

UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA  
DEPARTAMENTO FÍSICA

# Estados ligados en el continuo en sistemas hermíticos y no hermíticos

**Sofía Catalina Pinto Muñoz**

Tesis presentada al Departamento de Física de la Universidad Técnica  
Federico Santa María para optar al grado académico de Magíster en Ciencias  
con Mención en Física

Marzo 2025  
Valparaíso, Chile

**Profesores Guía:**  
**Dr. Pedro Orellana**  
**Dr. Rafael Molina**

# Agradecimientos

A mi familia por su amor y apoyo incondicional a lo largo de toda mi vida. En especial, a mi mamá, mi papá y mis hermanos, quienes siempre han estado a mi lado, apoyándome y dándome fuerzas para seguir adelante.

A mis tutores, Pedro Orellana y Rafael Molina, por su guía, apoyo, paciencia y dedicación durante todo este proceso.

A mis amigos, por acompañarme, escucharme y compartir conmigo durante todos estos años.

Finalmente, agradecer el apoyo financiero recibido de ANID a través de la beca ANID-Subdirección de Capital Humano/Magíster Nacional/2023-22231536, de la Agencia estatal de Investigación (AEI) de España y FEDER (ERDF: European Regional Development Fund) mediante el proyecto No. PID2022-136285NB-C31, de la DGIIE USM a través de la beca PI-LIR-24-10 y de FONDECYT a través de los proyectos 1230933 y 1220700.

## Resumen

En las últimas décadas, el estudio de los estados ligados en el continuo (BICs) ha generado una atención significativa, particularmente en los campos de la fotónica, la óptica y la electrónica. De manera similar, la simetría  $PT$  y los sistemas no hermíticos que la exhiben también se han convertido en un área activa de investigación, ya que pueden ofrecer nuevas estrategias de diseño para dispositivos con propiedades innovadoras. A pesar de ser dos tópicos de gran relevancia científica, son pocos los estudios que abordan los BICs en sistemas no hermíticos con simetría  $PT$ . En este trabajo, se estudian la formación y las propiedades de los BICs y cuasi-BICs en dos sistemas específicos de tipo enlace fuerte, donde las energías de sitio actúan como perturbaciones. Se analizan tanto un régimen hermítico como uno no hermítico con simetría  $PT$ , enfocándose en propiedades de transporte como la transmisión y la densidad de estados, utilizando los formalismos de funciones de onda y funciones de Green. Los resultados obtenidos permiten derivar condiciones para la formación de dos tipos de BICs en los sistemas estudiados: los protegidos por simetría y los de tipo Fabry-Pérot. Además, se muestra que los BICs de tipo Fabry-Pérot presentan una alta sensibilidad a las perturbaciones no hermíticas introducidas, mientras que los BICs protegidos por simetría muestran una mayor robustez. Estos hallazgos proporcionan una comprensión más profunda sobre la estabilidad de los BICs en sistemas no hermíticos.

# Contenidos

<b>1</b>	<b>Introducción y Conceptos Previos</b>	<b>5</b>
1.1	Introducción . . . . .	5
1.2	Estados ligados en el continuo . . . . .	7
1.3	Dispersión con funciones de onda . . . . .	10
1.4	Funciones de Green . . . . .	13
1.5	No hermiticidad y simetría PT . . . . .	17
<b>2</b>	<b>Modelos y Desarrollo</b>	<b>19</b>
2.1	Una cruz . . . . .	19
2.1.1	Modelo . . . . .	19
2.1.2	Funciones de onda . . . . .	20
2.1.3	Funciones de Green . . . . .	22
2.2	Dos cruces . . . . .	26
2.2.1	Modelo . . . . .	26
2.2.2	Funciones de onda . . . . .	27
2.2.3	Funciones de Green . . . . .	30
<b>3</b>	<b>Caso Hermítico: Resultados y Análisis</b>	<b>39</b>
3.1	Una cruz . . . . .	39
3.2	Dos cruces . . . . .	45
<b>4</b>	<b>Caso No Hermítico: Resultados y Análisis</b>	<b>55</b>
4.1	Una cruz . . . . .	55
4.2	Dos cruces . . . . .	57
<b>5</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>62</b>
	<b>Referencias</b>	<b>64</b>

