omega. \quad (2.11)$$

En la teoría se postula que la constante sea $\hbar/2$, por lo que la energía por modo normal queda como

$$f(\omega) = \frac{1}{2} \hbar \omega, \quad (2.12)$$

con lo que la densidad espectral de energía dada por la ecuación (2.7) resulta ser

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar}{c^3} \omega^3. \quad (2.13)$$

Ya conocidas las expresiones de los campos del CPC (\vec{E} y \vec{B}), estas se agregan a la Segunda Ley de Newton para la dinámica de cada partícula del ensemble (suponiendo que $|\vec{v}| \ll c$). La ecuación que describe la dinámica de la partícula+CPC en la Electrodinámica estocástica se conoce en la literatura como ecuación de Abraham-Lorentz

$$m\ddot{\vec{r}} \simeq \vec{F}_{\text{ext}} + m\Gamma\ddot{\vec{r}} + q \left(\vec{E}_{\text{cpc}} + \vec{v} \times \vec{B}_{\text{cpc}} \right), \quad (2.14)$$

donde el término con

$$\Gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2e^2}{3mc^3}, \quad (2.15)$$

representa la reacción de radiación y \vec{F}_{ext} representa la fuerza externa a la que se somete el sistema. De acuerdo con la ref. [23], para evitar las soluciones divergentes y el comportamiento acausal de la ecuación (2.14), se utiliza la ecuación alternativa

$$m\ddot{\vec{r}} \simeq \vec{F}_{\text{ext}} + \Gamma \frac{d\vec{F}_{\text{ext}}}{dt} + q \left(\vec{E}_{\text{cpc}} + \vec{v} \times \vec{B}_{\text{cpc}} \right) + q\Gamma \frac{d}{dt} \left(\vec{E}_{\text{cpc}} + \vec{v} \times \vec{B}_{\text{cpc}} \right), \quad (2.16)$$

donde las expresiones para los campos eléctrico y magnético del Campo de Punto Cero están dadas por las ecuaciones (2.1).

Debido a la naturaleza numérica de este trabajo, se necesita modificar levemente la manera de calcular el CPC, introduciendo la dependencia de las componentes eléctrica y magnética de este. Nótese que pese a que el sistema a analizar es ilimitado (razón por la cual los campos eléctrico y magnético se expresan a través de una integral), se requiere limitar el volumen de la simulación al volumen V , el cual tendrá que eventualmente hacerse tender a infinito para corroborar la convergencia de los resultados. Así, limitar la simulación a un volumen finito V induce un cambio en la forma en que se representan las componentes eléctrica y magnética de los modos del CPC, pues en lugar de integrar sobre d^3k , se suma sobre los vectores de onda \vec{k}

$$\vec{E}_{\text{cpc}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \lambda} \hat{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \left[\tilde{A}(\vec{k}, \lambda) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t + i\eta(\vec{k}, \lambda)} + \tilde{A}^*(\vec{k}, \lambda) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r} + i\omega t - i\eta(\vec{k}, \lambda)} \right], \quad (2.17a)$$

$$\vec{B}_{\text{cpc}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2c} \text{Re} \sum_{\vec{k}, \lambda} \hat{k} \times \hat{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda) \left[\tilde{A}(\vec{k}, \lambda) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t + i\eta(\vec{k}, \lambda)} + \tilde{A}^*(\vec{k}, \lambda) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r} + i\omega t - i\eta(\vec{k}, \lambda)} \right], \quad (2.17b)$$

donde $\tilde{A}(\vec{k}, \lambda)$ representa la amplitud de los campos. Siguiendo el procedimiento usual para calcular la densidad de energía del campo (ver ecuación (2.5)), se tiene que

$$u = \frac{\epsilon_0}{2} \sum_{\vec{k}, \lambda} |\tilde{A}(\vec{k}, \lambda)|^2, \quad (2.18)$$

y, según la ecuación (2.12), para un volumen V , la densidad de energía del campo es

$$u_{\text{cpc}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{\hbar\omega}{2}, \quad (2.19)$$

por lo que la amplitud de los campos \tilde{A} para el sistema delimitado por un volumen V queda como

$$A_{\text{cpc}}(\vec{k}, \lambda) = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\epsilon_0 V}}, \quad (2.20)$$

con lo que las componentes eléctrica y magnética del CPC están dadas por las expresiones

$$\vec{E}_{\text{cpc}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \lambda} \left[\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\epsilon_0 V}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \eta)} + cc. \right] \hat{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda), \quad (2.21a)$$

$$\vec{B}_{\text{cpc}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2c} \sum_{\vec{k}, \lambda} \left[\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\epsilon_0 V}} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t + \eta)} + cc. \right] \hat{k} \times \hat{\varepsilon}(\vec{k}, \lambda). \quad (2.21b)$$

Estas últimas ecuaciones son las que se utilizarán en el capítulo 3 al modelar numéricamente el comportamiento de los electrones.

2.2. Efecto Kapitza Dirac

Al hacer incidir un haz de electrones sobre un láser de frecuencia $\omega = 2\pi c/\lambda$, experimentalmente se observa una desviación de los electrones en la dirección del láser. Esta idea, inicialmente propuesta en 1933 por Pyotr Kapitsa y Paul Dirac [18], fue sugerida como el fenómeno inverso al de la difracción de la luz, en donde un haz de partículas juega el papel de la onda incidente y el elemento difractor se crea a partir de una onda electromagnética estacionaria. Sin embargo, debido a la débil interacción entre la *rejilla difractora* de luz y el haz de partículas, la observación experimental de este fenómeno tuvo que esperar hasta la invención del láser. No fue sino hasta hace algunos años en que Freimund *et al.* [24] observaron el fenómeno por primera vez en el laboratorio (precisamente como fue propuesto por Kapitsa y Dirac). Cabe señalar que hay dos versiones del fenómeno: una clásica, que simplemente viene de la desviación mecánica de los electrones al pasar por la onda electromagnética estacionaria, y una cuántica, la cual aparece cuando la longitud de onda del láser λ es del orden de la longitud de onda de de Broglie $\lambda_d B = h/p$ de los electrones.

2.2.1. Versión clásica

El patrón de dispersión en la versión clásica del efecto K-D se conoce como “dispersión de arcoíris” [25]. Para describir este efecto, es necesario considerar la interacción entre el haz y la onda estacionaria. Supondremos que el movimiento del electrón tiene velocidad (previa a la interacción con el láser) $\vec{v} = v\hat{z}$ y que la onda estacionaria está formada por dos ondas anti-propagantes de la misma frecuencia, polarización y fase, cuyos campos eléctricos están dados por

$$\vec{E}_1 = E_{01} e^{i(kx - \omega t)} \hat{z}, \quad \vec{E}_2 = E_{02} e^{-i(kx + \omega t)} \hat{z}, \quad (2.22)$$

es decir, la polarización de la onda estacionaria apunta en la misma dirección que la velocidad inicial del electrón, y la dirección de propagación de la onda es \hat{x} . Suponiendo por simplicidad que $E_{01} = E_{02} = E_0/2$, se tiene que la parte real del campo eléctrico resultante es

$$\text{Re}\{\vec{E}(x, t)\} = \frac{E_0}{2} [\cos(\omega t - kx) + \cos(\omega t + kx)] \hat{z} = E_0 \cos kx \cos \omega t \hat{z}, \quad (2.23)$$

mientras que la expresión del campo magnético viene de la ley de Faraday

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{E} &= E_0 k \sin kx \cos \omega t \hat{y} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \implies \vec{B}(x, t) &= -\frac{1}{c} E_0 \sin kx \sin \omega t \hat{y}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

es decir, el campo magnético tiene una diferencia de fase respecto al campo eléctrico en $\pi/2$ tanto en el espacio como en el tiempo. El efecto inmediato de esta diferencia de fase es que habrá una fuerza transversal neta sobre el electrón en la dirección del láser

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \simeq qE_z \hat{z} - qv_z B_y \hat{x} \quad (2.25)$$

$$\implies \dot{v}_z \simeq \frac{q}{m} E_0 \cos kx \cos \omega t \therefore v_z = \frac{qE_0}{m\omega} \cos kx \sin \omega t, \quad (2.26)$$

en donde se utilizó la aproximación de que la desviación del electrón respecto a su velocidad original es pequeña², $|v_y| \ll |v_z| < c$. Vemos de la forma que tiene v_z que está en fase con el campo magnético, por lo que la componente de la fuerza F_x no promedia a cero en un ciclo completo en el tiempo, ya que v_z y B_y cambian de signo al mismo tiempo (debido a su dependencia del $\sin \omega t$), lo cual permite pensar en el movimiento transversal del electrón a partir de un potencial *promedio* en el tiempo

$$\langle F_x \rangle = \left\langle \frac{q^2 E_0^2 k}{m\omega^2} \sin kx \cos kx \sin^2 \omega t \right\rangle = \frac{q^2 E_0^2 k}{2m\omega^2} \sin kx \cos kx = -\frac{dV_p}{dx}, \quad (2.27)$$

donde a V_p se le conoce como *potencial ponderomotriz* [1], el cual es el causante de la desviación de las partículas al entrar a la zona del láser, y cuya expresión es

$$V_p = \frac{q^2 E_0^2}{4m\omega^2} \cos^2 kx = \frac{q^2 I}{2m\epsilon_0 c \omega^2} \cos^2 kx = V_0 \cos^2 kx, \quad (2.28)$$

donde $I = \epsilon_0 c E_0^2 / 2$ es la intensidad del láser.

La distribución de las partículas a una distancia z_{sc} *después* de la interacción entre el haz y el láser (ver figura 2.1) se puede entender a partir de la conservación de probabilidad

$$n(x)dx = n(x')dx', \quad (2.29)$$

donde $n(x)$ y $n(x')$ son las densidades de probabilidad de las distribuciones antes y después de la zona del láser, respectivamente. Dicho de otro modo, el número de partículas $n(x)dx$ antes de entrar a la zona del láser debe ser el mismo que el número de partículas $n(x')dx'$ que impactan la pantalla.

La fuerza que siente cada partícula en la zona del láser es

$$F = -\frac{dV_p}{dx} = -V_0 \frac{d}{dx} (\cos^2 kx) \\ \implies F = 2V_0 k \cos kx \sin kx = V_0 k \sin 2kx. \quad (2.30)$$

Si se define el ángulo de desviación θ de cada partícula respecto a su trayectoria original (usando la aproximación paraxial)

$$\theta = \frac{\Delta v}{v} \simeq \frac{F \Delta t}{mv} = \frac{\Delta t}{mv} V_0 k \sin 2kx$$

²Es decir, una aproximación *paraxial*.

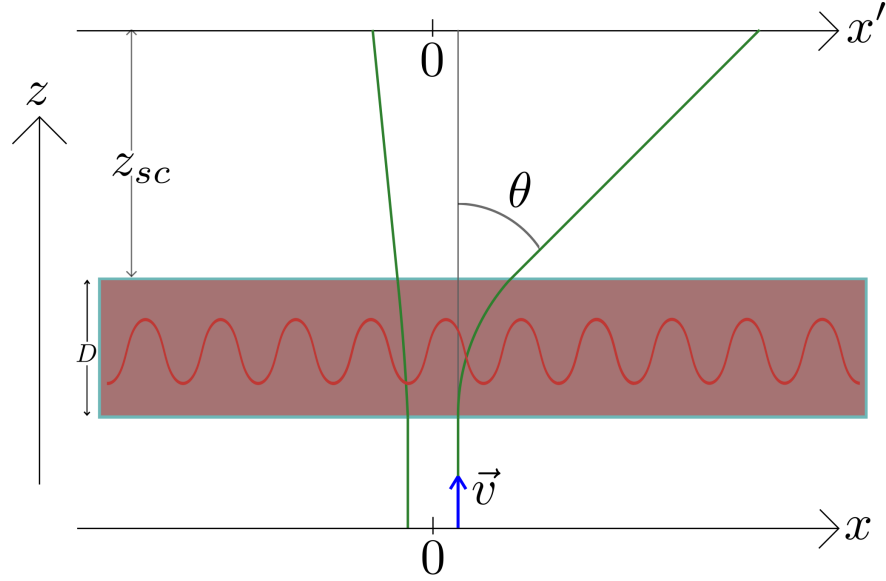


Figura 2.1: Diagrama donde se muestran las variables para el cálculo del patrón clásico. La zona roja es la zona del láser, el cual está a una distancia z_{sc} de la pantalla y tiene un ancho D . Nótese cómo el electrón cuya trayectoria original coincide con un máximo del potencial (cercano a un punto con gradiente nulo) casi no se desvía, mientras que otro que incide en una zona cercana al punto de máximo gradiente es desviado mucho más, respecto a la dirección original.

$$\implies x(\theta) = \frac{1}{2k} \arcsin\left(\frac{\theta}{\theta_{max}}\right), \quad (2.31)$$

donde Δt es el tiempo en el que el electrón pasa en la zona del láser, $\theta_{max} = \frac{V_0 \Delta t k}{mv}$ es el ángulo de desviación máximo, el cual ocurre en el punto de máxima derivada del potencial ponderomotriz (ecuación (2.28)), es decir en los puntos de inflexión de la función $\cos^2 kx$. Así, se calcula la nueva distribución haciendo un cambio de variable aleatoria [26]

$$n(\theta) = n(x) \left| \frac{dx}{d\theta} \right|. \quad (2.32)$$

Para $n(x) = 1$ (es decir, una distribución incidente uniforme), se tiene que la nueva distribución de probabilidad en términos del ángulo de desviación θ es

$$n(\theta) = \frac{1}{2k\theta_{max}} \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{\theta}{\theta_{max}}\right)^2}}. \quad (2.33)$$

Finalmente, utilizando el cambio de variable $x' = z_{sc} \tan \theta$, donde z_{sc} es la distancia entre la zona del láser y la pantalla, se obtiene la distribución como función de la posición de la pantalla (ver

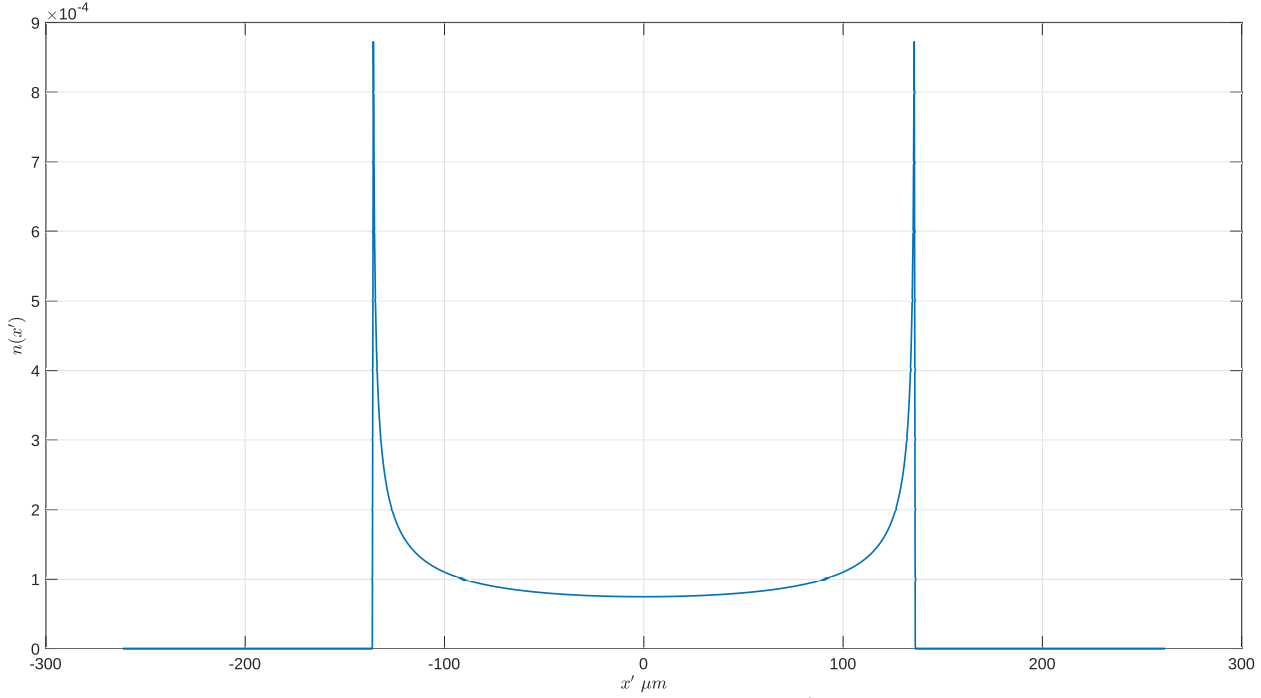


Figura 2.2: Gráfica de la nueva distribución de partículas $n(x')$ para un haz incidente $n(x) = 1$ utilizando los parámetros experimentales reportados en la ref. [1]. La intensidad del láser es $I = 1 \times 10^{14} \frac{W}{m^2}$, a una frecuencia $\omega = 3.54 \times 10^{15} \frac{rad}{s}$ y ancho del láser $D = 125 \mu m$. La velocidad de los electrones fue de $v_0 = 1.1 \times 10^7 \frac{m}{s}$, con lo que $\Delta t \simeq D/v = 1.13 \times 10^{-11} s$.

figura 2.2)

$$\Rightarrow n(x') = \frac{mv}{2k^2V_0\Delta t} \frac{1}{\sqrt{1 - \left[\frac{mv}{kV_0\Delta t} \arctan\left(\frac{x'}{z_{sc}}\right) \right]^2}}. \quad (2.34)$$

Nótese cómo la distribución tiene dos picos alrededor de $x' = 120 \mu m$, pues en estos puntos la ecuación (2.34) se indetermina. Es de ahí que al graficar la computadora traza líneas verticales que conectan la altura máxima de cada pico con el valor de $n(x') = 0$ a la izquierda y a la derecha.

Ahora, si utilizamos una distribución incidente más realista como la utilizada en la ref. [1] en donde el perfil del haz de electrones es gaussiano, calculamos la convolución entre dicho perfil y la ecuación (2.34). Los resultados se muestran en la figura 2.3, en donde la línea punteada representa el perfil incidente, y la línea sólida el patrón de dispersión del efecto Kapitza-Dirac clásico, conocido en la literatura como *patrón arcoíris*, siguiendo los datos experimentales reportados por Batelaan [1]. Nótese que en el patrón de dispersión resultante hay dos picos, los cuales indican que es más probable que partículas del haz de electrones entren a una zona del potencial ponderomotriz con derivada diferente de cero (lo que genera una fuerza transversal diferente de cero), a que atraviesen la región del láser por una zona donde la derivada sea cero.

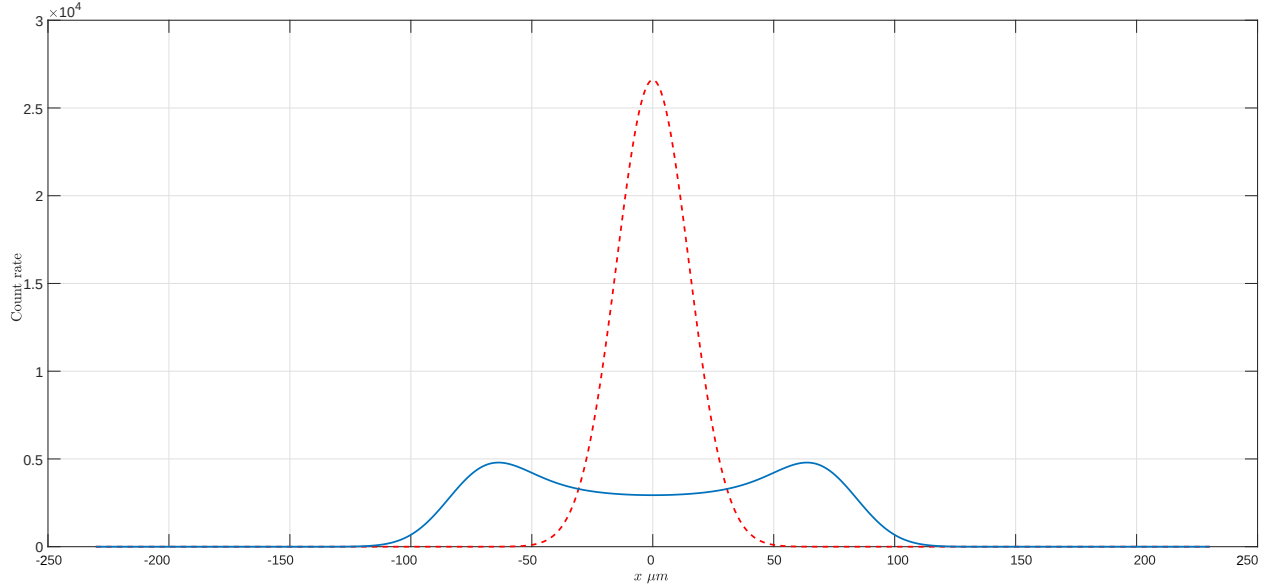


Figura 2.3: Patrones **incidente** y **resultante** obtenidos a través del método de convolución del haz en interacción con el láser utilizando los parámetros experimentales reportados en la ref. [1]. La pantalla se colocó a una distancia $z_{sc} = 24 \text{ cm}$, con una intensidad del láser $I = 1 \times 10^{14} \frac{\text{W}}{\text{m}^2}$, a una frecuencia $\omega = 3.54 \times 10^{15} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$ y ancho del láser $D = 125 \mu\text{m}$. La velocidad de los electrones fue de $v_0 = 1.1 \times 10^7 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, y el FWHM (*Full Width at Half Maximum* por sus siglas en inglés) del haz de partículas $B_w = 25 \mu\text{m}$.

2.2.2. Versión cuántica

En la versión cuántica del efecto, si se considera que el movimiento importante (desde el punto de vista de la mecánica cuántica) es a lo largo de la dirección de propagación del láser, la longitud de onda de de Broglie asociada a la velocidad transversal del haz de electrones $\lambda_d B = h/p$ es del orden de la longitud de onda del láser, lo que da lugar a un cambio radical en el patrón [27]. Para obtener dicho patrón, se considerará nuevamente la interacción entre el haz y la onda estacionaria a través del *potencial ponderomotriz* (ecuación (2.28))

$$V_p = \frac{e^2 I}{2m\epsilon_0 c \omega^2} \cos^2 kx = V_0 \cos^2 kx,$$

donde el cambio de velocidad transversal se debe a la transferencia de momento (en múltiplos de $\hbar k$) entre el láser y el haz de electrones³. Así, utilizando este potencial en la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, t) + V_0 \cos^2 kx \psi(x, t), \quad (2.35)$$

³En la ref. [1] se discute lo que el autor llama “las imágenes de onda y de partícula”, en donde muestra cómo de ambas lecturas del fenómeno, ya sea considerando el láser como una onda o partículas (fotones) se obtiene la misma solución.

se propone la solución

$$\psi(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n(t) e^{inkx}, \quad (2.36)$$

la cual describe al electrón en términos de ondas planas separadas por una sola transferencia de momento transversal $\hbar k$ cada una, donde $|c_n(t)|^2$ es la probabilidad de realizar una medición y encontrar al electrón con momento $n\hbar k$. Usando el hecho de que

$$\cos kx = \frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2} \implies \cos^2 kx = \frac{e^{i2kx} + e^{-i2kx} + 2}{4}, \quad (2.37)$$

se tiene que

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} i \frac{dc_n(t)}{dt} e^{inkx} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{\hbar n^2 k^2}{2m} + \frac{V_0}{2\hbar} \right) c_n(t) e^{inkx} \quad (2.38)$$

$$+ \frac{V_0}{4\hbar} \left(\underbrace{\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n(t) e^{i(n+2)kx}}_{n+2 \rightarrow n} + \underbrace{\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n(t) e^{i(n-2)kx}}_{n-2 \rightarrow n} \right). \quad (2.39)$$

Nótese cómo en los términos subrayados en rojo, se hizo un cambio de índices en ambas sumas debido a las exponenciales en la ecuación (2.37), para que todas las sumas estén acomodadas en términos de $\exp(inkx)$. Luego, definiendo $\varepsilon = \frac{\hbar k^2}{2m}$, se obtiene la ecuación para los coeficientes

$$i \frac{dc_n}{dt} = \left(\varepsilon n^2 + \frac{V_0}{2\hbar} \right) c_n + \frac{V_0}{4\hbar} (c_{n+2} + c_{n-2}), \quad (2.40)$$

donde εn^2 representa la energía cinética (en unidades de \hbar) de cada onda plana con momento $n\hbar k$, y el segundo término (con los coeficientes c_{n+2} y c_{n-2}) muestra cómo los intercambios de momento entre los fotones y el electrón son en pares de una sola transferencia de momento $\hbar k$, como se había anticipado. Así, en el régimen difractivo [1], si se supone que $\varepsilon \ll \frac{V_0}{\hbar}$, el término de la energía cinética se desprecia⁴. Por tanto, escribiendo $\xi_\nu = c_{n/2}$ (es decir sólo para los términos de índice par), se obtiene la ecuación para los coeficientes

$$i \frac{d\xi_\nu}{dt} = \frac{V_0}{2\hbar} \xi_\nu + \frac{V_0}{4\hbar} (\xi_{\nu+1} + \xi_{\nu-1}). \quad (2.41)$$

Entonces, proponiendo la solución

$$\xi_\nu(t) = i^{-\nu} e^{-i \frac{V_0}{2\hbar} t} f_\nu \left(\frac{V_0}{2\hbar} t \right), \quad (2.42)$$

⁴Esta aproximación representa la situación en que los electrones no tienen la suficiente energía cinética como para superar las crestas del potencial ponderomotriz.

se observa que

$$\frac{d\xi_\nu}{dt} = i^{-\nu} e^{-i\frac{V_0}{2\hbar}t} \left(-i\frac{V_0}{2\hbar} f_\nu + \frac{df_\nu}{dt} \right) \quad (2.43)$$

$$\implies \xi_{\nu+1} + \xi_{\nu-1} = i^{-(\nu+1)} e^{-i\frac{V_0}{2\hbar}t} f_{\nu+1} + i^{-(\nu-1)} e^{-i\frac{V_0}{2\hbar}t} f_{\nu-1}. \quad (2.44)$$

Substituyendo y eliminando términos comunes

$$\frac{df_\nu}{dt} = \frac{V_0}{4\hbar} (f_{\nu-1} - f_{\nu+1}), \quad (2.45)$$

pero como el argumento de f_ν es $V_0/2\hbar$, si se define $\tau = \frac{V_0}{2\hbar}t$, se cumple la identidad

$$2f'_\nu(\tau) = f_{\nu-1}(\tau) - f_{\nu+1}(\tau), \quad (2.46)$$

la cual es una relación conocida de las funciones de Bessel de primer género [28], por lo que

$$\xi_\nu(t) = i^{-\nu} e^{-i\frac{V_0}{2\hbar}t} J_\nu \left(\frac{V_0}{2\hbar}t \right), \quad (2.47)$$

donde $|\xi_\nu(t)|^2$ representa la probabilidad de que el electrón, después de interactuar con el láser, impacte en la pantalla en el ν -ésimo orden de difracción después de una interacción con el láser en un tiempo total t . El tiempo de interacción en este caso es aproximadamente $t_{int} = D/v_0$, donde D es el ancho de la zona del láser y v_0 es la velocidad del electrón antes de entrar a la zona del láser. De acuerdo a la ref. [1], experimentalmente se fijó dicho tiempo t_{int} de tal manera que el orden del argumento de las funciones de Bessel en los coeficientes ξ_ν resultara cercano a la unidad, es decir

$$\frac{V_0}{2\hbar} t_{int} \simeq 1, \quad (2.48)$$

lo que implica que la razón entre la probabilidad de que el electrón se encuentre en el orden cero de difracción y el primer orden sea también cercano a la unidad

$$\left| \frac{\xi_0}{\xi_1} \right|^2 \sim 1, \quad (2.49)$$

lo cual se muestra gráficamente en la fig. 2.4.

Así, podemos imaginar el proceso del haz de electrones (cuya función de distribución de probabilidad es una función gaussiana) que atraviesa la región del láser (ver fig. 2.5) mientras es golpeado repetidamente por fotones, los cuales le transfieren un momento transversal en múltiplos pares de $\hbar k$. Cuando un electrón sale de la zona del láser, puede haber salido con una transferencia de momento transversal neta igual a 0, con probabilidad $|\xi_0|^2$ para el primer orden de difracción, o con una transferencia de momento neta igual a $\pm 2\hbar k$ con una probabilidad $|\xi_{\pm 1}|^2$ para el segundo, y así sucesivamente, haciendo un ángulo respecto a la dirección original igual al cociente entre la transferencia neta transversal de momento y el momento original ($2\nu\hbar k/mv_0$, donde m es la masa del electrón, v_0 la velocidad con la que viajaba antes de entrar a la zona del láser, y ν es el orden de

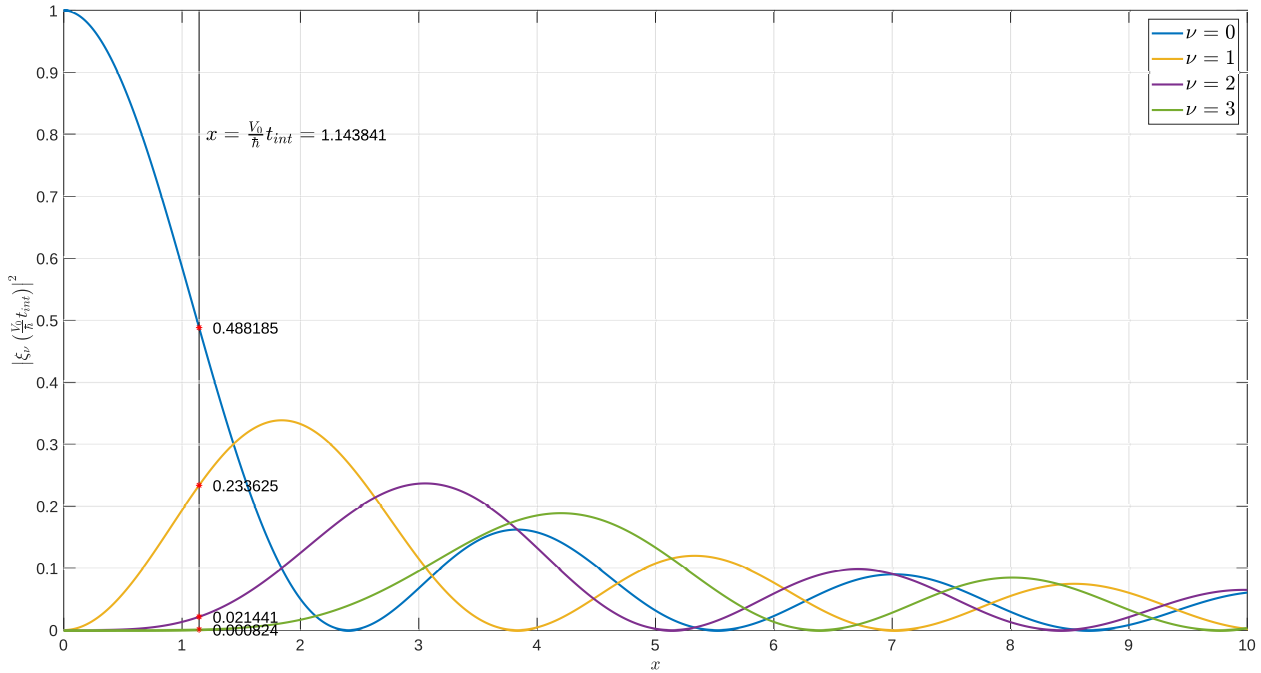


Figura 2.4: Coeficientes $|\xi_\nu|^2$ para la difracción en el efecto Kapitza-Dirac cuántico para una intensidad de láser $I = 0.25 \times 10^{14} \text{ W/m}^2$. Nótese que para $x = \frac{V_0}{\hbar} t_{int} \simeq 1.14$ la probabilidad de que el electrón sea difractado al primer orden es de aproximadamente 0.49, al segundo orden aproximadamente 0.23, al tercer orden aproximadamente 0.02 y al cuarto orden aproximadamente 0.0008.

difracción). Por tanto, si se multiplica la función de distribución original del haz de electrones por la probabilidad asociada a cada orden de difracción (dada por la ecuación (2.47)) como se muestra en la fig. 2.5, se puede construir el patrón de difracción⁵ del efecto Kapitza Dirac en su versión cuántica (ver fig. 2.6).

2.3. Mecánica cuántica estocástica

En esta sección se detalla una teoría ajena a la EDE, con el propósito de explorar condiciones externas a ella pero necesarias para reproducir la mecánica cuántica. Siguiendo el segundo capítulo de la ref. [9], debido a que la mecánica cuántica no es formalmente una teoría estadística, cualquier propuesta de una descripción estocástica que reproduzca el comportamiento cuántico de manera detallada sufrirá tácitamente de propiedades extrañas. Pese a que la mayoría de los esfuerzos en este sentido se han enfocado en tratar de obtener dicha descripción como una teoría clásica de movimiento browniano, como se muestra en lo que sigue y siguiendo la referencia previamente citada, ésto no es así. Una descripción estocástica que reproduzca la mecánica cuántica no es una descripción clásica, pues la fuente que introduce la estocasticidad a la dinámica (como se discutió en la sección 2.1) no representa un ruido blanco, sino un campo con correlaciones [9, 29].

⁵Vale la pena justificar la aproximación que se hizo en el régimen difractivo $\varepsilon \ll V_0/\hbar$ y cómo el término $\varepsilon\nu^2$ no afecta el resultado dado por la ecuación (2.36), aún para ν grande. Si $\nu \rightarrow \infty$ los coeficientes $|\xi_\nu|^2 \rightarrow 0$ más rápido de lo que $\nu^2 \rightarrow \infty$ por la dependencia de $\xi_\nu \sim 1/\Gamma(\nu)$ de la definición de las funciones de Bessel [28].

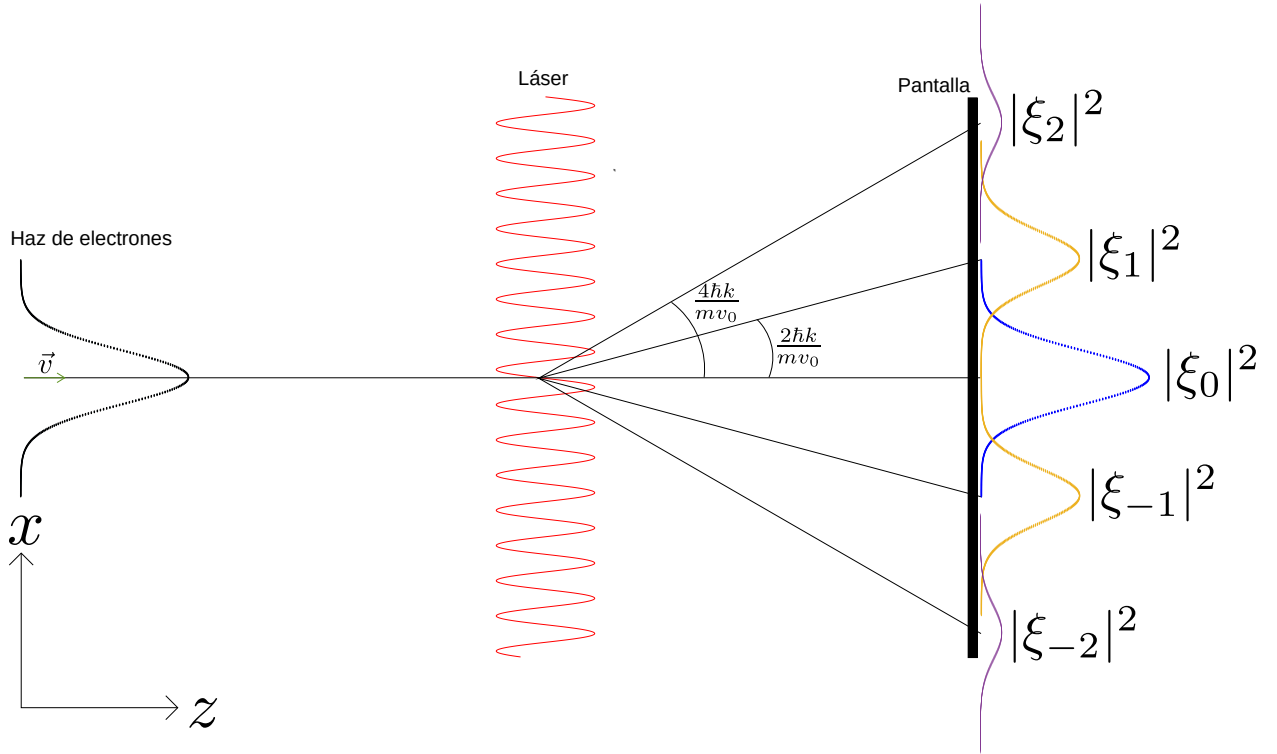


Figura 2.5: Si la transferencia neta de momento del láser a un electrón es $2\nu\hbar k$, este será desviado (con una probabilidad $|\xi_\nu|^2$) con un ángulo $2\nu\hbar k/mv_0$ hacia el ν -ésimo orden de difracción, con lo que el patrón final en la pantalla se puede obtener multiplicando la distribución del haz de electrones antes de la zona del láser y la probabilidad de cada orden de difracción.