# Lista de figuras

1.2.1 Espectro de frecuencia de un sistema abierto, consistente en un continuo de estados extendidos (azul), estados ligados discretos (verdes), resonancias acopladas al continuo que radian su energía (naranja) y estados ligados en el continuo que permanecen localizados sin irradiar (rojo). Imagen extraída de Ref. [1]. . . . .	8
1.2.2 Perfiles de Fano para distintos valores del parámetro $q$ [2]. . . . .	10
1.3.1 Red discreta unidimensional con parámetro de red $a$ . . . . .	10
1.3.2 Proceso de dispersión de una partícula que puede acercarse desde la derecha o desde la izquierda a una muestra que representa un potencial $V_j$ . . . . .	12
2.1.1 Sistema en forma de cruz compuesta por cadenas de sitios acoplados a través de un modelo de enlace fuerte con interacción entre primeros vecinos. . . . .	19
2.2.1 Sistema compuesto por dos estructuras idénticas en forma de cruz, formadas por cadenas de sitios acoplados mediante un modelo de enlace fuerte con interacción entre los primeros vecinos. . . . .	27
2.2.2 a) Separación en secciones del sistema formado por dos estructuras en forma de cruz para el desarrollo con funciones de Green. b) Región vertical de las estructuras, estudiada por separado. . . . .	30
3.1.1 Gráficos para el sistema de una cruz con $N_1 = N_2 = 3$ . a) Perfil de transmisión para el sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Perfil de transmisión para una perturbación hermítica $\Delta = 0.01$ . c) Densidad local de estados del sistema no perturbado. . . . .	41

3.1.2 Gráficos para el sistema de una cruz con $N_1 = 3$ y $N_2 = 5$ . a) Perfil de transmisión para el sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Perfil de transmisión para una perturbación hermítica $\Delta = 0.01$ . c) Densidad local de estados del sistema no perturbado. . . . .	42
3.1.3 Gráficos para el sistema de una cruz con $N_1 = 3$ y $N_2 = 4$ . a) Perfil de transmisión para el sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Perfil de transmisión para una perturbación hermítica $\Delta = 0.01$ . c) Densidad local de estados del sistema no perturbado. . . . .	43
3.1.4 Espectro de $k$ (normalizado en $\pi$ ) para cadenas finitas con $N$ sitios. . . . .	45
3.2.1 Gráficos para el sistema de dos cruces con $N_1 = N_2 = 3$ y $a - 1 = 6$ . a) Perfil de transmisión para el sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Perfil de transmisión para una perturbación hermítica $\Delta = 0.01$ . c) Densidad local de estados para los brazos verticales del sistema no perturbado. d) Densidad local de estados para la región media del sistema no perturbado. . . . .	48
3.2.2 Gráficos para el sistema de dos cruces con $N_1 = N_2 = a - 1 = 3$ . a) Perfil de transmisión para el sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Perfil de transmisión para una perturbación hermítica $\Delta = 0.01$ . c) Densidad local de estados para los brazos verticales del sistema no perturbado. d) Densidad local de estados para la región media del sistema no perturbado. . . . .	49
3.2.3 Gráficos para el sistema de dos cruces con $N_1 = N_2 = 3$ y $a - 1 = 5$ . a) Perfil de transmisión para el sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Perfil de transmisión para una perturbación hermítica $\Delta = 0.01$ . c) Densidad local de estados para los brazos verticales del sistema no perturbado. d) Densidad local de estados para la región media del sistema no perturbado. . . . .	51
3.2.4 Acercamientos al perfil de transmisión mostrado en la Fig. 3.2.3 (b). a) En torno a $k = \frac{1}{2}$ . b) En torno a $k = \frac{3}{4}$ . . . . .	52
3.2.5 Gráficos para el sistema de dos cruces con $N_1 = 6$ , $N_2 = 3$ y $a - 1 = 5$ . a) Perfil de transmisión para el sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Perfil de transmisión para una perturbación hermítica $\Delta = 0.01$ . c) Densidad local de estados para los brazos verticales del sistema no perturbado. d) Densidad local de estados para la región media del sistema no perturbado. . . . .	53