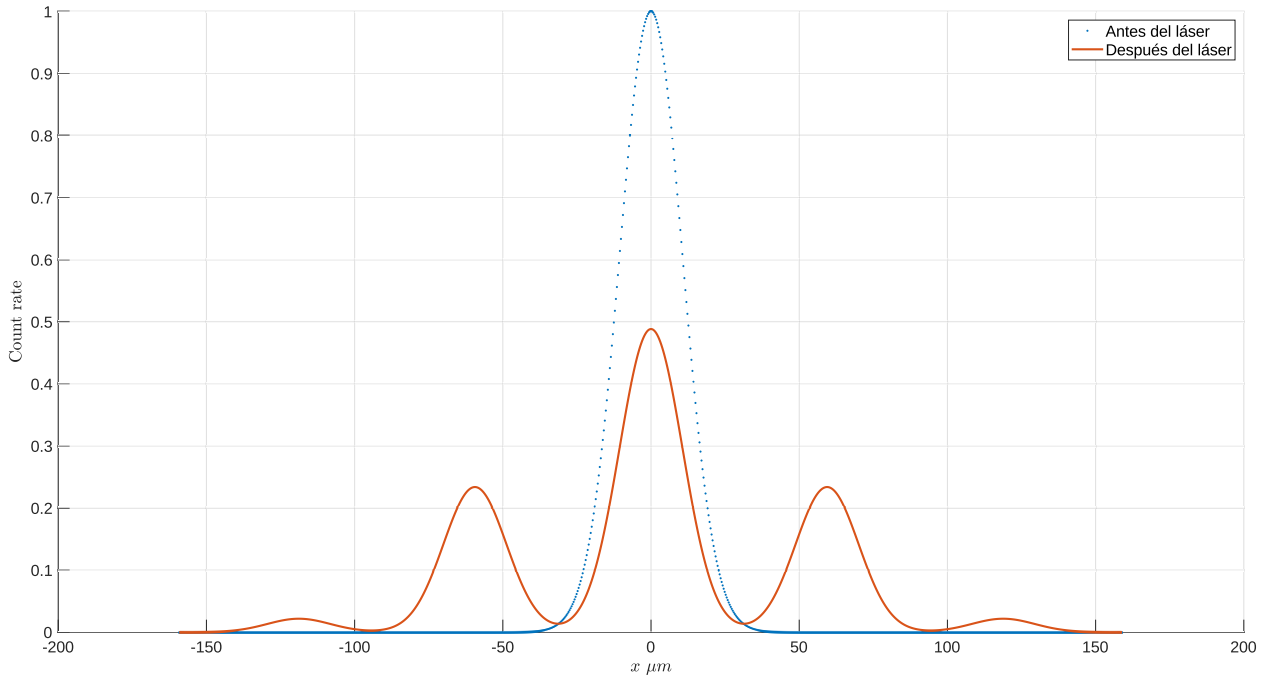


Figura 2.6: Patrón de difracción para la versión cuántica del efecto Kapitza-Dirac para una intensidad de láser $I = 0.25 \times 10^{14} \text{ W/m}^2$.

2.3.1. Cinemática

Sea una partícula sujeta a un movimiento estocástico, de tal manera que su posición $\vec{x}(t)$ representa una variable aleatoria, la cual describe la trayectoria que sigue la partícula en una realización de la fuente de la estocasticidad. Supóngase que la partícula se encuentra al tiempo t en el punto \vec{x} . Igualmente, supóngase que un tiempo posterior $t'' = t + \Delta t$ (con Δt suficientemente pequeño) la partícula se encontrará en una posición $\vec{x}'' = \vec{x}(t + \Delta t)$ tal que

$$\Delta_+ \vec{x} = \vec{x}'' - \vec{x}, \quad (2.50)$$

y que en un tiempo anterior $t' = t - \Delta t$ se encontraba en una posición $\vec{x}' = \vec{x}(t - \Delta t)$ tal que

$$\Delta_- \vec{x} = \vec{x} - \vec{x}'. \quad (2.51)$$

Ahora, si se calculan las series de Taylor para las funciones $\Delta_+ \vec{x}$ y $\Delta_- \vec{x}$ en términos de Δt alrededor del tiempo t se obtiene, respectivamente

$$\begin{aligned} \Delta_+ \vec{x} &= \vec{x}(t + \Delta t) - \vec{x}(t) = \vec{x}(t) + \frac{1}{1!} \frac{d\vec{x}}{dt} \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} (\Delta t)^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3 \vec{x}}{dt^3} (\Delta t)^3 + \dots - \vec{x}(t) \\ &\implies \Delta_+ \vec{x} = \frac{d\vec{x}}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} (\Delta t)^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3 \vec{x}}{dt^3} (\Delta t)^3 + \dots, \end{aligned} \quad (2.52)$$

y

$$\begin{aligned} \Delta_- \vec{x} &= \vec{x}(t) - \vec{x}(t - \Delta t) = \vec{x}(t) - \vec{x}(t) - \frac{1}{1!} \frac{d\vec{x}}{dt} (-\Delta t) - \frac{1}{2!} \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} (-\Delta t)^2 - \frac{1}{3!} \frac{d^3 \vec{x}}{dt^3} (-\Delta t)^3 + \dots \\ &\implies \Delta_- \vec{x} = \frac{d\vec{x}}{dt} \Delta t - \frac{1}{2} \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} (\Delta t)^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3 \vec{x}}{dt^3} (\Delta t)^3 + \dots \end{aligned} \quad (2.53)$$

Debido a la generalidad del sistema, no se conoce ninguna de las características estadísticas del mismo a priori. Sin embargo, se pueden hacer algunas suposiciones razonables que simplifican la descripción. Si la fuente de la estocasticidad es estacionaria (distribuciones independientes del tiempo), isotrópica (distribuciones idénticas en cualquier dirección) y homogénea (distribuciones idénticas en cualquier posición), esto implica matemáticamente que los segundos momentos de $\Delta_{\pm} \vec{x}$ son independientes del signo (para signos iguales) $\langle \Delta_+ x_i \Delta_+ x_j \rangle = \langle \Delta_- x_i \Delta_- x_j \rangle$ a primer orden en Δt

$$\begin{aligned} \langle \Delta_{\pm} x_i \Delta_{\pm} x_j \rangle &= \left\langle \sum_i \sum_j \frac{dx_i}{dt} \frac{dx_j}{dt} (\Delta t)^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3) \right\rangle = 2D_{ij}(\vec{x}, t) \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ \text{i.e. } D_{ij}(\vec{x}, t) &= \frac{\langle \Delta_{\pm} x_i \Delta_{\pm} x_j \rangle}{2\Delta t}, \end{aligned} \quad (2.54)$$

donde nuevamente $\langle \cdot \rangle$ representa promediar en el tiempo. Luego, para una función arbitraria $g(\vec{x}) \in C^\infty$, podemos desarrollar de la misma manera $g(\vec{x}'')$ y $g(\vec{x}')$ alrededor de \vec{x} como función

(respectivamente) de $\Delta_+\vec{x}$ y $\Delta_-\vec{x}$

$$\begin{aligned} \frac{g(\vec{x}'') - g(\vec{x}')}{2\Delta t} &= \frac{1}{2\Delta t} \left(g(\vec{x}) + \frac{1}{1!} \sum_i \frac{\partial g}{\partial x_i} \Delta_+ x_i + \frac{1}{2!} \sum_i \sum_j \frac{\partial^2 g}{\partial x_i \partial x_j} \Delta_+ x_i \Delta_+ x_j + \dots \right) \\ &\quad - \frac{1}{2\Delta t} \left(g(\vec{x}) - \frac{1}{1!} \sum_i \frac{\partial g}{\partial x_i} \Delta_- x_i + \frac{1}{2!} \sum_i \sum_j \frac{\partial^2 g}{\partial x_i \partial x_j} \Delta_- x_i \Delta_- x_j - \dots \right) \\ \Rightarrow \frac{g(\vec{x}'') - g(\vec{x}')}{2\Delta t} &= \sum_i \frac{\partial g}{\partial x_i} \frac{\Delta_+ x_i + \Delta_- x_i}{2\Delta t} + \sum_i \sum_j \frac{\partial^2 g}{\partial x_i \partial x_j} \frac{\Delta_+ x_i \Delta_+ x_j - \Delta_- x_i \Delta_- x_j}{4\Delta t} + \dots \end{aligned} \quad (2.55)$$

De esta última ecuación se define, a primer orden en Δt , la derivada⁶ *sistemática*

$$\hat{D}_c g(\vec{x}) := \frac{\langle g(\vec{x}'') - g(\vec{x}') \rangle}{2\Delta t} = \sum_i \frac{\partial g}{\partial x_i} \frac{\langle \Delta_+ x_i + \Delta_- x_i \rangle}{2\Delta t}. \quad (2.56)$$

Nótese que, si se define a la **velocidad de flujo** (o sistemática) \vec{v} como

$$\vec{v}(\vec{x}, t) := \frac{\langle \Delta_+ \vec{x} + \Delta_- \vec{x} \rangle}{2\Delta t} = \frac{\langle \vec{x}'' - \vec{x}' \rangle}{2\Delta t}, \quad (2.57)$$

la expresión (2.56) (agregando una posible dependencia explícita de g) es equivalente a la derivada convectiva de mecánica de fluidos

$$\hat{D}_c g(\vec{x}) = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \right) g(\vec{x}, t), \quad (2.58)$$

por lo que al aplicar esta derivada a la posición se obtiene la velocidad sistemática

$$\vec{v}(\vec{x}, t) = \hat{D}_c \vec{x}. \quad (2.59)$$

Del mismo modo, a partir de la ecuación (2.55), se puede construir otra derivada

$$\begin{aligned} \frac{g(\vec{x}'') + g(\vec{x}')}{2\Delta t} &= \frac{1}{2\Delta t} \left(g(\vec{x}) + \frac{1}{1!} \sum_i \frac{\partial g}{\partial x_i} \Delta_+ x_i + \frac{1}{2!} \sum_i \sum_j \frac{\partial^2 g}{\partial x_i \partial x_j} \Delta_+ x_i \Delta_+ x_j + \dots \right) \\ &\quad + \frac{1}{2\Delta t} \left(g(\vec{x}) - \frac{1}{1!} \sum_i \frac{\partial g}{\partial x_i} \Delta_- x_i + \frac{1}{2!} \sum_i \sum_j \frac{\partial^2 g}{\partial x_i \partial x_j} \Delta_- x_i \Delta_- x_j - \dots \right) \end{aligned}$$

⁶En este caso no es posible definir una derivada en el sentido usual, pues el movimiento estocástico no permite que se tome $\Delta t \rightarrow 0$. Es por ello que se toma Δt suficientemente pequeña (comparada con el tiempo característico T_0 del sistema) y se promedia en todas las posibles realizaciones de la fuente de la estocasticidad $\langle x \rangle \equiv (1/\Delta t) \int_t^{t+\Delta t} x(\tau) d\tau$.

$$\implies \frac{g(\vec{x}'') + g(\vec{x}')}{2\Delta t} = \frac{2g(\vec{x})}{2\Delta t} + \sum_i \frac{\partial g}{\partial x_i} \frac{\Delta_+ x_i - \Delta_- x_i}{2\Delta t} + \sum_i \sum_j \frac{\partial^2 g}{\partial x_i \partial x_j} \frac{\Delta_+ x_i \Delta_+ x_j + \Delta_- x_i \Delta_- x_j}{4\Delta t} + \dots \quad (2.60)$$

por lo tanto, si se obtiene el promedio como se hizo arriba se define, a primer orden en Δt , la derivada *estocástica*

$$\hat{D}_s g(\vec{x}) := \frac{\langle g(\vec{x}'') + g(\vec{x}') - 2g(\vec{x}) \rangle}{2\Delta t} \quad (2.61)$$

$$\text{i.e. } \hat{D}_s g(\vec{x}) = \sum_i \frac{\partial g}{\partial x_i} \frac{\langle \Delta_+ x_i - \Delta_- x_i \rangle}{2\Delta t} + \sum_i \sum_j \frac{\partial^2 g}{\partial x_i \partial x_j} \frac{\langle \Delta_+ x_i \Delta_+ x_j + \Delta_- x_i \Delta_- x_j \rangle}{4\Delta t}, \quad (2.62)$$

con lo que también podemos definir la **velocidad de difusión** (o estocástica)

$$\vec{u}(\vec{x}, t) := \frac{\langle \Delta_+ \vec{x} - \Delta_- \vec{x} \rangle}{2\Delta t} = \frac{\langle \vec{x}'' + \vec{x}' - 2\vec{x} \rangle}{2\Delta t}, \quad (2.63)$$

de tal modo que

$$\hat{D}_s g(\vec{x}, t) = \sum_i u_i \frac{\partial g}{\partial x_i} + \sum_i \sum_j D_{ij} \frac{\partial^2 g}{\partial x_i \partial x_j} = (\vec{u} \cdot \nabla + D \nabla^2) g(\vec{x}, t) \quad (2.64)$$

en donde se supuso que $D_{ij} = D\delta_{ij}$ con D constante, lo que es equivalente físicamente a suponer que la difusión se da de manera isotrópica y uniforme. De esta última ecuación, al aplicar este operador a la posición, se obtiene la velocidad estocástica

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \hat{D}_s \vec{x}. \quad (2.65)$$

A la aproximación que se hizo de tomar sólo términos máximo a primer orden en Δt (que resulta en máximo conservar los segundos momentos) se le conoce como *aproximación Markoviana*.

En el límite Newtoniano (en ausencia de estocasticidad) no hay difusión, es decir

$$\boxed{\text{Límite Newtoniano: } D = 0, \vec{u} = \vec{0} \implies \hat{D}_s = 0, \hat{D}_c = \frac{d}{dt}.} \quad (2.66)$$

En la referencia [9] se muestra cómo, si se introduce la densidad de probabilidad para las partículas $\rho(\vec{x}, t)$ en el espacio de configuración, se obtienen las ecuaciones

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.67a)$$

$$D \nabla^2 \rho - \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (2.67b)$$

la primera siendo la ecuación de continuidad que representa la conservación de las partículas, mientras que la segunda tiene como solución

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = D \frac{\nabla \rho}{\rho} = D \nabla \ln \rho. \quad (2.68)$$

Ahora, si se define el operador de inversión temporal \hat{T} que intercambia t'' con t'

$$\hat{T} \vec{x}'' = \vec{x}', \quad \hat{T} \vec{x}' = \vec{x}'' \quad (2.69a)$$

$$\implies \hat{T} \vec{v} = -\vec{v}, \quad \hat{T} \vec{u} = \vec{u}, \quad (2.69b)$$

se pueden construir cuatro aceleraciones con las derivadas obtenidas en las ecuaciones (2.56) y (2.61), de las cuales dos son invariantes bajo el operador \hat{T} y dos no lo son

$$\vec{a}_{cc} = \hat{D}_c \hat{D}_c \vec{x} \implies \hat{T} \vec{a}_{cc} = \vec{a}_{cc}, \quad (2.70a)$$

$$\vec{a}_{ss} = \hat{D}_s \hat{D}_s \vec{x} \implies \hat{T} \vec{a}_{ss} = \vec{a}_{ss}, \quad (2.70b)$$

$$\vec{a}_{cs} = \hat{D}_c \hat{D}_s \vec{x} \implies \hat{T} \vec{a}_{cs} = -\vec{a}_{cs}, \quad (2.70c)$$

$$\vec{a}_{sc} = \hat{D}_s \hat{D}_c \vec{x} \implies \hat{T} \vec{a}_{sc} = -\vec{a}_{sc}. \quad (2.70d)$$

2.3.2. Dinámica

Es natural asumir que la aceleración del sistema es una combinación lineal de las aceleraciones obtenidas en las ecuaciones (2.70),

$$\vec{a} = \lambda_1 \vec{a}_{cc} + \lambda_2 \vec{a}_{ss} + \lambda_3 \vec{a}_{cs} + \lambda_4 \vec{a}_{sc}, \quad (2.71)$$

de tal manera que, al separar la fuerza $\vec{f} = \vec{f}_+ + \vec{f}_-$ a la que se someten las partículas en la parte que es invariante al operador de inversión temporal y la que no lo es $\hat{T} \vec{f}_{\pm} = \pm \vec{f}_{\pm}$, se obtienen las ecuaciones

$$m(\lambda_1 \vec{a}_{cc} + \lambda_2 \vec{a}_{ss}) = \vec{f}_+, \quad (2.72a)$$

$$m(\lambda_3 \vec{a}_{cs} + \lambda_4 \vec{a}_{sc}) = \vec{f}_-. \quad (2.72b)$$

En ambos casos se puede factorizar λ_1 y λ_3 , respectivamente, para definir $\lambda = -\lambda_2/\lambda_1$ y $\gamma = \lambda_4/\lambda_3$ y entonces intentar encontrar λ_1 , λ_3 , λ y γ . Debido a que la fuerza \vec{f}_+ es invariante bajo inversiones temporales y \vec{f}_- no lo es, la primera debe representar la parte de la fuerza que sólo depende de la posición, mientras que la segunda contiene la parte de la fuerza que depende de la velocidad \vec{v} . Así, para encontrar los valores de las constantes desconocidas, primero analizamos el problema conservativo, para el cual $\vec{f} = -\nabla V(\vec{x})$, por lo que $\vec{f}_- = \vec{0}$, por lo que la ecuación (2.72b) es equivalente a

$$\hat{D}_c \vec{u} + \gamma \hat{D}_s \vec{v} = \vec{0}. \quad (2.73)$$

Al mismo tiempo, si se multiplica la ecuación (2.67a) (escrita desarrollando la divergencia) por D/ρ y se calcula el gradiente

$$\frac{D}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \vec{v} \right) = 0 \implies \nabla \left(\frac{D}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) + \nabla(\vec{v} \cdot \vec{u}) + D \nabla(\nabla \cdot \vec{v}) = \vec{0}, \quad (2.74)$$

en donde se usó la expresión (2.63) al substituir el gradiente de ρ . De esa misma ecuación

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (D \nabla \ln \rho) = \nabla \left(D \frac{\partial}{\partial t} \ln \rho \right) = \nabla \left(\frac{D}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} \right). \quad (2.75)$$

Luego, debido a que se estudia el caso conservativo⁷, es razonable suponer que $\nabla \times \vec{v} = \vec{0}$, lo que implica que $\nabla(\nabla \cdot \vec{v}) = \nabla^2 \vec{v}$, por lo que la ecuación (2.74) resulta

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \nabla(\vec{v} \cdot \vec{u}) + D \nabla^2 \vec{v} = \vec{0} \\ \implies & \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{v} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{u} + D \nabla^2 \vec{v} = \vec{0}, \end{aligned} \quad (2.76)$$

el último paso se debe a que también $\nabla \times \vec{u} = \vec{0}$ pues \vec{u} es un gradiente (ec. (2.63)). Usando las formas alternativas de los operadores \hat{D}_c y \hat{D}_s dadas por las ecuaciones (2.58) y (2.64), respectivamente

$$\hat{D}_c \vec{u} + \hat{D}_s \vec{v} = 0. \quad (2.77)$$

Comparando esta ecuación con la ec. (2.73), se obtiene el valor de $\gamma = 1$, lo que hace notar que la expresión (2.72b) en lugar de una relación dinámica, es una constricción del sistema. Por lo tanto, para recuperar el límite Newtoniano (ec. (2.66)) a partir de la ecuación (2.72a), vemos que necesariamente $\lambda_1 = 1$. Entonces, la ecuación (2.72a) puede escribirse de la forma

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{f}_+ + \vec{f}_{\text{diff}}. \quad (2.78)$$

Esta ecuación claramente muestra que la dinámica del ensemble difiere de la versión clásica, pues se agrega un término debido a una fuerza difusiva

$$\vec{f}_{\text{diff}} = m \lambda \vec{a}_{ss} = m \lambda \hat{D}_s \vec{u} = -\nabla V_{\text{diff}}. \quad (2.79)$$

Para obtener la expresión del potencial V_{diff} , utilizamos las identidades vectoriales

$$\frac{1}{2} \nabla |\vec{u}|^2 = (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} + \vec{u} \times (\nabla \times \vec{u}), \quad (2.80a)$$

$$\nabla^2 \vec{u} = \nabla(\nabla \cdot \vec{u}) - \nabla \times (\nabla \times \vec{u}), \quad (2.80b)$$

⁷El caso general no conservativo, donde $\vec{f}_- \neq 0$ se estudia en la siguiente sección, en donde se muestra que \vec{f}_- depende de $\nabla \times \vec{v}$.

recordando que $\nabla \times \vec{u} = \vec{0}$, podemos escribir (usando nuevamente la forma explícita del operador \hat{D}_s , ec. (2.64))

$$\begin{aligned} m\lambda \left(\frac{1}{2} \nabla |\vec{u}|^2 + D \nabla (\nabla \cdot \vec{u}) \right) &= -\nabla V_{\text{diff}} \\ \implies V_{\text{diff}} &= -\lambda \left(\frac{1}{2} m |\vec{u}|^2 + m D \nabla \cdot \vec{u} \right). \end{aligned} \quad (2.81)$$

Ahora, si se utiliza la forma de \vec{u} en términos de la densidad de partículas en el espacio de configuración ρ dada por la ec. (2.63), se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} |\vec{u}|^2 + D \nabla \cdot \vec{u} &= \frac{1}{2} \frac{|\nabla \rho|^2}{\rho^2} + D \nabla \cdot \left(D \frac{\nabla \rho}{\rho} \right) = \frac{1}{2} \frac{|\nabla \rho|^2}{\rho^2} + D^2 \left[\frac{\nabla^2 \rho}{\rho} + \nabla \rho \cdot \nabla \left(\frac{1}{\rho} \right) \right] \\ \implies \frac{1}{2} |\vec{u}|^2 + D \nabla \cdot \vec{u} &= \frac{1}{2} D^2 \frac{|\nabla \rho|^2}{\rho^2} + D^2 \left(\frac{\nabla^2 \rho}{\rho} - \frac{|\nabla \rho|^2}{\rho^2} \right) = D^2 \left(\frac{\nabla^2 \rho}{\rho} - \frac{1}{2} \frac{|\nabla \rho|^2}{\rho^2} \right), \end{aligned} \quad (2.82)$$

y, al mismo tiempo, si se calcula

$$\begin{aligned} \nabla^2 \sqrt{\rho} &= \nabla \cdot (\nabla \sqrt{\rho}) = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \rho}{2\sqrt{\rho}} \right) = \frac{1}{2} \left[\frac{\nabla^2 \rho}{\sqrt{\rho}} + \nabla \rho \cdot \nabla \left(\frac{1}{\sqrt{\rho}} \right) \right] \\ \implies \nabla^2 \sqrt{\rho} &= \frac{1}{2} \left[\frac{\nabla^2 \rho}{\sqrt{\rho}} + \nabla \rho \cdot \left(-\frac{1}{2} \frac{\nabla \rho}{\rho^{3/2}} \right) \right] \implies \frac{\nabla^2 \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\nabla^2 \rho}{\rho} - \frac{1}{2} \frac{|\nabla \rho|^2}{\rho^2} \right), \end{aligned} \quad (2.83)$$

vemos que las ecuaciones (2.82) y (2.83) contienen los mismos términos, por lo que se puede concluir finalmente que la expresión para el potencial V_{diff} se puede escribir como

$$V_{\text{diff}} = -2m\lambda D^2 \frac{\nabla^2 \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}, \quad (2.84)$$

en este punto el lector seguramente reconocerá la forma del potencial V_{diff} con el potencial cuántico [30], el cual se obtiene de la última ecuación eligiendo $\lambda = 1$ y $D = \frac{\hbar}{2m}$. Esta elección (hasta aquí en ninguna manera natural) está relacionada con la identificación de la fuente de estocasticidad. Al lector interesado en una discusión del por qué esta elección, se recomienda revisar el capítulo 4 de la ref. [9].

2.3.3. Integrando la ecuación de movimiento

Las ecuaciones (2.72) con los valores determinados en la sección anterior se escriben

$$m(\hat{D}_c \vec{v} - \lambda \hat{D}_s \vec{u}) = \vec{f}_+, \quad (2.85a)$$

$$m(\hat{D}_c \vec{u} + \hat{D}_s \vec{v}) = \vec{f}_-, \quad (2.85b)$$

donde λ_1 fue absorbida por \vec{f}_- y los operadores \hat{D}_c y \hat{D}_s están dados por

$$\hat{D}_c = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla, \quad (2.86a)$$

$$\hat{D}_s = D\nabla^2 + \vec{u} \cdot \nabla. \quad (2.86b)$$

Las ecuaciones (2.85) forman un sistema de ecuaciones diferenciales parciales acopladas no lineales de segundo orden para \vec{u} y \vec{v} . Sin embargo, es posible integrar (al menos una vez) estas ecuaciones como sigue. La fuerza \vec{f}_+ puede ser escrita en forma general como

$$\vec{f}_+ = -\nabla V + \vec{F}, \quad (2.87)$$

donde \vec{F} representa la parte no conservativa de la fuerza \vec{f}_+ . Usando las ecuaciones (2.86), la ecuación (2.85a) queda explícitamente como

$$m \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} - \lambda(\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} - \lambda D \nabla^2 \vec{u} \right] = -\nabla V + \vec{F}. \quad (2.88)$$

Ahora, si se supone que la velocidad de flujo tiene la forma general

$$\vec{v} = 2D\nabla S + \vec{b}, \quad (2.89)$$

donde $S(\vec{x}, t)$ es una función adimensional real y \vec{b} es un vector que contiene cualquier elemento rotacional del campo \vec{v} . Usando las identidades (2.80), se obtiene

$$\begin{aligned} m \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla |\vec{v}|^2 - \vec{v} \times (\nabla \times \vec{v}) - \frac{1}{2} \lambda \nabla |\vec{u}|^2 - \lambda D \nabla (\nabla \cdot \vec{u}) \right] &= -\nabla V + \vec{F} \\ \implies \nabla \left(2mD \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2} m |\vec{v}|^2 + V_{\text{diff}} + V \right) &= \vec{F} + \vec{v} \times (\nabla \times \vec{v}) - m \frac{\partial \vec{b}}{\partial t}. \end{aligned} \quad (2.90)$$

Luego, si se supone además que la fuerza externa es de naturaleza electromagnética causada por un potencial vectorial \vec{A} (en el sistema internacional),

$$\vec{F} = -q \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + q \vec{v} \times (\nabla \times \vec{A}), \quad (2.91)$$

donde q es la carga eléctrica de cada partícula. Para este tipo de fuerza, de acuerdo con el acoplamiento minimal [31, 32], la velocidad adquiere la forma

$$\vec{v} = 2D\nabla S - \frac{q}{m} \vec{A}, \quad (2.92)$$

lo que entonces permite fijar la contribución rotacional a la velocidad de flujo $\vec{b} = -\frac{q}{m} \vec{A}$. Haciendo esto, el lado derecho de la ecuación (2.90) se anula, con lo que se obtiene una ecuación fácilmente

integrable

$$\begin{aligned} \nabla \left(2mD \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2}m|\vec{v}|^2 + V_{\text{diff}} + V \right) &= \vec{0} \\ \implies 2mD \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2}m|\vec{v}|^2 - 2m\lambda D^2 \frac{\nabla^2 \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} + V &= 0, \end{aligned} \quad (2.93)$$

donde se substituyó la forma explícita del potencial V_{diff} en términos de la densidad de partículas dada por la ecuación (2.84). Esta última ecuación, junto con la ecuación de continuidad (ec. (2.67a))

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0, \quad (2.94)$$

forman un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas para S y ρ equivalente al de las ecuaciones (2.85).

Antes de mostrar la manera de desacoplarlas, revisaremos momentáneamente la ecuación (2.85b) correspondiente a \vec{f}_- para mostrar que esta ecuación (en el caso general no conservativo) representa una restricción al sistema. Partiendo de la identidad

$$\nabla(\vec{u} \cdot \vec{v}) = (\vec{u} \cdot \nabla)\vec{v} + (\vec{v} \cdot \nabla)\vec{u} + \vec{u} \times (\nabla \times \vec{v}) + \vec{v} \times (\nabla \times \vec{u}), \quad (2.95)$$

la ecuación (2.85b) se escribe explícitamente como

$$\begin{aligned} m \left[\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla)\vec{v} + (\vec{v} \cdot \nabla)\vec{u} + D\nabla^2 \vec{v} \right] &= \vec{f}_- \\ \implies m \left[\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \nabla(\vec{u} \cdot \vec{v}) - \vec{u} \times (\nabla \times \vec{v}) + D\nabla^2 \vec{v} \right] &= \vec{f}_- \\ \implies m \left[\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \nabla(\vec{u} \cdot \vec{v}) - \vec{u} \times (\nabla \times \vec{v}) + D\nabla(\nabla \cdot \vec{v}) \right] &= \vec{f}_- + mD\nabla \times (\nabla \times \vec{v}), \end{aligned} \quad (2.96)$$

en donde se usó la ecuación (2.75) para la derivada de la velocidad de difusión, así como la identidad (2.80b). Luego, notando que

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v}) = \rho \nabla \cdot \vec{v} + \vec{v} \cdot \nabla \rho \implies \frac{D}{\rho} \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = D\nabla \cdot \vec{v} + \vec{v} \cdot \overbrace{\left(D \frac{\nabla \rho}{\rho} \right)}^{\vec{u}}, \quad (2.97)$$

la ecuación (2.96) queda como

$$mD\nabla \left[\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) \right) \right] = \vec{f}_- + m\vec{u} \times (\nabla \times \vec{v}) + mD\nabla \times (\nabla \times \vec{v}), \quad (2.98)$$

donde el lado izquierdo se anula, siguiendo la ecuación de continuidad. Entonces, la fuerza \vec{f}_- que cambia de signo bajo inversiones temporales queda (en la norma de Coulomb $\nabla \cdot \vec{A} = 0$) como

$$\vec{f}_- = -q\vec{u} \times (\nabla \times \vec{A}) + qD\nabla^2 \vec{A}. \quad (2.99)$$

Así, es necesario introducir primero el cambio de variable

$$w_+ + w_- = \ln \rho, \quad (2.100a)$$

$$w_+ - w_- = -i2S, \quad (2.100b)$$

para poder desacoplar las ecuaciones (2.93) y (2.94) con la elección $\lambda = 1$,

$$-i2mD \frac{\partial w_+}{\partial t} = 2mD^2 [(\nabla w_+)^2 + \nabla^2 w_+] + V - iDq \left(2\vec{A} \cdot \nabla w_+ + \nabla \cdot \vec{A} \right) + \frac{q^2}{2m} \vec{A}^2, \quad (2.101a)$$

$$i2mD \frac{\partial w_-}{\partial t} = 2mD^2 [(\nabla w_-)^2 + \nabla^2 w_-] + V + iDq \left(2\vec{A} \cdot \nabla w_- + \nabla \cdot \vec{A} \right) + \frac{q^2}{2m} \vec{A}^2. \quad (2.101b)$$

Finalmente, se introduce el último cambio de variable

$$\psi_+ = e^{w_+} = \sqrt{\rho} e^{-iS}, \quad (2.102a)$$

$$\psi_- = e^{w_-} = \sqrt{\rho} e^{iS}, \quad (2.102b)$$

para obtener las conocidas expresiones

$$-i2mD \frac{\partial \psi_+}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(i2mD \nabla - q\vec{A} \right)^2 \psi_+ + V \psi_+, \quad (2.103a)$$

$$i2mD \frac{\partial \psi_-}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(-i2mD \nabla - q\vec{A} \right)^2 \psi_- + V \psi_-, \quad (2.103b)$$

lo que permite concluir que, dada la elección $D = \hbar/2m$, se puede obtener, de la descripción estocástica detallada en esta sección, la ecuación de Schrödinger. Vemos que en este caso la ecuación (2.85a) se escribe en términos de la aceleración

$$\vec{a}_Q = \hat{D}_c \vec{v} + \hat{D}_s \vec{u}, \quad (2.104)$$

lo que remarca el hecho de que la dinámica del sistema ha dejado de ser clásica.

Capítulo 3

Desarrollo

Como se anticipó en la sección 1.1, el objetivo principal de esta tesis es intentar entender las discrepancias entre la línea de investigación del grupo del Dr. de la Peña y trabajos de índole numérica como los de las referencias [15, 16] a través de un problema específico: El efecto Kapitza-Dirac. Es por ello que, en la primera parte de este capítulo, se propone un método analítico que describe la interacción de un electrón con ondas electromagnéticas *externas* (sean debidas al láser o a los modos del CPC) utilizando los fundamentos teóricos de la secciones 2.1. En la segunda se analiza un método numérico que implementa las ecuaciones descritas en la primera parte para construir, electrón por electrón, los patrones de difracción de ambas versiones del efecto Kapitza-Dirac detalladas en la sección 2.2.

3.1. Fuerza sobre el electrón

Como el sistema a analizar es el del efecto K-D en sus versiones clásica y cuántica, para la primera se calculará la fuerza debida al láser sobre una partícula cargada (por ejemplo, un electrón) que se mueve en la dirección \hat{z} con velocidad $\vec{v}(t) = v(t)\hat{z}$ suficientemente pequeña para que no sea necesario un tratamiento relativista; para la segunda se calculará la fuerza debida a los modos del CPC, y se sumará a la fuerza de la versión clásica. Para simplificar los cálculos, descomponemos el campo en componentes contra-propagantes y de igual polarización. De esta manera, la fuerza sobre el electrón a calcular puede ser usada tanto para la fuerza debida al láser como para la debida a los modos del CPC. Las componentes eléctricas de cada modo se pueden escribir entonces como

$$\vec{E}_1(\vec{r}, t) = \vec{E}_0^k e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r} + \eta(\vec{k}, \lambda))}, \quad \vec{E}_2(\vec{r}, t) = \vec{E}_0^k e^{i(\omega t + \vec{k} \cdot \vec{r} + \eta(\vec{k}, \lambda))}, \quad (3.1)$$

donde el vector constante $\vec{E}_0^k = E_0^k \hat{\varepsilon}_{\vec{k}, \lambda}$ da la polarización de los modos (para cada \vec{k} y $\lambda = 1, 2$), y η es una fase aleatoria uniformemente distribuida en $[0, 2\pi)$ para el caso de los modos del CPC, pero con un valor no aleatorio cuando (3.1) represente la luz del láser. Luego, las expresiones de los vectores unitarios que dan la dirección de propagación y la base de polarizaciones de los modos, respectivamente, son

$$\hat{k} = \begin{pmatrix} \text{sen } \theta \cos \phi \\ \text{sen } \theta \text{ sen } \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (3.2a)$$

$$\hat{\epsilon}_{k,1} = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \phi \cos \chi - \text{sen } \phi \text{ sen } \chi \\ \cos \theta \text{ sen } \phi \cos \chi + \cos \phi \text{ sen } \chi \\ - \text{sen } \theta \cos \chi \end{pmatrix}, \quad (3.2b)$$

$$\hat{\epsilon}_{k,2} = \begin{pmatrix} - \cos \theta \cos \phi \text{ sen } \chi - \text{sen } \phi \cos \chi \\ - \cos \theta \text{ sen } \phi \text{ sen } \chi + \cos \phi \cos \chi \\ \text{sen } \theta \text{ sen } \chi \end{pmatrix}, \quad (3.2c)$$

donde (r, θ, ϕ) definen las coordenadas esféricas polares con las convenciones usuales y χ es un ángulo que se elige al azar entre $[0, 2\pi)$. Nótese que el vector de polarización se define de esta manera para garantizar que $\hat{k} \cdot \hat{\epsilon}_k = 0$. Debido a que la ecuación (3.1) representa ondas planas [22], se cumple que las componentes magnéticas de los modos son

$$\vec{B}_1(\vec{r}, t) = \frac{1}{c} \hat{k} \times \vec{E}_1(\vec{r}, t), \quad \vec{B}_2(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c} \hat{k} \times \vec{E}_2(\vec{r}, t), \quad (3.3)$$

por lo que la fuerza de Lorentz que siente el electrón debido a este par de modos es

$$\vec{F}_L = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) = q \left[\vec{E}_0^k (e^{i\varphi_1} + e^{i\varphi_2}) + \frac{1}{c} \vec{v} \times (\hat{k} \times \vec{E}_0^k) (e^{i\varphi_1} - e^{i\varphi_2}) \right], \quad (3.4)$$

donde se definieron por simplicidad las fases $\varphi_{1,2} = \omega t \mp \vec{k} \cdot \vec{r} + \eta_{\vec{k},\lambda}$. Luego, como $\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B}(\vec{A} \cdot \vec{C}) - \vec{C}(\vec{A} \cdot \vec{B})$, se tiene que la fuerza de Lorentz es

$$\vec{F}_L = q \left[(e^{i\varphi_1} + e^{i\varphi_2}) - \frac{\vec{v} \cdot \hat{k}}{c} (e^{i\varphi_1} - e^{i\varphi_2}) \right] \vec{E}_0^k + \frac{q}{c} (\vec{v} \cdot \vec{E}_0^k) (e^{i\varphi_1} - e^{i\varphi_2}) \hat{k}. \quad (3.5)$$