3.2.6 Acercamiento al perfil de transmisión mostrado en la Fig. 3.2.5 (b) en torno a $k = \frac{1}{2}$ . . . . .	54
4.1.1 Perfiles de transmisión para el sistema de una cruz con $N_1 = N_2 = 3$ y perturbaciones no hermíticas que preservan la simetría PT: a) Sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Sistema con perturbación no hermítica $\Delta = 0.01$ . c) Sistema con perturbación no hermítica $\Delta = 0.1$ . En rojo y con línea segmentada se muestra el perfil de transmisión para el sistema con perturbación hermítica de igual magnitud. . . . .	56
4.1.2 Gráficos de la fase de transmisión $\Phi$ (normalizada en $\pi$ ) para el sistema de una cruz con $N_1 = N_2 = 3$ y perturbaciones no hermíticas que preservan la simetría PT. a) Sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Sistema con perturbación no hermítica $\Delta = 0.01$ . c) Sistema con perturbación no hermítica $\Delta = 0.1$ . . . . .	57
4.2.1 Perfiles de transmisión para el sistema de dos cruces con $N_1 = N_2 = a - 1 = 3$ y perturbaciones no hermíticas que preservan la simetría PT. a) Sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Sistema con perturbación no hermítica $\Delta = 0.01$ . c) Sistema con perturbación no hermítica $\Delta = 0.1$ . En rojo y con línea segmentada se muestra el perfil de transmisión para el sistema con perturbación hermítica de igual magnitud. . . . .	58
4.2.2 Acercamiento al perfil de transmisión mostrado en la Fig. 4.2.1 (b) en torno a $k = \frac{1}{2}$ . . . . .	59
4.2.3 Acercamiento al perfil de transmisión en torno a $k = \frac{1}{2}$ para el sistema de dos cruces con $N_1 = N_2 = a - 1 = 3$ y perturbaciones de tipo $\pm(0.005 + i\Delta)$ . a) Para $\Delta = 0$ (sin perturbación de tipo no hermítica). b) Para $\Delta = 10^{-6}$ . c) Para $\Delta = 10^{-5}$ . d) Para $\Delta = 10^{-4}$ . . . . .	60

# Capítulo 1

## Introducción y Conceptos Previos

### 1.1 Introducción

En 1929, John von Neumann y Eugene Wigner fueron los primeros en proponer la existencia de estados ligados en el continuo (BICs, por sus siglas en inglés) dentro del marco de la mecánica cuántica [3]. En su investigación, hallaron una solución particular a la ecuación de Schrödinger, en la que un estado ligado de energía discreta y positiva, dentro del espectro continuo, se genera debido a interferencias múltiples originadas por un potencial oscilatorio, lo que da lugar a la supresión total de la filtración de energía [4].

A pesar de que su formación fue predicha originalmente en el contexto de la mecánica cuántica, los BICs constituyen un fenómeno ondulatorio general [1]. En 1985, Friedrich y Wintgen demostraron que los BICs pueden surgir como resultado de una interferencia destructiva total entre dos resonancias que atraviesan un cruce evitado [5]. En 2008, Marinica et al. realizaron el primer análisis teórico sobre BICs en sistemas ópticos [6], y en 2011, Plotnik et al. llevaron a cabo los primeros experimentos ópticos destinados a identificar y medir estos estados [7].

En la última década, el estudio de los BICs, sus propiedades y aplicaciones ha constituido un tema de investigación activo en distintas áreas de la física [8–16], debido principalmente a sus aplicaciones en la fabricación de dispositivos como sensores, láseres y filtros [1, 9].

A pesar de lo novedoso de estos estados, su estudio se limita principalmente a hamiltonianos hermíticos, los cuales representan sistemas cerrados sin interacción con el entorno y con autovalores reales. Por otro lado, los hamiltonianos no hermíticos son ubicuos en la naturaleza, ya que representan sistemas abiertos con ganancia y/o

pérdida de energía [17] y pueden tener autovalores complejos. Uno de los primeros estudios sobre este tipo de hamiltonianos fue el realizado por George Gamow sobre la desintegración alfa [18]. Sin embargo, hoy en día se encuentran presentes en investigaciones de diversas áreas de la física, como, por ejemplo, en fotónica [17, 19–21]. A pesar de que el estudio general de estos sistemas presenta distintas dificultades, en 1998 Bender y Boettcher propusieron que un hamiltoniano no hermítico que presenta simetría  $PT$  (con ganancia y pérdida de energía balanceada) puede tener autovalores reales [22], lo que dio lugar a una nueva rama de estudio sobre este tipo de sistemas y sus posibles aplicaciones [19, 23].

En este trabajo se estudian la formación y las propiedades de BICs y cuasi-BICs en dos sistemas específicos de tipo enlace fuerte, consistentes en una y dos estructuras en forma de cruz, respectivamente. A través de los métodos de funciones de onda y funciones de Green, se calculan cantidades de interés, como la transmisión y las densidades de estados de los sistemas, las cuales se analizan considerando energías de sitio perturbativas de carácter hermítico y no hermítico (preservando simetría  $PT$ ) para los brazos verticales de los sistemas. Los resultados muestran la formación de BICs protegidos por simetría y BICs tipo Fabry-Pérot, estos últimos con una alta sensibilidad ante las perturbaciones no hermíticas introducidas.

El trabajo cuenta con la siguiente estructura:

- Capítulo 1: Se presentan y explican los conceptos previos necesarios para abordar y comprender el trabajo realizado.
- Capítulo 2: Se muestran los dos modelos de sistemas estudiados, junto con el desarrollo realizado para el cálculo de cantidades de interés, como la transmisión, la densidad local de estados (LDOS) y la fase de transmisión de los sistemas, utilizando los métodos de funciones de onda y funciones de Green.
- Capítulo 3: Se presentan y analizan los resultados obtenidos en el estudio realizado con perturbaciones de tipo hermítico. Se estudian la transmisión y la densidad local de estados (LDOS) para los dos modelos propuestos, con distintas combinaciones de longitudes, y se derivan condiciones de conmensurabilidad para la formación de BICs.
- Capítulo 4: Se presentan y analizan los resultados obtenidos en el estudio

realizado con perturbaciones de tipo no hermítico. Se estudia el efecto de las perturbaciones no hermíticas sobre los diferentes tipos de cuasi-BICs formados y sobre la coherencia del sistema.

- Capítulo 5: Se resume el trabajo realizado, se presentan las conclusiones obtenidas y se propone trabajo futuro.