Nótese en la expresión de la fuerza dada por la ecuación (3.5) que hay un término en la dirección de la polarización (es decir, en la dirección del campo eléctrico \vec{E}_0^k) y un término en la dirección del vector de propagación \hat{k} . Éste último es el responsable de la desviación transversal de los electrones (respecto a su movimiento original, antes del láser) en la versión clásica del efecto K-D. Así, si se escribe la ecuación (3.5) en componentes, se tiene el sistema

$$F_x = qE_0^k (e^{i\varphi_1} + e^{i\varphi_2}) (\hat{\epsilon}_k \cdot \hat{x}) + \frac{qE_0^k}{c} (e^{i\varphi_1} - e^{i\varphi_2}) \left[(\vec{v} \cdot \hat{\epsilon}_k)(\hat{k} \cdot \hat{x}) - (\vec{v} \cdot \hat{k})(\hat{\epsilon}_k \cdot \hat{x}) \right], \quad (3.6a)$$

$$F_y = qE_0^k (e^{i\varphi_1} + e^{i\varphi_2}) (\hat{\epsilon}_k \cdot \hat{y}) + \frac{qE_0^k}{c} (e^{i\varphi_1} - e^{i\varphi_2}) \left[(\vec{v} \cdot \hat{\epsilon}_k)(\hat{k} \cdot \hat{y}) - (\vec{v} \cdot \hat{k})(\hat{\epsilon}_k \cdot \hat{y}) \right], \quad (3.6b)$$

$$F_z = qE_0^k (e^{i\varphi_1} + e^{i\varphi_2}) (\hat{\epsilon}_k \cdot \hat{z}) + \frac{qE_0^k}{c} (e^{i\varphi_1} - e^{i\varphi_2}) \left[(\vec{v} \cdot \hat{\epsilon}_k)(\hat{k} \cdot \hat{z}) - (\vec{v} \cdot \hat{k})(\hat{\epsilon}_k \cdot \hat{z}) \right], \quad (3.6c)$$

el cual, substituyendo explícitamente las expresiones de los vectores \hat{k} y $\hat{\epsilon}_{k,\lambda}$ y sumando sobre $\lambda = 1, 2$ (ecs. (3.2)), se obtiene para la componente en x

$$F_x = 2qE_0^k \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}) \{ \cos \theta \cos \phi [\cos(\omega t + \eta_1) \cos \chi - \cos(\omega t + \eta_2) \text{sen } \chi] \} \\ + 2qE_0^k \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}) \{ - \text{sen } \phi [\cos(\omega t + \eta_1) \text{sen } \chi - \cos(\omega t + \eta_2) \cos \chi] \}$$

$$\begin{aligned}
& + 2\frac{qE_0^k}{c} \operatorname{sen}\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \left\{ \operatorname{sen} \theta [\operatorname{sen}(\omega t + \eta_1) \operatorname{sen} \chi + \operatorname{sen}(\omega t + \eta_2) \cos \chi] v_y \right\} \\
& + 2\frac{qE_0^k}{c} \operatorname{sen}\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \left\{ \cos \theta \operatorname{sen} \phi [\operatorname{sen}(\omega t + \eta_1) \operatorname{sen} \chi + \operatorname{sen}(\omega t + \eta_2) \cos \chi] v_z \right\} \\
& + 2\frac{qE_0^k}{c} \operatorname{sen}\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \left\{ -\cos \phi [\operatorname{sen}(\omega t + \eta_1) \cos \chi - \operatorname{sen}(\omega t + \eta_2) \operatorname{sen} \chi] v_z \right\}, \quad (3.7)
\end{aligned}$$

mientras que para la componente en y y en z

$$\begin{aligned}
F_y & = 2qE_0^k \cos\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \left\{ \cos \theta \operatorname{sen} \phi [\cos(\omega t + \eta_1) \cos \chi - \cos(\omega t + \eta_2) \operatorname{sen} \chi] \right\} \\
& + 2qE_0^k \cos\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \left\{ \cos \phi [\cos(\omega t + \eta_1) \operatorname{sen} \chi + \cos(\omega t + \eta_2) \cos \chi] \right\} \\
& - 2\frac{qE_0^k}{c} \operatorname{sen}\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \left\{ \operatorname{sen} \theta [\operatorname{sen}(\omega t + \eta_1) \operatorname{sen} \chi + \operatorname{sen}(\omega t + \eta_2) \cos \chi] v_x \right\} \\
& + 2\frac{qE_0^k}{c} \operatorname{sen}\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \left\{ \cos \theta \cos \phi [\operatorname{sen}(\omega t + \eta_1) \operatorname{sen} \chi + \operatorname{sen}(\omega t + \eta_2) \cos \chi] v_z \right\} \\
& + 2\frac{qE_0^k}{c} \operatorname{sen}\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \left\{ \operatorname{sen} \phi [\operatorname{sen}(\omega t + \eta_1) \cos \chi - \operatorname{sen}(\omega t + \eta_2) \operatorname{sen} \chi] v_z \right\}, \quad (3.8)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_z & = 2qE_0^k \cos\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \left\{ \operatorname{sen} \theta [-\cos(\omega t + \eta_1) \cos \chi + \cos(\omega t + \eta_2) \operatorname{sen} \chi] \right\} \\
& + 2\frac{qE_0^k}{c} \operatorname{sen}\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \left\{ -\cos \theta \operatorname{sen} \phi [\operatorname{sen}(\omega t + \eta_1) \operatorname{sen} \chi + \operatorname{sen}(\omega t + \eta_2) \cos \chi] v_x \right\} \\
& + 2\frac{qE_0^k}{c} \operatorname{sen}\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \left\{ \cos \phi [\operatorname{sen}(\omega t + \eta_1) \cos \chi - \operatorname{sen}(\omega t + \eta_2) \operatorname{sen} \chi] v_x \right\} \\
& + 2\frac{qE_0^k}{c} \operatorname{sen}\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \left\{ \cos \theta \cos \phi [\operatorname{sen}(\omega t + \eta_1) \operatorname{sen} \chi + \operatorname{sen}(\omega t + \eta_2) \cos \chi] v_y \right\} \\
& + 2\frac{qE_0^k}{c} \operatorname{sen}\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \left\{ \operatorname{sen} \phi [\operatorname{sen}(\omega t + \eta_1) \cos \chi - \operatorname{sen}(\omega t + \eta_2) \operatorname{sen} \chi] v_z \right\}. \quad (3.9)
\end{aligned}$$

Como se mencionó anteriormente, las ecuaciones (3.7) a (3.9) son generales, por lo que se pueden particularizar para describir al electrón cuando entra a la región del láser. En este caso, se tiene que

$$\vec{E}_0^L = E_0^L \hat{\varepsilon}_k = E_0^L \hat{z} \quad \hat{k} = \hat{y} \implies \theta = \phi = \frac{\pi}{2}, \quad \chi = \pi, \quad (3.10)$$

es decir, las ecuaciones (3.6) en la zona del láser se escriben como

$$F_x = 0, \quad (3.11a)$$

$$F_y = \frac{qE_0^L}{c} \left(e^{i\varphi_1^L} - e^{i\varphi_2^L} \right) v_z, \quad (3.11b)$$

$$F_z = qE_0^L \left(e^{i\varphi_1^L} + e^{i\varphi_2^L} \right) - \frac{qE_0^L}{c} \left(e^{i\varphi_1^L} - e^{i\varphi_2^L} \right) v_y, \quad (3.11c)$$

al mismo tiempo que las fases de las exponenciales se reducen a $\varphi_{1,2}^L = \omega_L t \mp k_L y$. Finalmente,

tomando la parte real de las exponenciales, se obtienen las expresiones para las aceleraciones

$$F_x = 0, \quad (3.12a)$$

$$F_y = \frac{qE_0^L}{c} (\cos \varphi_1^L - \cos \varphi_2^L) v_z, \quad (3.12b)$$

$$F_z = qE_0^L (\cos \varphi_1^L + \cos \varphi_2^L) - \frac{qE_0^L}{c} (\cos \varphi_1^L - \cos \varphi_2^L) v_y. \quad (3.12c)$$

Estas fuerzas son precisamente las que aparecen en la ecuación (2.16) (\vec{F}_{ext} es la fuerza debida al láser, ecs. (3.12) y \vec{F}_{cpc} por las ecs. (3.6)).

Ahora, como usualmente se hace en los trabajos numéricos similares al presentado en esta tesis [33], se compara el orden de los términos en la ecuación (2.16).

$$m\ddot{\vec{r}} \simeq \vec{F}_{\text{ext}} + \Gamma \frac{d\vec{F}_{\text{ext}}}{dt} + q \left(\vec{E}_{\text{cpc}} + \vec{v} \times \vec{B}_{\text{cpc}} \right) + q\Gamma \frac{d}{dt} \left(\vec{E}_{\text{cpc}} + \vec{v} \times \vec{B}_{\text{cpc}} \right), \quad (3.13)$$

para despreciar los más pequeños y simplificar el cálculo, así como para interpretar el efecto de los términos de reacción de radiación. Primero, si suponemos que el movimiento de los electrones es tal que $v \ll c$, la componente magnética de la fuerza es despreciable comparada con la eléctrica.

Luego, se supone que los modos del campo que contribuyen más significativamente al movimiento tienen longitud de onda mucho mayor que las dimensiones del movimiento, es decir, aplicamos la aproximación dipolar

$$\vec{k} \cdot \vec{r} \ll 1, \quad (3.14)$$

por lo que en la vecindad de cada partícula el campo cambia muy poco, lo que permite despreciar la dependencia del campo en la posición. Así, la ecuación de movimiento se puede escribir de manera aproximada como

$$m\ddot{\vec{r}} \simeq \vec{F}_{\text{ext}} + \Gamma \dot{\vec{F}}_{\text{ext}} + q\vec{E}_{\text{cpc}}(t) + q\Gamma \dot{\vec{E}}_{\text{cpc}}, \quad (3.15)$$

donde $\Gamma \ll 1$ está dado por la ecuación (2.15). Vemos de esta última expresión que cada uno de los términos contribuye de distinta manera a la fuerza total, pues

$$\mathcal{O}(F_{\text{ext}}) = qE_0^L, \quad (3.16a)$$

$$\mathcal{O}(\Gamma \dot{F}_{\text{ext}}) = (\Gamma \omega_L) qE_0^L, \quad (3.16b)$$

$$\mathcal{O}(qE_{\text{cpc}}) = qE_0^{\text{cpc}}, \quad (3.16c)$$

$$\mathcal{O}(q\Gamma \dot{E}_{\text{cpc}}) = (\Gamma \omega_L) qE_0^{\text{cpc}}, \quad (3.16d)$$

es decir, la contribución de cada término se puede comparar con las demás según la expresión

$$\mathcal{O}(F_{\text{ext}}) \gg \mathcal{O}(qE_{\text{cpc}}) \gg \mathcal{O}(\Gamma \dot{F}_{\text{ext}}) \gg \mathcal{O}(q\Gamma \dot{E}_{\text{cpc}}), \quad (3.17)$$

por lo que la dinámica del movimiento estará casi completamente gobernada por la fuerza debida al láser, mientras que el resto de los términos en la ecuación de movimiento contribuyen como perturbaciones.

3.2. Muestreo de los modos del CPC

A partir de lo discutido en la sección 2.2, la fuerza que ejerce el láser sobre el haz de electrones obliga a este último a oscilar a una frecuencia ω_L , por lo cual en este trabajo se consideró describirlo de manera aproximada a través del oscilador armónico simple. Así, el movimiento del haz de electrones es amortiguado a una razón Γ con un ancho de resonancia

$$\Gamma\omega_L^2 \ll \Delta \quad (3.18)$$

donde Δ representa la ventana de frecuencias a considerar en la suma de los modos del CPC.

La pregunta inmediata al intentar implementar el CPC en una simulación numérica, es cómo seleccionar los modos más significativos para el problema en cuestión. En este caso, utilizando la intuición obtenida a partir de la observación experimental de la versión cuántica del efecto K-D [24], el patrón de difracción aparece cuando la longitud de onda del láser es equiparable a la longitud de onda de de Broglie asociada al momento transversal del haz de electrones. Esto último sugiere que los modos del campo significativos son los de frecuencias alrededor de la frecuencia del láser, y con un ancho de ventana Δ definida por el programador¹. Es por esto que el campo eléctrico de los modos del CPC de la ecuación (2.21a) se puede describir como

$$\vec{E}_{\text{cpc}}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}, \lambda} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\epsilon_0 V}} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \eta_{\vec{k}, \lambda}) \hat{\epsilon}_{\vec{k}, \lambda}, \quad (3.19)$$

donde V representa el volumen del sistema, el cual se relaciona con la densidad de modos del muestreo

$$\rho_{\vec{k}} = \frac{V}{(2\pi)^3}, \quad (3.20)$$

para los vectores de onda y las polarizaciones dados por las ecuaciones (3.2). Asimismo, $\rho_{\vec{k}} = N_{\vec{k}}/V_{\vec{k}}$, con $N_{\vec{k}}$ como el número de vectores de onda muestreados y $V_{\vec{k}}$ el volumen en el espacio de los vectores de onda, el cual está dado por la expresión

$$V_{\vec{k}} = \frac{4\pi}{3} \left[\left(\frac{\omega_L + \Delta/2}{c} \right)^3 - \left(\frac{\omega_L - \Delta/2}{c} \right)^3 \right], \quad (3.21)$$

es decir, el muestreo se hace eligiendo modos del CPC de manera isotrópica y homogénea (como se señala en la ref. [21]) en un cascarón esférico en el espacio \vec{k} de grosor Δ alrededor de la frecuencia del láser ω_L , con lo que el volumen V se calcula como

$$V = \frac{(2\pi)^3 N_{\vec{k}}}{V_{\vec{k}}}. \quad (3.22)$$

Así, siguiendo el algoritmo propuesto en las ref. [33, 34], se construye el i -ésimo modo del CPC a

¹Esta ventana cumple con varios propósitos simultáneamente. El primero es hacer eficiente la simulación numérica, pero también sirve para realizar estudios de convergencia del algoritmo. Inicialmente, basta con hacer que la ventana cubra el ancho de resonancia $\Gamma\omega_L^2$ del oscilador armónico.

partir de los números

$$k_i = [(k_{max}^3 - k_{min}^3) \kappa_i + k_{min}^3]^{1/3}, \quad (3.23a)$$

$$\theta_i = \arccos(1 - 2\vartheta_i), \quad (3.23b)$$

$$\phi_i = \varphi_i, \quad (3.23c)$$

donde $k_{max} = (\omega_L + \Delta/2)/c$, $k_{min} = (\omega_L - \Delta/2)/c$, y además κ_i , ϑ_i y φ_i son números aleatorios con distribución uniforme en $[0, 1]$, $[-1, 1]$ y $[0, 2\pi)$, respectivamente², a los cuales se le agrega posteriormente la polarización χ_i . Así, cada modo del CPC esté unívocamente determinado por los cuatro números $\{k_i, \theta_i, \phi_i, \chi_i | i = 1, 2, \dots, N_{\vec{k}}\}$.

Finalmente, como se señala en la ref. [33], en donde se simula la dinámica del oscilador armónico bajo los efectos del CPC, los modos del campo tienden a un muestreo uniforme en el límite $\Delta/\omega_L \ll 1$, lo que impone un límite inferior para el grosor de la esfera Δ/c ,

$$\Gamma\omega_L \ll \frac{\Delta}{\omega_L} \ll 1 \implies \Gamma\omega_L^2 \ll \Delta. \quad (3.24)$$

²Los números k_i , θ_i y ϕ_i , $i \in \{1, 2, \dots, N_{\vec{k}}\}$ se construyen de esta manera para garantizar que el muestreo seleccione modos de manera isotrópica y homogénea, como señala la ref. [21]. Si el lector desea entender por qué estos números tienen las definiciones (3.23), se sugiere consultar la ref. [35].

Resultados y análisis

4.1. Efecto K-D sin Campo de Punto Cero

Primero se probó el algoritmo en el caso clásico, es decir sólo considerando la interacción del haz de electrones con el láser, usando las ecuaciones (3.12). Los parámetros elegidos para la simulación fueron los mismos que los datos experimentales que se reportan en las ref. [1, 24]. Para el haz de electrones se usaron los parámetros

- Velocidad media de los electrones $v = 1.1 \times 10^7 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ (correspondiente a una energía $K \simeq 380 \text{ eV}$),
- anchura a media altura FWHM = $2\sqrt{2\ln 2}\sigma_y \simeq 25 \mu\text{m} \implies \sigma_y \simeq 10.6 \mu\text{m}$,
- desviación estándar para el momento transversal $\sigma_{p_y} \simeq 2.12 \times 10^{-27} \text{ kg} \cdot \frac{\text{m}}{\text{s}}$ (correspondiente a un $\text{FWHM}_{p_y} = 2p_{dB}$ con $\lambda_{dB} = \lambda_L/2$).

En las figuras 4.1 y 4.2 se muestra la distribución inicial del haz de electrones (en $z = 0$) y la distribución del momento transversal en el haz, respectivamente.

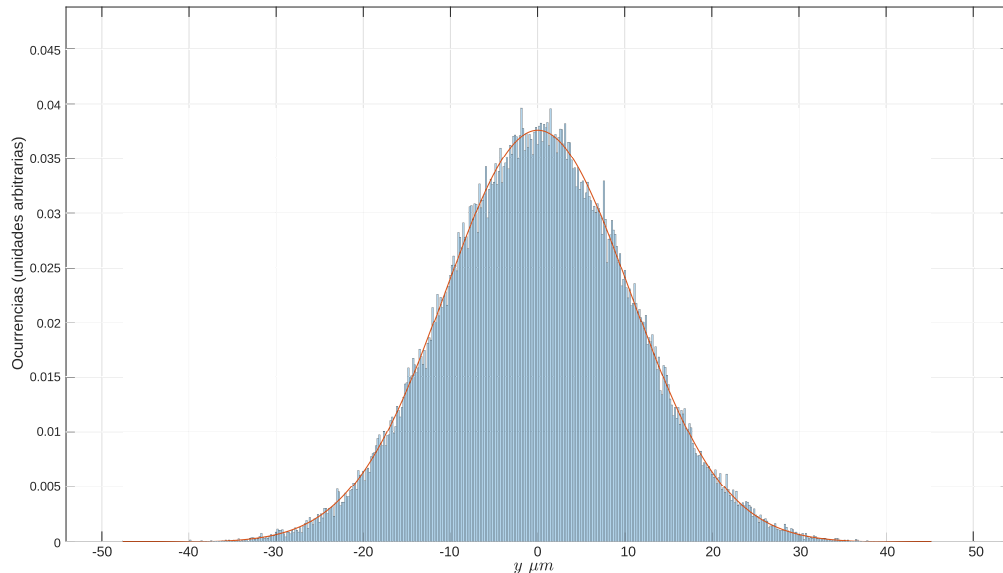


Figura 4.1: Perfil inicial del haz de $N = 100,000$ electrones, en donde las posiciones en el eje y fueron generadas al azar siguiendo una distribución gaussiana con $\sigma_y \simeq 10.6 \mu\text{m}$. Curva sólida para comparación.

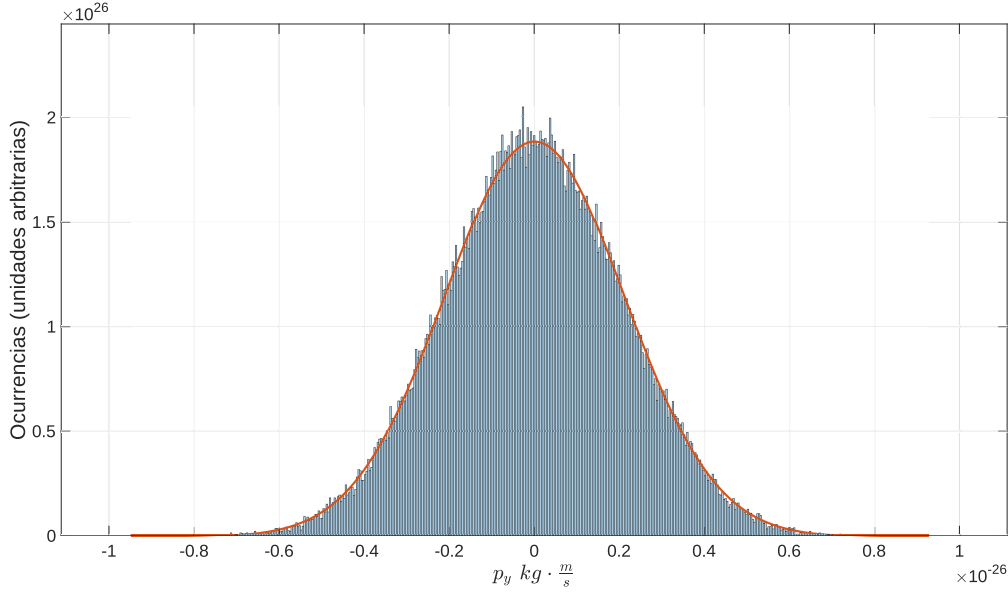


Figura 4.2: Distribución del momento transversal p_y del haz de $N = 100,000$ electrones generada al azar siguiendo una distribución gaussiana con $\sigma_{p_y} \simeq 2.12 \times 10^{-27} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$. Curva sólida para comparación.