## 1.2 Estados ligados en el continuo

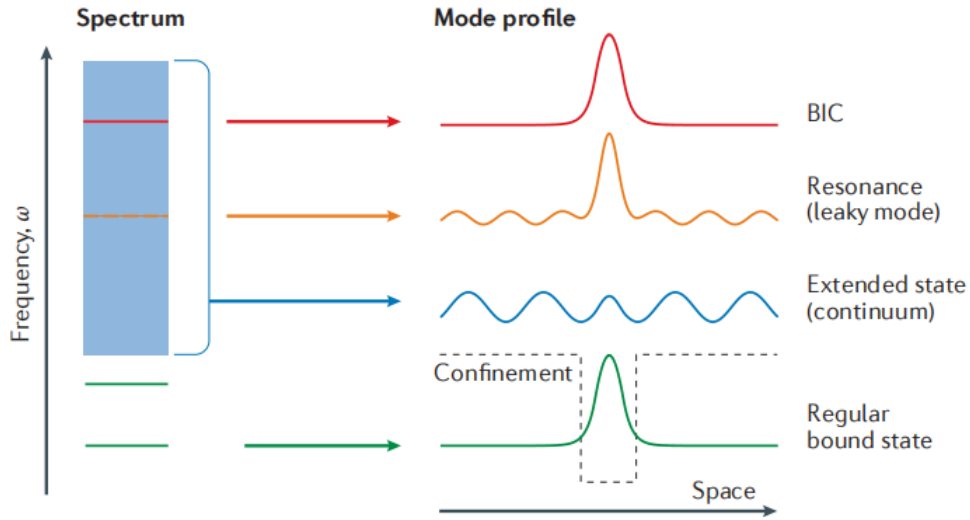
Los estados ligados en el continuo (BICs, por sus siglas en inglés) son ondas que permanecen localizadas y confinadas en el espacio, a pesar de coexistir con espectros continuos de ondas radiantes que transportan energía fuera del sistema [1]. En la Fig. 1.2.1 se aprecia el espectro de frecuencia y los perfiles espaciales de los modos. En un sistema abierto, el espectro de frecuencia consta de un continuo de estados espacialmente extendidos (azul) y estados ligados convencionales (verde), con niveles de frecuencia discretos (fuera del rango continuo) que no radian energía fuera del sistema. Los estados resonantes dentro del espectro continuo (naranja) típicamente se acoplan a los estados extendidos y radian energía, decayendo con el tiempo [1, 24]. Los BICs (rojo) son estados excepcionales: la energía se encuentra completamente localizada, a pesar de que el estado está dentro del espectro continuo de radiación [4]. De forma fundamental, los BICs se originan a partir del fenómeno de interferencia destructiva cuando, por la superposición de dos o más ondas, las pérdidas por radiación se anulan [4].

Las resonancias tradicionales encontradas en el continuo se asocian a una frecuencia compleja:  $\omega = \omega_0 - i\gamma$ , donde la parte real  $\omega_0$  es la frecuencia de resonancia y la parte imaginaria  $\gamma$  representa la tasa de fuga [1]. En experimentos de dispersión, las ondas provenientes del infinito pueden excitar las resonancias tradicionales, lo que provoca una variación en la fase y la amplitud de las ondas dispersadas, dentro de un intervalo de energía que tiene un ancho espectral de  $2\gamma$  (relacionado con el ancho de la resonancia). Sin embargo, estas ondas no pueden excitar los BICs, al encontrarse estos completamente desacoplados de las ondas radiantes [1]. Además, las resonancias se pueden caracterizar a partir del factor de calidad  $Q$ , que se define como la razón entre la frecuencia de resonancia y el ancho total a media altura [25], y proporciona información sobre el tiempo de vida de la resonancia y su capacidad de confinamiento ( $Q$  alto implica resonancia estrecha, tiempo de vida extenso y alta

capacidad de confinamiento) [9]. Matemáticamente:

$$Q = \frac{\omega_0}{2\gamma} \quad (1.1)$$

Tomando en cuenta estos factores, se puede considerar a los BICs como resonancias con tasa de fuga nula y ancho cero ( $\gamma = 0$ ;  $Q$  infinito) [1, 4, 24].



**Figura 1.2.1:** Espectro de frecuencia de un sistema abierto, consistente en un continuo de estados extendidos (azul), estados ligados discretos (verdes), resonancias acopladas al continuo que radian su energía (naranja) y estados ligados en el continuo que permanecen localizados sin irradiar (rojo). Imagen extraída de Ref. [1].

Existen diferentes tipos de BICs dependiendo del mecanismo de formación que los genera, entre los cuales encontramos los BICs protegidos por simetría y los BICs de Fabry-Pérot. Los BICs protegidos por simetría se generan en sistemas que presentan ciertas características de forma tal que modos de distintas clases de simetría se encuentran completamente desacoplados entre sí. Por ejemplo, un arreglo de guías de onda 1D infinito, que soporta un continuo de estados, al que se acoplan dos defectos de forma vertical (arriba y abajo), soporta un estado de modo antisimétrico que no se acopla al continuo de estados de la guía infinita 1D [1, 7, 26]. Por otro lado, los BICs de Fabry-Pérot se generan cuando dos estructuras resonantes actúan como espejos perfectos, atrapando las ondas entre ellas. Los BICs se formarán cuando las frecuencias de resonancia o la distancia que separa las estructuras sea tal que el cambio de fase experimentado por la onda en el trayecto de ida y vuelta sea un