Nótese que tanto las posiciones como los momentos iniciales (transversales, en el eje y) del haz del electrones fueron elegidos aleatoriamente a partir de distribuciones gaussianas. Luego, en $z = 0$ inicia la zona del láser, el cual se tomó con las siguientes características [36]:

- Longitud de onda $\lambda = 532 \text{ nm} \implies \omega_L \simeq 3.53 \times 10^{15} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$,
- intensidad $I = 1 \times 10^{14} \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \implies E_0^L = \sqrt{\frac{2I}{c\epsilon_0}} \simeq 2.7 \times 10^8 \frac{\text{V}}{\text{m}}$,
- ancho de la región del láser $D = 125 \mu\text{m}$,
- anchura a media altura FWHM $= 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma_L \simeq 23 \mu\text{m} \implies \sigma_L \simeq 9.8 \mu\text{m}$,
- distancia entre el láser y la pantalla $z_{\text{sc}} = 24 \text{ cm}$,

donde también el perfil del láser se eligió gaussiano. Cabe señalarse que en los trabajos experimentales arriba citados se menciona que la distribución del láser utilizado era muy irregular, por lo que se ajustó a una distribución gaussiana.

La figura 4.3 muestra el patrón obtenido a partir de la simulación trayectoria a trayectoria para $N = 100,000$ partículas, comparada con el patrón obtenido usando lo estudiado en el capítulo 2.2. Lo primero que se aprecia es una diferencia entre lo obtenido calculando trayectorias individuales en el histograma y en la curva sólida obtenida del cap. 2.2 usando la convolución. Ésto puede deberse a que en los resultados obtenidos a través de la convolución no aparece la dependencia espacial del perfil del láser, mientras que en el cálculo trayectoria a trayectoria la intensidad del láser cambia gradualmente según la distribución gaussiana con una desviación estándar σ_L . Curiosamente, al hacer un poco más pequeña la intensidad del láser en el cálculo de la convolución (por un factor de alrededor de 0.7) los resultados coinciden casi perfectamente, lo cual se puede ver en la figura 4.4. Sin embargo, si se busca incorporar la dependencia en z del perfil del láser, se debe agregar a la ecuación (2.34) la dependencia de V_0 (o mejor dicho, de I) como función de z e integrar de 0 a D . Los resultados de realizar lo anterior se pueden apreciar en la figura 4.5. Se observa que la

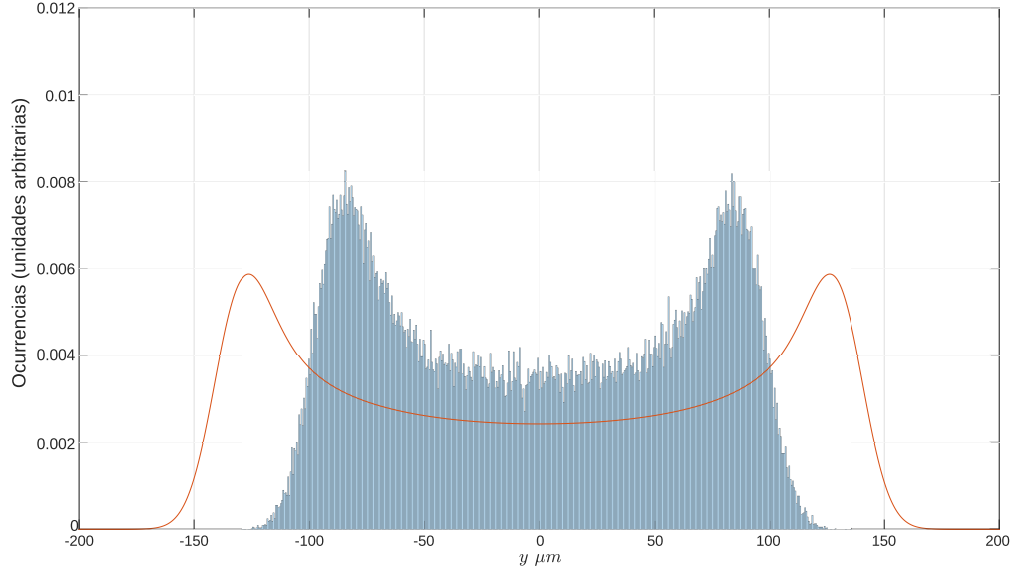


Figura 4.3: Distribución en la pantalla del haz de $N = 100,000$ electrones después de interactuar con el láser, comparada con la curva obtenida a través de la convolución (curva en **anaranjado**).

similitud entre ambos resultados, comparada con la obtenida en la figura 4.3, es mayor. Como se mencionó anteriormente, si la intensidad del láser aumenta (disminuye), el efecto es que los picos en la distribución en la pantalla se alejarán (acercarán) el uno respecto al otro. Así, en la simulación se modificó el valor del láser (alrededor de los valores reportados en las referencias citadas arriba) buscando confirmar este comportamiento, lo cual se puede observar en la figura 4.6.

4.2. Efecto K-D con Campo de Punto Cero

Se implementó el método descrito en el capítulo 3.2 para seleccionar la muestra aleatoria de modos del CPC, como se puede ver en la fig. 4.7, para un número de vectores de onda $N_{\vec{k}} = 20,000$, en donde se observa claramente la isotropía y homogeneidad del muestreo. Aún después de implementar los modos del CPC, es decir, agregando el término $q\vec{E}_{\text{cpc}}$ a la ecuación de movimiento (3.15) usando la expresión (3.6) correspondiente, no se presentan cambios en la pantalla (fig. 4.8). Un primer análisis podría atribuir la falta de resultados (es decir, de cambios en el patrón de difracción al agregar los modos del CPC) al hecho de que la magnitud del campo eléctrico debido al láser es mucho más grande que la magnitud del campo eléctrico de los modos del CPC. En efecto, para un láser con frecuencia angular $\omega_L \simeq 3.53 \times 10^{15} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$, con $\Gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2e^2}{3mc^3} \simeq 6.25 \times 10^{-24} \text{ s}$, y tomando (según la ecuación (3.24)) $\Delta = (9 \times 10^7) \Gamma \omega_L^2 \simeq 7 \times 10^{15} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$, se obtiene un volumen en el espacio de los vectores de onda $V_{\vec{k}} \simeq 5.5 \times 10^{22} \text{ m}^{-1}$. Luego, si $N_{\vec{k}} = 1 \implies V \simeq 4.5 \times 10^{-21} \text{ m}$, por lo que la amplitud del campo (ec. (2.20)) queda como

$$E_0^{\text{cpc}} \simeq 3 \times 10^6 \frac{\text{V}}{\text{m}} \implies \frac{E_0^L}{E_0^{\text{cpc}}} \sim 10^2. \quad (4.1)$$

Aún con esta diferencia era razonable esperar que, debido a que ambos campos contribuyen de manera diferente, la dinámica de las partículas se modifique de tal modo que en el ensemble se notara un cambio apreciable, como se explica a continuación.

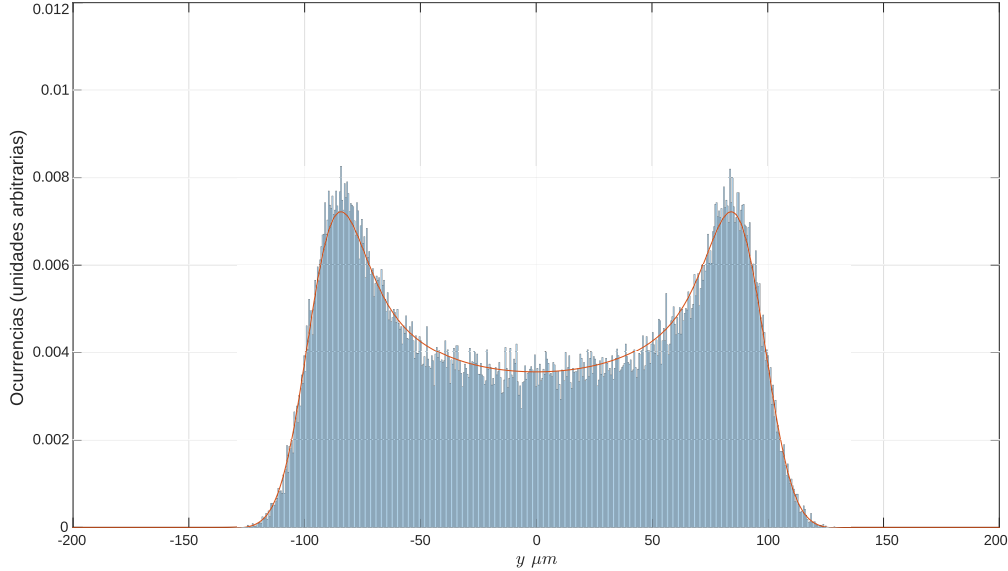


Figura 4.4: Distribución en la pantalla del haz de $N = 100,000$ electrones después de interactuar con el láser, modificando la intensidad del láser en los resultados de la convolución por un factor de aproximadamente 0.7 (curva en **anaranjado**).

La desviación de las partículas debida al cambio en la velocidad transversal del haz, al primer orden de difracción [36], se puede estimar como

$$\Delta v_{\perp} = \theta v_z \simeq \frac{\lambda_{\text{dB}}}{d} v_z = \frac{2h}{mv_z \lambda_L} v_z \sim \frac{10^{-33}}{10^{-30} \times 10^{-7}} \frac{\text{m}}{\text{s}} = 10^4 \frac{\text{m}}{\text{s}}, \quad (4.2)$$

donde $d = \lambda_L/2$ es la periodicidad de la *rejilla difractora*. Al mismo tiempo, si pensamos en la forma en que el Campo de Punto Cero actúa sobre cada electrón, podemos entenderlo como que este último termina realizando una caminata aleatoria en el espacio de velocidades transversales con tamaño de paso

$$\Delta v_{\text{paso}} = a\tau \simeq \frac{qE_0^{\text{CPC}}}{m} \frac{2\pi}{\omega_L} \sim \frac{10^{-19} \times 10^6}{10^{-30}} \frac{10^1}{10^{15}} \frac{\text{m}}{\text{s}} = 10^3 \frac{\text{m}}{\text{s}}, \quad (4.3)$$

donde a y τ son, respectivamente, la aceleración y tiempo característicos. Después de N_{pasos} , la caminata aleatoria lleva al electrón hasta el cambio en la velocidad transversal

$$\Delta v_F = \sqrt{N_{\text{pasos}}} \Delta v_{\text{paso}} = \sqrt{\frac{\tau_{\text{int}}}{\tau}} \Delta v_{\text{paso}} = \sqrt{\frac{D/v}{2\pi/\omega_L}} \Delta v_{\text{paso}} \sim \sqrt{\frac{10^{-4}/10^7}{10^1/10^{15}}} 10^3 \frac{\text{m}}{\text{s}} \simeq 10^4 \frac{\text{m}}{\text{s}}, \quad (4.4)$$

donde τ_{int} es el tiempo de interacción entre el electrón y los modos del CPC en la zona del láser. Vemos entonces de las ecuaciones (4.2) y (4.4) que el cambio en la velocidad transversal para observar cambios en el patrón (al menos al primer orden de difracción) es del mismo orden al cambio debido a la caminata aleatoria. Lo anterior indujo a suponer que, como ambos campos actúan sobre el electrón de manera distinta, era posible que se presentaran cambios significativos en el patrón de la fig. 4.5, aunque finalmente no haya sido observado tal modificación del patrón. Una objeción inmediata podría ser que las estimaciones realizadas arriba son para un sólo modo

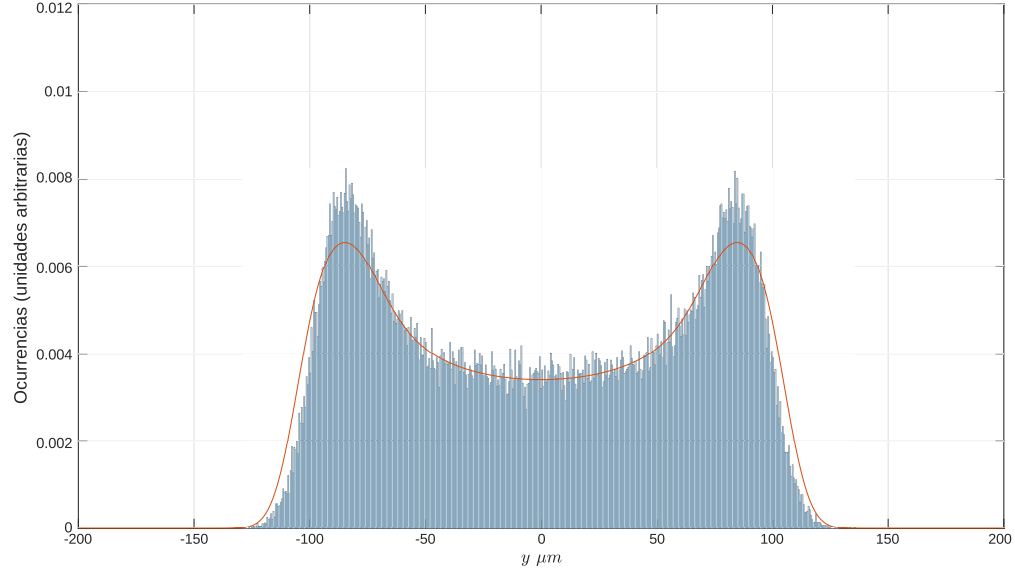
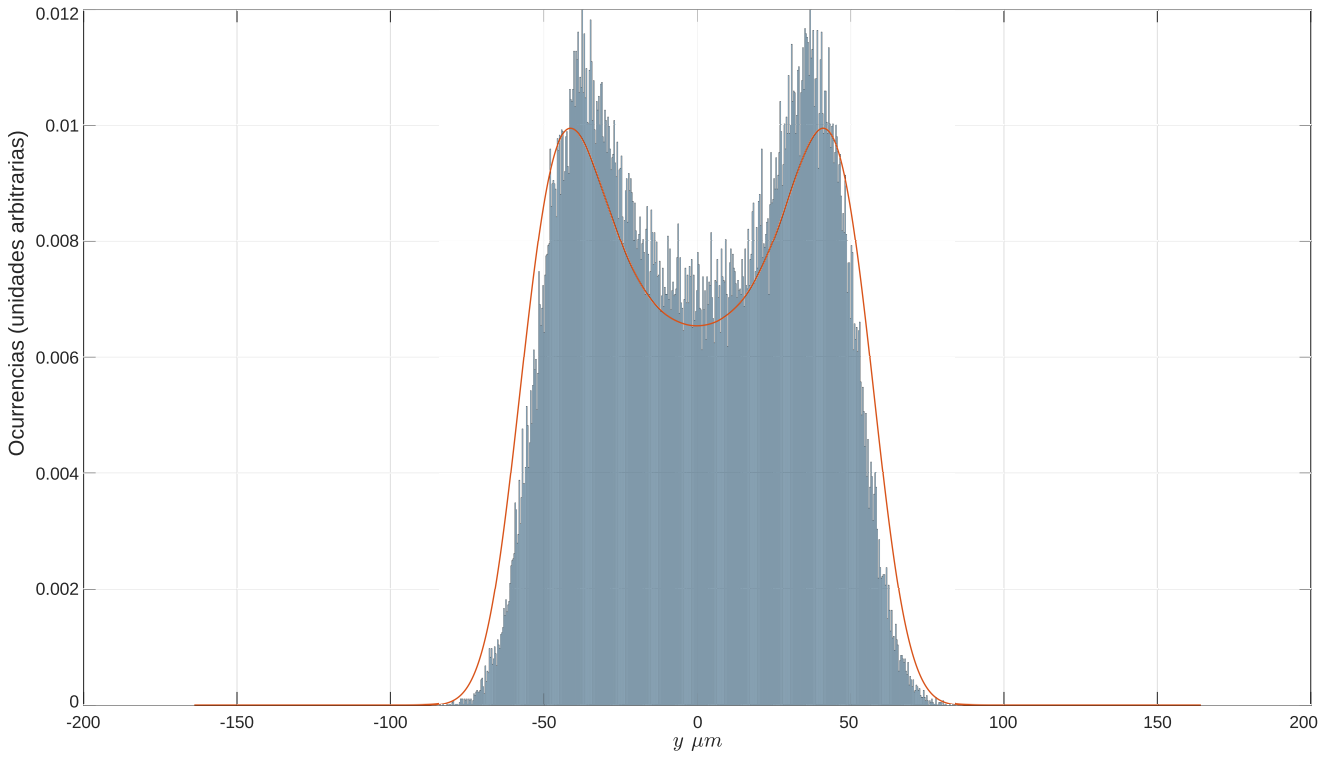


Figura 4.5: Distribución en la pantalla del haz de $N = 100,000$ electrones después de interactuar con el láser, integrando sobre la intensidad láser que depende de z de forma gaussiana en los resultados de la convolución (curva en **anaranjado**)

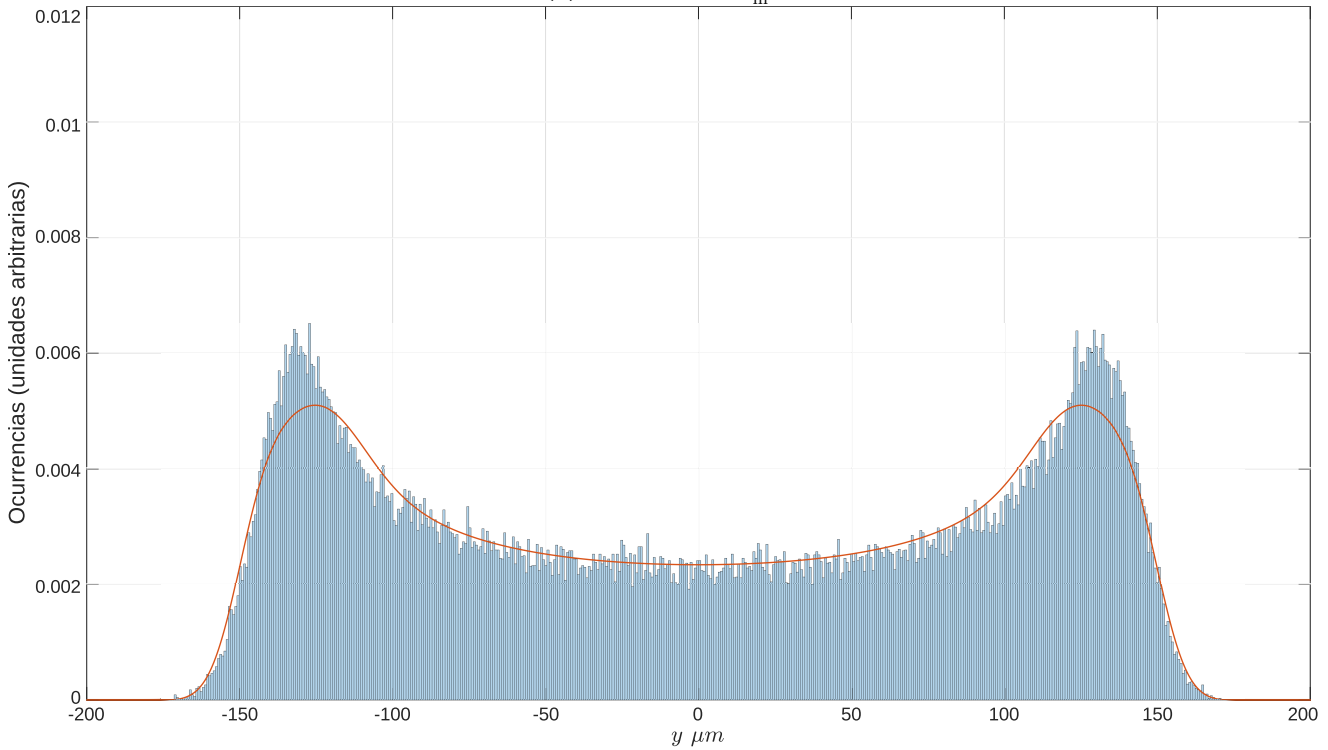
del CPC ($N_{\vec{k}} = 1$), pero al realizar los cálculos para un número bastante más grande (por ejemplo $N_{\vec{k}} = 5,000$) y sacar la componente del campo total debido a los modos del CPC se obtuvo un campo de orden 10^6 V/m. Aún tomando una cantidad significativamente más grande de modos del CPC, no se obtuvieron cambios en el patrón.