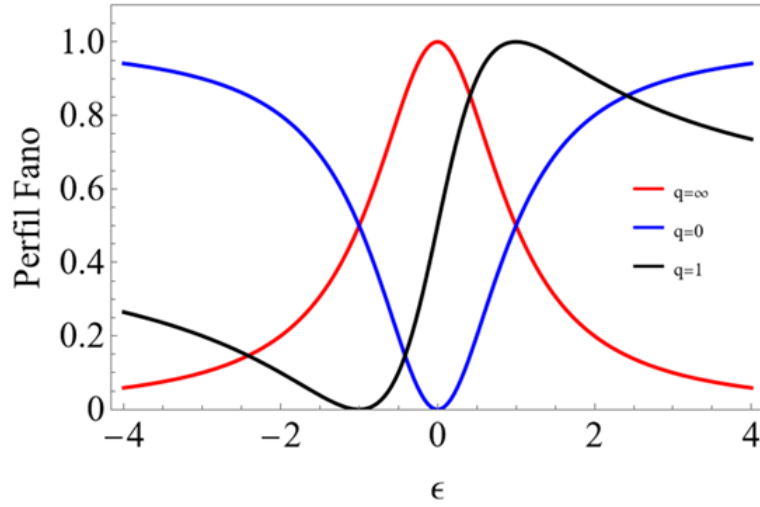
múltiplo de  $2\pi$  [1, 26].

Si bien los BICs se caracterizan por tener un factor de calidad  $Q$  infinito, esto solo existe en el ámbito teórico [4, 9]. En la práctica, es posible obtener estados resonantes con valores de  $Q$  muy altos pero finitos, los cuales se conocen como cuasi-BICs [4, 9, 26]. Matemáticamente, los BICs perfectamente confinados no se acoplan al continuo de radiación y, por lo tanto, no son apreciables en el perfil de transmisión de los sistemas. Sin embargo, al variar levemente los parámetros que permiten este desacoplamiento, el estado se transforma en un cuasi-BIC acoplado mínimamente al continuo y se manifiesta como una resonancia aguda en la transmisión del sistema. Estos cuasi-BICs, en conjunto con la aparición de funciones  $\delta$  de Dirac en la densidad de estados (DOS), permiten la identificación de los BICs.

Los BICs están intrínsecamente relacionados con otro fenómeno físico: el efecto Fano. El efecto Fano ocurre en los casos en que estados discretos coexisten en la misma región energética con estados continuos, dando cuenta de la interacción entre ellos y del efecto de interferencia entre sus amplitudes de excitación por separado [24]. Si bien pueden existir ambos efectos por separado, BICs y resonancias de Fano suelen coexistir en muchos sistemas. El perfil de resonancia de Fano puede ser descrito por la siguiente fórmula matemática:

$$\sigma = \left( \frac{1}{1+q^2} \right) \frac{(\epsilon+q)^2}{\epsilon^2+1} \quad (1.2)$$

Donde  $\epsilon$  es la energía reducida,  $q$  es conocido como el parámetro de Fano y  $\frac{1}{1+q^2}$  es un factor de normalización. Dependiendo del valor que tome el parámetro  $q$ , la curva de Fano puede tener distintas formas, como se muestra en la Fig. 1.2.2: para  $q \rightarrow \pm\infty$  el perfil es una Lorentziana simétrica, para  $q = 0$  será una antiresonancia simétrica y para  $q$  del orden de la unidad, el perfil tiene forma asimétrica [2, 24].



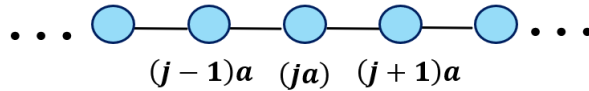
**Figura 1.2.2:** Perfiles de Fano para distintos valores del parámetro  $q$  [2].