La falta de cambios en el patrón exige estudiar el comportamiento de los electrones a lo largo del movimiento, primero para revisar la conservación del momento y de la energía, y luego explorar las velocidades de flujo \vec{v} y de difusión \vec{u} (sección 2.3). Para realizar esto fue necesario reducir el número de partículas a alrededor de $N = 1,000$, pues la cantidad de almacenamiento necesaria y el costo computacional de los cálculos aumentan no sólo como función del tamaño de paso, sino también con el número de partículas, especialmente cuando se registran trayectorias específicas. Lo anterior se debe a que, pese a que los cálculos se realizaron en paralelo en la GPU, los resultados deben pasarse de ésta al CPU y al disco de manera secuencial. En la figura 4.9 se muestran los promedios sobre el ensemble¹ de las trayectorias obtenidas en la simulación de $N = 1,000$ electrones y $N_{\vec{k}} = 5,000$ modos, con los mismos parámetros descritos al inicio de este capítulo. Como se puede ver dicha figura, los promedios de las coordenadas transversales del ensemble casi no cambian, como era de esperarse, pues las distribuciones son inicialmente simétricas, y al interactuar con el láser también lo son. La pequeña desviación del promedio se debe probablemente al reducido número de partículas usadas en el experimento, y se esperaría que con $N \rightarrow \infty$ tales desviaciones tendieran a cero. Igualmente se puede ver que la coordenada en z aumenta (en promedio sobre el ensemble) de manera lineal con el tiempo. Lo anterior viene del hecho de que la componente en z de la velocidad media se mantiene muy cercana a la velocidad media del haz $v = 1.1 \times 10^7$ m/s, aunque cabe señalar que en un momento del tiempo el valor medio de v_z empieza a variar de manera importante, justo a la mitad del tiempo total de interacción con el láser. Lo anterior se debe a que el perfil del láser está distribuido de manera gaussiana con los parámetros detallados al inicio del este capítulo. A diferencia de ese comportamiento, aunque igual acentuándose a la mitad de la zona del láser, el promedio de la componente en y de la velocidad aumenta significativamente. Este comportamiento se observó también en otras ejecuciones, aunque obviamente los promedios

¹Es decir promediando para todas las partículas a un mismo tiempo t .



(a) $I = 0.5 \times 10^{14} \frac{\text{W}}{\text{m}^2}$



(b) $I = 1.5 \times 10^{14} \frac{\text{W}}{\text{m}^2}$

Figura 4.6: Distribución en la pantalla del haz de $N = 100,000$ electrones para diferentes intensidades del láser, integrando sobre la intensidad láser que depende de z de forma gaussiana en los resultados de la convolución (curva en **anaranjado**)

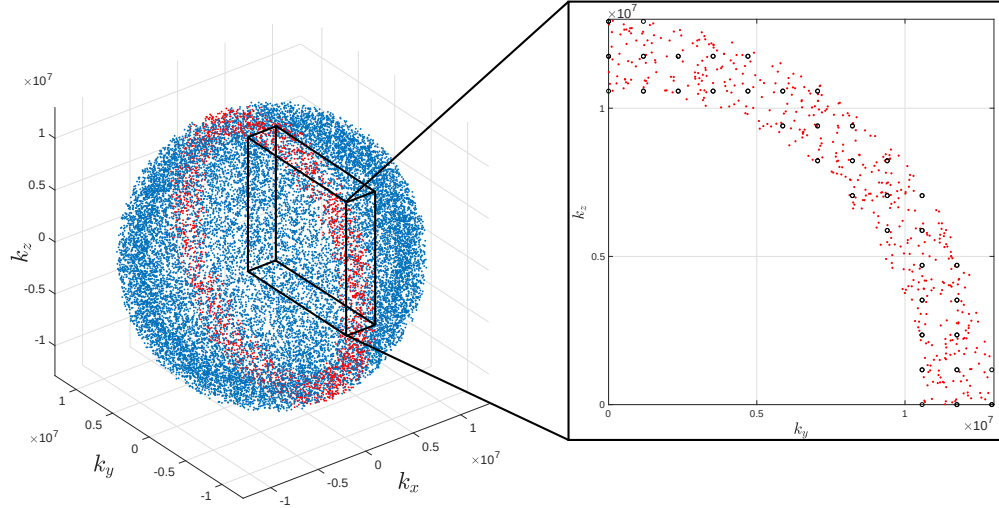


Figura 4.7: Muestreo de los modos del CPC en el espacio \vec{k} . A la izquierda, los puntos en color azul forman el cascarón esférico de grosor Δ/c para $\Delta = (10^7)\Gamma\omega_L^2 \simeq 10^{15} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$. El número de vectores de propagación es $N_{\vec{k}} = 20,000$. Los puntos en color rojo sobresaltan la rebanada del cascarón alrededor de $|\vec{k}_x| \simeq 0$. A la derecha se puede ver la proyección de esta rebanada en el plano $k_y k_z$. Al mismo tiempo se muestran círculos en negro los cuales fueron muestreados de manera cartesiana (para comparación).

cambiaban a valores finales distintos, pero exhibiendo el mismo comportamiento en el tiempo. Algo interesante de los promedios sobre el ensemble se puede ver en la componente en y de la velocidad. Pese a que la condición inicial para todas las partículas se distribuye de manera gaussiana con $\sigma_{p_y} \simeq 2.12 \times 10^{-27} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$ de tal manera que $p_y \simeq 2h/\lambda_L$, la velocidad media cambia radicalmente alrededor de la mitad de la interacción, precisamente cuando cambia la velocidad media en la componente z . Al realizarse varias corridas de la simulación, se obtuvo que la velocidad media en la dirección de y siempre cambiaba de esta manera, siempre a valores finales distintos, aunque siempre coincidiendo con el cambio de la velocidad media en z . Evidentemente, del promedio de la componente en z de la velocidad, la energía media del sistema se mantiene relativamente constante, como se muestra en la figura 4.10, confirmando las aseveraciones de la ref. [1] sobre que la velocidad media y la energía del sistema es constante. Al mismo tiempo, el momento medio del haz se conserva sólo en las componentes en x y z , pero no así en la componente en y debido a la interacción con el láser (ver figura 4.9).

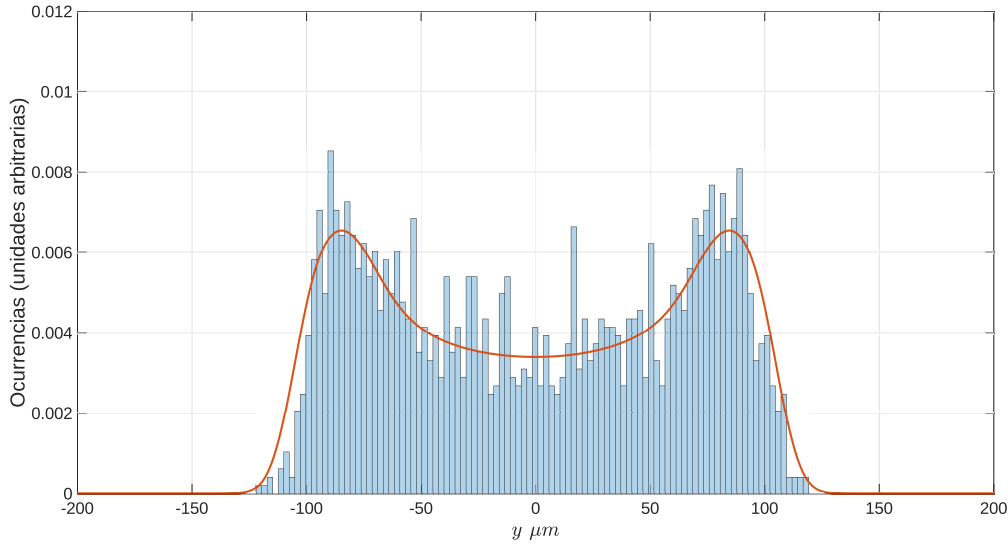


Figura 4.8: Distribución en la pantalla del haz de $N = 2,000$ electrones después de interactuar con el láser, $N_k = 5,000$ modos del CPC, integrando sobre la intensidad láser que depende de z de forma gaussiana en los resultados de la convolución (curva en **anaranjado**).

4.3. Mecánica cuántica estocástica

Ya que se discutió a detalle la falta de cambio en el patrón con los modos del CPC respecto al patrón sin modos del CPC en la sección anterior, la interrogante inmediata es por qué. Esto seguido de la discusión sobre la caminata aleatoria, en donde se justifica el por qué podía esperarse, pese a la diferencia de magnitudes en los campos (ec. (4.1)). La expectativa se basaba básicamente en que los campos debido al láser y debido al CPC actúan de manera diferente sobre los electrones. Ésto puede ser corroborado en trabajos de naturaleza similar a la de este trabajo [15, 16, 33], en donde se señala precisamente lo que se discutió alrededor de la ecuación (3.17): El CPC termina jugando un papel perturbativo en la dinámica de los electrones. Sin embargo, ésto cae en contradicción con los resultados descritos en la sección 2.3 y con las referencias [9, 37], en donde se muestra que la fuente de estocasticidad (en este caso el CPC) cambia totalmente la dinámica del sistema, pues como se mostró en la ecuación (2.78) y la discusión alrededor de ella, la dinámica ha dejado de ser clásica. En esa ecuación, al identificar la fuente de la estocasticidad como el CPC, se agregó a la Segunda Ley de Newton un término que es función del potencial cuántico (ecuación (2.81)), el cual se escribió en términos de la velocidad de difusión \vec{u} dada por la ecuación (2.63)

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \frac{\langle \Delta_+ \vec{x} - \Delta_- \vec{x} \rangle}{2\Delta t} = \frac{\langle \vec{x}'' + \vec{x}' - 2\vec{x} \rangle}{2\Delta t} \quad (4.5)$$

la cual debe ser de tamaño comparable con la velocidad de flujo \vec{v} dada por la ecuación (2.57)

$$\vec{v}(\vec{x}, t) = \frac{\langle \Delta_+ \vec{x} + \Delta_- \vec{x} \rangle}{2\Delta t} = \frac{\langle \vec{x}'' - \vec{x}' \rangle}{2\Delta t} \quad (4.6)$$

De los experimentos mencionados al final de la sección anterior (con $N = 1,000$ electrones), se obtuvieron las curvas mostradas la figura 4.11 para las componentes de estas velocidades, en donde se observa que las componentes en x y en y son comparables en tamaño, mientras que la componente

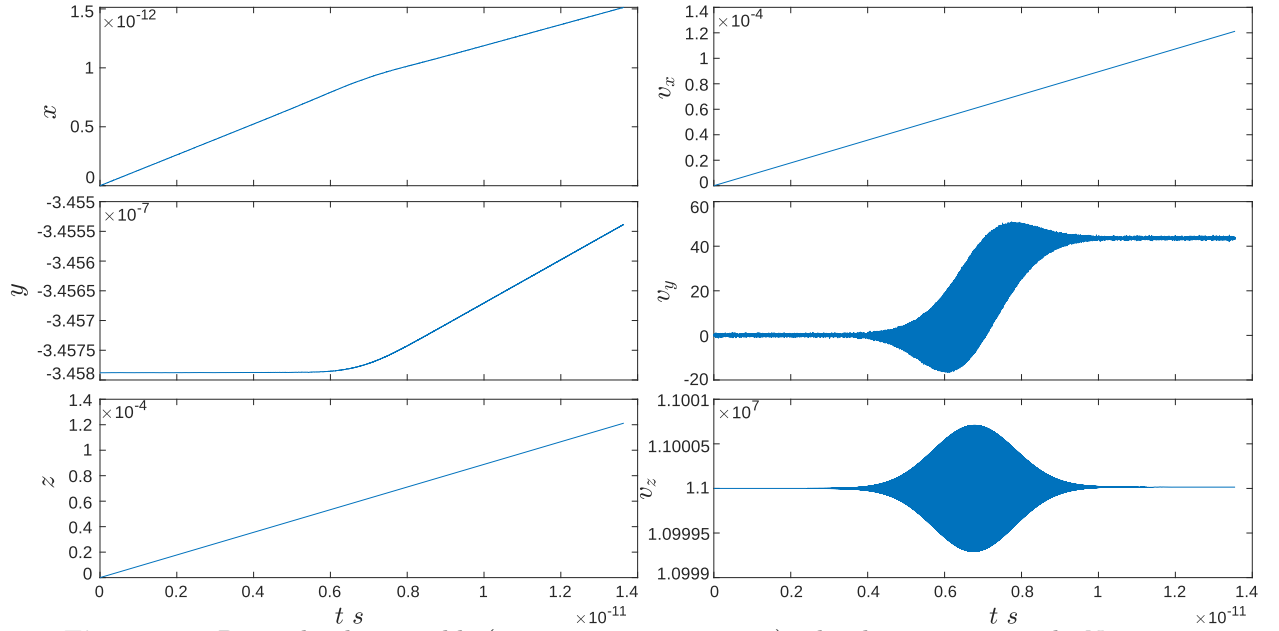


Figura 4.9: Promedio de ensemble (para un mismo tiempo t) sobre las trayectorias de $N = 1,000$ electrones al interactuar con el láser, tomando $N_k^- = 5,000$ modos del CPC. La columna izquierda muestra los promedios de las posiciones x , y y z , mientras que la columna derecha muestra las velocidades promedio v_x , v_y y v_z .

en z la velocidad de flujo es casi tres órdenes de magnitud mayor que esa misma componente de la velocidad de difusión. De la sección 2.3, recordamos que la conclusión obtenida en la dinámica modificada no Newtoniana a la que se somete el ensemble (ecuaciones (2.77) y (2.78)) requiere que las velocidades de flujo y de difusión sean comparables para que los efectos cuánticos aparezcan en la dinámica. Un último detalle que se resalta es el comportamiento de las componentes en z de las velocidades de flujo y de difusión (curvas hasta abajo de la figura 4.11), las cuales muestran cambios abruptos en varias regiones del láser. En esas figuras se muestra cómo casi al inicio del espacio de simulación el promedio de la velocidad empieza a variar (alrededor de $z = 10 \mu m$), y aún de manera más abrupta alrededor de $z = 100 \mu m$, lo cual difiere con las posiciones en z en donde se manifiestan los cambios señalados anteriormente en las velocidades medias en x y y , pues no coinciden con la distribución del láser (cuyo máximo se encuentra en $z = 62.5 \mu m$).

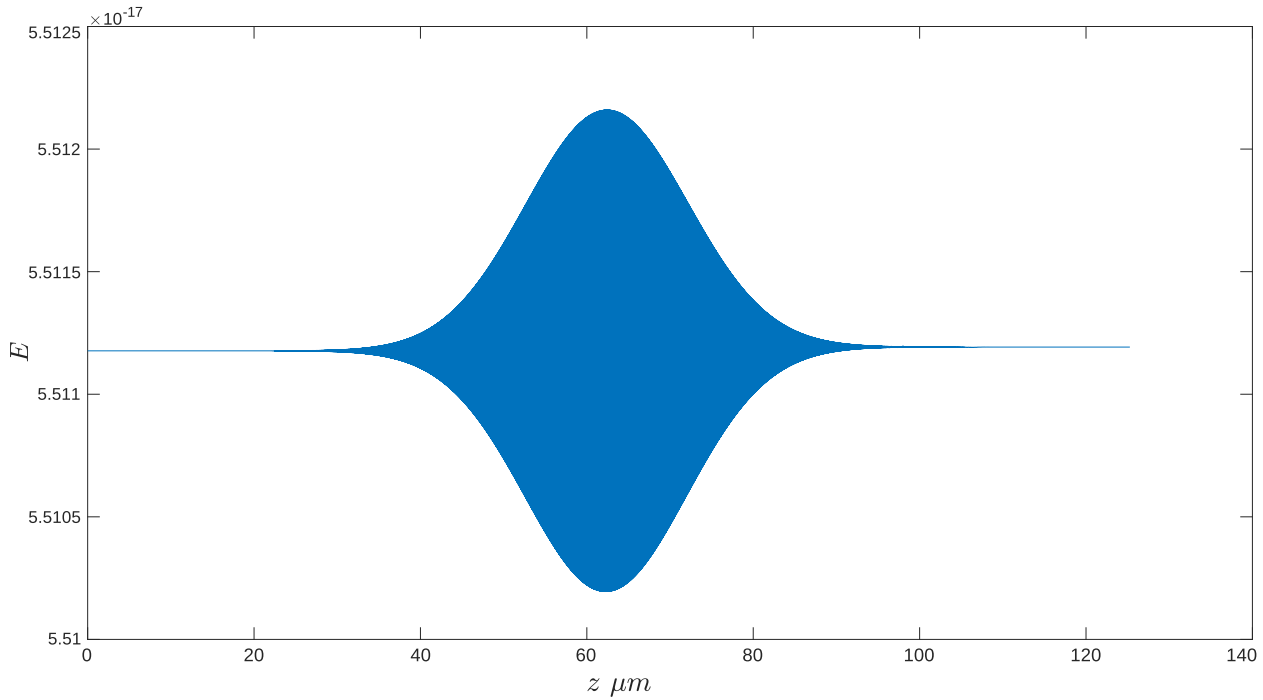


Figura 4.10: Promedio de ensemble sobre la energía de $N = 1,000$ electrones al interactuar con el láser, tomando $N_{\vec{k}} = 5,000$ modos del CPC.

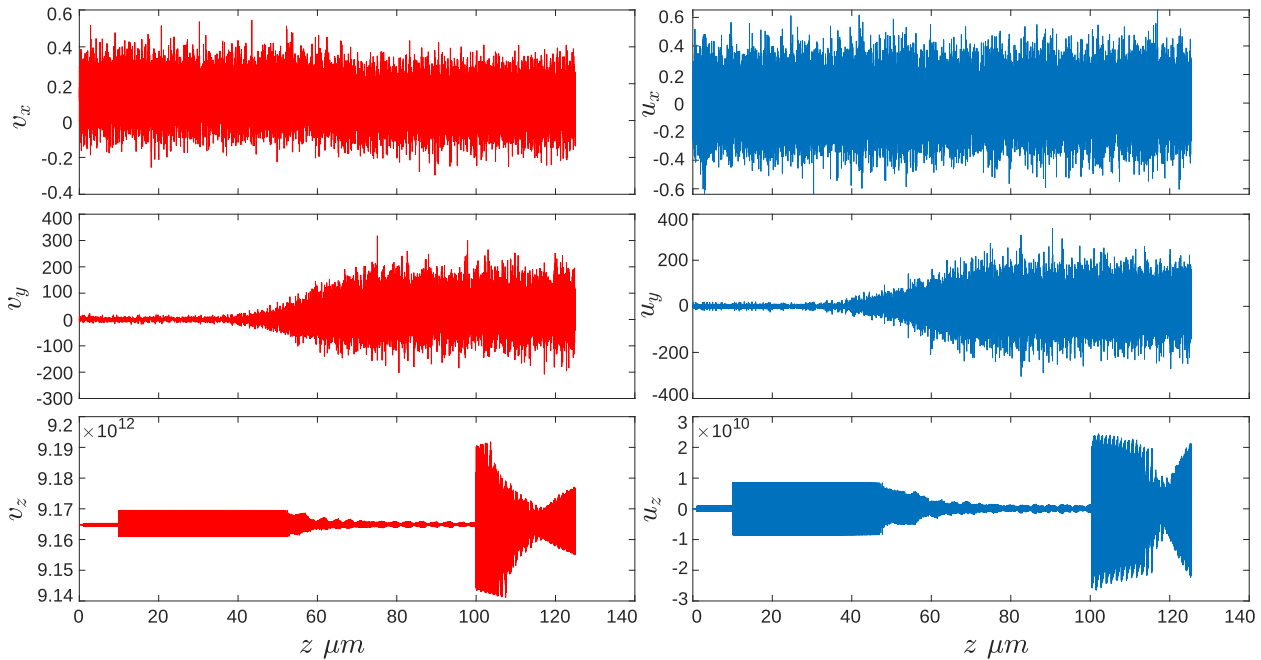


Figura 4.11: Promedio de ensemble sobre las trayectorias de $N = 1,000$ electrones al interactuar con el láser, tomando $N_{\vec{k}} = 5,000$ modos del CPC, para calcular las velocidades de flujo \vec{v} (curva en color rojo) y de difusión \vec{u} (curva en color azul).

Conclusiones

Este trabajo puede trazar las siguientes conclusiones, las cuales se enumeran para distinguirlas claramente, y no necesariamente por orden de importancia:

1. El método implementado funciona eficientemente para la versión clásica del efecto Kapitza-Dirac. Utilizando los datos experimentales reportados en la literatura, se construyó el patrón de difracción de arcoíris trayectoria a trayectoria. Al tiempo de publicación de este trabajo, no ha sido publicado algún trabajo similar con el efecto Kapitza-Dirac clásico.
2. Se confirmaron las suposiciones señaladas en la referencia [1, 27] sobre la conservación de energía del haz, aunque se mostró que el momento transversal del mismo (en la dirección de propagación del láser) no se conserva, debido a la transferencia de momento del haz de luz sobre los electrones. Como se comentó en el capítulo anterior, esta afirmación viene de las figuras 4.9 y 4.10.
3. Pese al éxito en la simulación del efecto K-D clásico, y aunque se implementaron los modos del CPC siguiendo las referencias [33, 34], los resultados arrojados no reproducen el patrón de interferencia del efecto K-D cuántico, aún al hacer la región de muestreo en el espacio \vec{k} más y más grande. En este punto es indispensable recalcar que hay varios parámetros que fueron elegidos arbitrariamente, algunos por comodidad, y otras por falta de otra elección. Por ejemplo el número de polarizaciones por modo del CPC fue elegido arbitrariamente. En trabajos de naturaleza similar a este, a cada vector de onda \vec{k} le corresponde un único par de vectores de polarización, apostando al éxito en la simulación a tomar un gran número de modos del CPC. Sin embargo, de las expresiones de las fuerzas (3.6), éstas parecen indicar una fuerte dependencia de los resultados en la polarización de cada modo. Sobre esta elección se intentaron varias cosas, por ejemplo definir un número de polarizaciones por modo normal del CPC y calcular las fuerzas, pero esto trajo algunos problemas al momento de calcular las intensidades totales del campo. Al final se implementó el muestreo del campo tomando las dos polarizaciones por vector de onda \vec{k} . Otro ejemplo de parámetro arbitrario fue el elegir la frecuencia de resonancia para la simulación fue posible sólo identificar dos frecuencias importantes: La del láser $\omega_L \simeq 3.54 \times 10^{15} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$ y la de Compton $\omega_C \simeq 7.76 \times 10^{20} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$. La elección aquí era clara, pues no hay recursos computacionales que logren resolver un ensemble de electrones agitándose a frecuencias tan altas como las de Compton, por lo que finalmente se eligió la del láser. Éste punto deja claro que aún falta intentar encontrar la manera adecuada de elegir los modos *importantes* del CPC en un sistema en específico, lo cual a la fecha no queda claro cuál es el mecanismo en el que ciertos modos del campo afectan mayoritariamente la dinámica del ensemble en una situación en particular.
4. Según la literatura [38], el problema de la difracción de un haz de partículas difractadas por una rejilla material puede ser entendido, al menos cualitativamente, desde el enfoque de la

EDE. El CPC se difracta en presencia de la rejilla, haciendo una suerte de canales del vector de Poynting que las partículas siguen, cada una pasando por una rendija a la vez, dando a lugar así al elusivo patrón de interferencia. Sin embargo, en el caso de la difracción de Kapitza-Dirac, ésta imagen se dificulta, pues la *rejilla difractora* formada por las ondas de luz del láser en ninguna manera modifican la distribución del campo de los modos del CPC, por lo que la pregunta es cómo se adaptaría la descripción de la EDE a este proceso de difracción, cuando la rejilla difractora es a su vez luz.

5. En trabajos recientes, en donde se han encontrado similitudes entre la Mecánica cuántica y la EDE, ha sido fuertemente cuestionada la naturaleza y el alcance de estas coincidencias [16]. La pregunta de si esas coincidencias son circunstanciales o no se ha manifestado en repetidas ocasiones, especialmente cuando el sistema involucra coherencia. Sin embargo, los autores de dichos trabajos no exploran las condiciones necesarias para obtener resultados cuánticos remarcadas en este trabajo y señaladas en las referencias [9, 37], las cuales claramente indican que la dinámica que siguen esos sistemas ha dejado de ser clásica. Es por ello que descripciones totalmente clásicas como la de este trabajo (y de los trabajos de índole numérico citados anteriormente como los de las refs. [15, 16]) están destinadas a no reproducir el comportamiento de los sistemas cuánticos fielmente. En este sentido sería interesante realizar un análisis estadístico sobre las trayectorias como el presentado en la sección 4.3 en los trabajos numéricos en sistemas donde los resultados obtenidos a través de teorías clásicas coinciden, al menos de manera aproximada, con los resultados cuánticos, como por ejemplo el de la ref. [34]. Lo anterior para intentar entender cómo implementar estas condiciones en la descripción partícula a partícula, es decir, qué se debe agregar a las ecuaciones de las fuerzas (3.13) de cada partícula para que la dinámica deje de ser clásica, y aparezcan entonces comportamientos cuánticos.

En este sentido es importante señalar que en trabajos recientes del grupo de de la Peña [39, 40] se concluye que el efecto del CPC sobre la dinámica de las partículas no es meramente perturbativo, sino que por el contrario, el CPC adquiere control de la dinámica, lo que explica la aparición de efectos cuánticos.

6. Como nota final, sería interesante intentar extender este trabajo a una mayor cantidad de partículas, específicamente en la recopilación de trayectorias. Como se mencionó anteriormente, el problema principal es la gran cantidad de recursos necesarios para ello, pues la cantidad de datos crece tanto como función del tamaño de paso como del número de partículas.

Referencias

- [1] Herman Batelaan. Colloquium: Illuminating the kapitza-dirac effect with electron matter optics. *Rev. Mod. Phys.*, 79:929–941, Jul 2007. doi: 10.1103/RevModPhys.79.929. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.79.929>. IX, IX, 10, 12, 13, 14, 15, 33, 39, 43
- [2] Richard Feynman. Probability and uncertainty; the quantum mechanical view of nature. 1964. URL <https://youtu.be/41Jc75tQcB0>. 1
- [3] Murray Gell-Mann. Questions for the future. Wolfson College lectures. Oxford University Press, Oxford, 1980. 1
- [4] Erwin Schrödinger. *Collected papers on Wave Mechanics*. American Mathematical Society, first english edition edition, 1928. 1
- [5] Max Jammer. *The Philosophy of Quantum Mechanics*. Wiley, 1st edition edition, 1974. p. 161. 1
- [6] Werner Heisenberg. *The Physicist's Conception of Nature*. Scientific Book Guild, 1962. 1
- [7] Edwin Jaynes. Probability in quantum theory. In W. H. Zurek, editor, *Complexity, Entropy and the Physics of Information*, 1990. URL <https://bayes.wustl.edu/etj/articles/prob.in.qm.pdf>. 2
- [8] Einstein: Philosopher-scientist. Edited by Paul Arthur Schilpp, 1949. Reprinted by Harper and Row, New York, 1959. 2
- [9] Luis de la Peña, Ana María Cetto, and Andrea Valdés-Hernández. *The Emerging Quantum*. Springer International Publishing, first edition, 2015. ISBN 9780321856562. URL <https://www.springer.com/gp/book/9783319078922>. 2, 3, 5, 16, 20, 23, 40, 44
- [10] Albert Einstein, Boris Podolsky, and Nathan Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Physical Review*, 47:777–780, May 1935. doi: 10.1103/PhysRev.47.777. URL <https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.47.777>. 2
- [11] Don Howard. Einstein on locality and separability. *Stud. Hist. Philos. Sci. Part A*, 16(3): 171–201, 1985. doi: 10.1016/0039-3681(85)90001-9. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0039368185900019?via%3Dihub>. 2
- [12] John F. Clauser, Michael A. Horne, Abner Shimony, and Richard A. Holt. Proposed expe-

- riment to test local hidden-variable theories. *Phys. Rev. Lett.*, 23:880–884, Oct 1969. doi: 10.1103/PhysRevLett.23.880. URL <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.23.880>. 2
- [13] Louis Vervoort. Are hidden-variable theories for pilot-wave systems possible? *Foundations of Physics*, 48(7):803–826, Jul 2018. ISSN 1572-9516. doi: 10.1007/s10701-018-0184-x. URL <https://doi.org/10.1007/s10701-018-0184-x>. 2
- [14] Louis Vervoort. Bell’s theorem: Two neglected solutions. *Foundations of Physics*, 43(6):769–791, Jun 2013. ISSN 1572-9516. doi: 10.1007/s10701-013-9715-7. URL <https://doi.org/10.1007/s10701-013-9715-7>. 2
- [15] Daniel C. Cole and Yi Zhou. Quantum mechanical ground state of hydrogen obtained from classical electrodynamics. *Physics Letters A*, 317:14–20, August 2003. doi: 10.1016/j.physleta.2003.08.022. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0375960103012696>. 3, 27, 40, 44
- [16] Wayne C. Huang and Herman Batelaan. Testing quantum coherence in stochastic electrodynamics with squeezed schrödinger cat states. *Atoms*, 7(42), 2019. doi: 10.3390/atoms7020042. URL <https://digitalcommons.unl.edu/physicsfacpub/239/>. April. 3, 27, 40, 44
- [17] Richard Feynman, Robert Leighton, and Matthew Sands. *The Feynman Lectures on Physics: Quantum Mechanics*, volume 3. Addison-Wesley Pub. Co., 1965. ISBN 9780321856562. URL <http://www.feynmanlectures.caltech.edu/>. 3
- [18] P. L. Kapitza and P. A. M. Dirac. The reflection of electrons from standing light waves. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 29(2):297–300, 1933. URL <https://doi.org/10.1017/S0305004100011105>. 3, 9
- [19] H. E. Puthoff. Ground state of hydrogen as a zero-point-fluctuation-determined state. *Phys. Rev. D*, 35:3266–3269, May 1987. doi: 10.1103/PhysRevD.35.3266. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.35.3266>. 5
- [20] Timothy H. Boyer. Asymptotic retarded van der waals forces derived from classical electrodynamics with classical electromagnetic zero-point radiation. *Phys. Rev. A*, 5:1799–1802, Apr 1972. doi: 10.1103/PhysRevA.5.1799. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.5.1799>. 5
- [21] Timothy H. Boyer. Random electrodynamics: The theory of classical electrodynamics with classical electromagnetic zero-point radiation. *Phys. Rev. D*, 11:790–808, Feb 1975. doi: 10.1103/PhysRevD.11.790. URL <https://journals.aps.org/prd/abstract/10.1103/PhysRevD.11.790>. 5, 31, 32
- [22] David Jeffrey Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*. Pearson, fourth edition, 2017. ISBN 9780321856562. URL <http://www.cambridge.org/9781108420419>. 6, 28
- [23] John David Jackson. *Classical Electrodynamics*. Wiley, 1998. ISBN 978-0-471-30932-1. URL <https://www.wiley.com/en-us/ClassicalElectrodynamics%3rd+Edition-p-9780471309321>. 8
- [24] Daniel L. Freimund, Kayvan Aflatooni, and Herman Batelaan. Observation of the kapitza-dirac effect. *Nature*, 412:142–143, September 2001. doi: 10.1038/35093065. URL <https://www.nature.com/articles/35093065>. 9, 31, 33

- [25] P. H. Bucksbaum, D. W. Schumacher, and M. Bashkansky. High-intensity kapitza-dirac effect. *Phys. Rev. Lett.*, 61:1182–1185, Sep 1988. doi: 10.1103/PhysRevLett.61.1182. URL <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.61.1182>. 9
- [26] Scott L. Miller and Donald Childers. *Probability and Random Processes: With Applications to Signal Processing and Communications*. Academic Press, Boston, second edition, 2012. ISBN 978-0-12-386981-4. doi: 10.1016/B978-0-12-386981-4.50006-0. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780123869814500060>. 11
- [27] Herman Batelaan. The kapitza-dirac effect. *Contemporary Physics*, 41(6):369–381, 2000. doi: 10.1080/00107510010001220. URL <https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00107510010001220>. 13, 43
- [28] George B. Arfken, Hans J. Weber, and Frank E. Harris. Chapter 14 - bessel functions. In *Mathematical Methods for Physicists (Seventh Edition)*, pages 643 – 713. Academic Press, Boston, seventh edition edition, 2013. ISBN 978-0-12-384654-9. doi: 10.1016/B978-0-12-384654-9.00014-1. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780123846549000141>. 15, 16
- [29] Luis de la Peña and Ana María Cetto. *The Quantum Dice*. Kluwer Academic Publishers, first edition, 1996. ISBN 9780321856562. doi: 10.1007/978-94-015-8723-5. URL <https://www.springer.com/gp/book/9780792338185>. 16
- [30] Peter R. Holland. *The Quantum Theory of Motion: An Account of the de Broglie-Bohm Causal Interpretation of Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 1993. doi: 10.1017/CBO9780511622687. URL <https://www.cambridge.org/core/books/quantum-theory-of-motion/EF981BAE6222AE87171908E8DB74AF98>. 23
- [31] Herbert Goldstein, Charles P. Poole, and John L. Safko. *Classical Mechanics*. Addison Wesley, 3rd edition edition, 2002. ISBN 978-0201657029. URL <https://www.pearson.com/us/higher-education/program/Goldstein-Classical-Mechanics-3rd-Edition/PGM170105.html>. 24
- [32] Luis de la Peña. *Introducción a la mecánica cuántica*. Fondo de Cultura Económica, 3ra edición edition, 2014. ISBN 978-6071601766. URL <https://www.fondodeculturaeconomica.com/Ficha/9786071618795/F>. 24
- [33] Wayne C. Huang and Herman Batelaan. Dynamics underlying the gaussian distribution of the classical harmonic oscillator in zero-point radiation. *Journal of Computational Methods in Physics*, 2013, 2013. ISSN 1572-9516. doi: 10.1155/2013/308538. URL <https://www.hindawi.com/journals/jcmp/2013/308538/>. 30, 31, 32, 40, 43
- [34] Wayne C. Huang and Herman Batelaan. Discrete excitation spectrum of a classical harmonic oscillator in zero-point radiation. *Foundations of Physics*, 45(3):333–353, Mar 2015. ISSN 1572-9516. doi: 10.1007/s10701-015-9866-9. URL <https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs10701-015-9866-9>. 31, 43, 44
- [35] Donald Ervin Knuth. *The Art of Computer Programming, Volume 2 (3rd Ed.): Seminumerical Algorithms*. Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., Boston, MA, USA, third edition, 1997. ISBN 0-201-89684-2. URL <https://dl.acm.org/citation.cfm?id=270146>. pp. 134–136. 32

-
- [36] Daniel L. Freimund. *Electron matter optics and the Kapitza-Dirac effect*. PhD thesis, University of Nebraska Lincoln, 2003. URL <https://digitalcommons.unl.edu/dissertations/AAI3092540/>. 34, 36
- [37] Luis de la Peña, Ana María Cetto, and Andrea Valdés-Hernández. Connecting two stochastic theories that lead to quantum mechanics. *Frontiers in Physics*, 8(162), May 2020. doi: 10.3389/fphy.2020.00162. URL <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fphy.2020.00162/full>. 40, 44
- [38] Jaime Avendaño and Luis de la Peña. Reordering of the ridge patterns of a stochastic electromagnetic field by diffraction due to an ideal slit. *Phys. Rev. E*, 72:066605, Dec 2005. doi: 10.1103/PhysRevE.72.066605. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.72.066605>. 43
- [39] Ana María Cetto, Luis de la Peña, and Andrea Valdés-Hernández. Relevance of stochasticity for the emergence of quantization. *The European Physical Journal. Special topics*, 230:923–929, Jan 2021. URL <https://doi.org/10.1140/epjs/s11734-021-00066-4>. 44
- [40] Ana María Cetto, Luis de la Peña, and Andrea Valdés-Hernández. On the physical origin of the quantum operator formalism. *Quantum Studies: Mathematics and Foundations*, 8:229–236, Jan 2021. URL <https://doi.org/10.1007/s40509-020-00241-7>. 44