### 1.3 Dispersión con funciones de onda

Se estudia una partícula que se desplaza en un potencial unidimensional localizado. El movimiento de la partícula está gobernado por la ecuación de Schrödinger (independiente del tiempo) [27]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + [V(x) - E]\Psi(x) = 0 \quad (1.3)$$

Es posible discretizar dicha ecuación utilizando el método de diferencias finitas [28]. Consideramos una red discreta cuyos sitios se localizan en las posiciones  $x = ja$ , como se muestra en la Fig. 1.3.1, donde  $j$  es un entero y  $a$  es el parámetro de red.



**Figura 1.3.1:** Red discreta unidimensional con parámetro de red  $a$ .

Asumiendo que  $a$  es pequeño, se aproxima la primera derivada:

$$\left. \frac{d\Psi(x)}{dx} \right|_{x=(j+\frac{1}{2})a} \rightarrow \frac{\Psi(ja+a) - \Psi(ja)}{a} \quad (1.4)$$

Y la segunda derivada:

$$\left. \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \right|_{x=ja} \rightarrow \frac{\Psi(ja+a) - 2\Psi(ja) + \Psi(ja-a)}{a^2} \quad (1.5)$$

Cambiando la función de onda continua por una discreta:

$$\Psi(x = ja) \rightarrow u_j \quad (1.6)$$

Se reescribe la segunda derivada como:

$$\left. \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \right|_{x=ja} \rightarrow \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{a^2} \quad (1.7)$$

Cambiando el potencial continuo por uno discreto tal que  $V(x = ja) \rightarrow V_j$  y reemplazando en la ecuación 1.3, se obtiene la ecuación de Schrödinger discreta:

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2}(u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) + [V_j - E]u_j = 0 \quad (1.8)$$

Se hacen los siguientes cambios de variables:

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2} \rightarrow v \quad (1.9)$$

$$V_j - 2v \rightarrow \epsilon_j \quad (1.10)$$

Con lo cual, es posible reescribir la ecuación 1.8 para obtener la ecuación de enlace fuerte (o ligadura fuerte):

$$(E - \epsilon_j)u_j = v(u_{j+1} + u_{j-1}) \quad (1.11)$$

Donde  $\epsilon_j$  es la energía de sitio y  $v$  es el acoplamiento entre sitios.

Se supone, por simplicidad, que el potencial con el que interactúa la partícula tiene la siguiente forma:

$$V_j = \begin{cases} V_j & \text{para } 0 \leq j \leq n \\ 0 & \text{para } j < 0, \quad j > n \end{cases} \quad (1.12)$$

La partícula, moviéndose en una cadena unidimensional de tipo enlace fuerte, puede acercarse a la muestra que representa el potencial por ambos lados, tal como se

muestra en la Fig. 1.3.2.



**Figura 1.3.2:** Proceso de dispersión de una partícula que puede acercarse desde la derecha o desde la izquierda a una muestra que representa un potencial  $V_j$ .

Al interactuar con la muestra, la partícula experimenta dispersión y puede reflejarse o transmitirse [27]. De esta forma, las funciones de onda a ambos lados de la muestra se expresan como:

$$u_j^L = u_j^{L+} + u_j^{L-}, \quad j < 0 \quad (1.13)$$

$$u_j^R = u_j^{R+} + u_j^{R-}, \quad j > n \quad (1.14)$$

Se utiliza un ansatz para la función de onda considerando ondas planas, por lo que las funciones de onda antes descritas pueden expresarse como:

$$u_j^{L+} = Ae^{+ikja} \quad (1.15)$$

$$u_j^{L-} = Be^{-ikja} \quad (1.16)$$

$$u_j^{R+} = Ce^{+ikja} \quad (1.17)$$

$$u_j^{R-} = De^{-ikja} \quad (1.18)$$

Si se considera incidencia únicamente desde la izquierda, como en el caso de este trabajo, se tienen los siguientes coeficientes para las funciones de onda:

$$A \rightarrow 1 \quad , \quad B \rightarrow r \quad , \quad C \rightarrow t \quad , \quad D \rightarrow 0 \quad (1.19)$$

Reescribiendo las ecuaciones 1.13 y 1.14 se obtiene:

$$u_j^L = e^{+ikja} + re^{-ikja}, \quad j < 0 \quad (1.20)$$

$$u_j^R = te^{+ikja}, \quad j > n \quad (1.21)$$

Donde los coeficientes  $r$  y  $t$  corresponden a las amplitudes de reflexión y transmisión del sistema, respectivamente [27], y cumplen (para sistemas hermíticos) la siguiente condición:

$$|r|^2 + |t|^2 = 1 \quad (1.22)$$

Utilizando las ecuaciones de contorno apropiadas para cada problema, es posible resolver un sistema de ecuaciones y obtener expresiones para los coeficientes  $t$  y  $r$ . A partir de estas amplitudes, se definen los coeficientes de transmisión  $T$  y reflexión  $R$ , que representan la probabilidad de que la onda incidente sea transmitida o reflejada, respectivamente [27, 29]:

$$T = |t|^2 \quad (1.23)$$

$$R = |r|^2 \quad (1.24)$$

Una vez calculada la amplitud de transmisión  $t$ , esta puede reescribirse en términos de su módulo  $|t|$  y la fase de transmisión  $\theta^{(t)}$  [30].

$$t = |t|e^{i\theta^{(t)}} \quad (1.25)$$

La fase de transmisión proporciona información sobre la coherencia del sistema [31], es decir, sobre la capacidad de las ondas para experimentar fenómenos de interferencia, y puede obtenerse a partir de la amplitud de transmisión como:

$$\theta^{(t)} = \arctan\left(\frac{\text{Im}[t]}{\text{Re}[t]}\right) \quad (1.26)$$

## 1.4 Funciones de Green

Las funciones de Green representan un método poderoso utilizado en física de materia condensada y sirven como herramienta para entender y estudiar la respuesta del sistema ante una perturbación, así como para capturar su comportamiento dinámico [32]. Para la siguiente definición matemática de las funciones de Green, se sigue el procedimiento explicado en [33]. Las funciones de Green se definen como las soluciones de ecuaciones diferenciales inhomogéneas de tipo:

$$(z - \hat{L}(\mathbf{r}))\hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \lambda) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (1.27)$$

Con las condiciones de borde para  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{r}'$  correspondientes al problema. Se asume que  $z$  es una variable compleja con  $\lambda \equiv \text{Re}\{z\}$  y  $\eta \equiv \text{Im}\{z\}$ , y que  $\hat{L}(\mathbf{r})$  es un operador diferencial lineal, hermítico e independiente del tiempo, con un conjunto completo y ortonormal de autofunciones  $\phi_n(\mathbf{r})$ , tal que:

$$\hat{L}(\mathbf{r})\phi_n(\mathbf{r}) = \lambda_n\phi_n(\mathbf{r}) \quad (1.28)$$

donde  $\phi_n(\mathbf{r})$  satisface las mismas condiciones de borde que  $\hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \lambda)$ .

Utilizando la notación de Dirac, que involucra bras y kets, es posible introducir un espacio vectorial abstracto, considerando:

$$\phi_n(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \phi_n \rangle \quad (1.29)$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\hat{L}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | \hat{L} | \mathbf{r}' \rangle \quad (1.30)$$

$$\hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \lambda) \equiv \langle \mathbf{r} | \hat{G}(z) | \mathbf{r}' \rangle \quad (1.31)$$

donde  $|r\rangle$  es un autovector del operador de posición y  $|\phi_n\rangle$  es un autovector del operador  $\hat{L}$  con autovalor  $\lambda_n$ . Ambos conjuntos de autovectores son conjuntos completos y ortonormales. Así, es posible reescribir las ecuaciones 1.27 y 1.28 como:

$$(z - \hat{L})\hat{G}(z) = 1 \quad (1.32)$$

$$\hat{L} |\phi_n\rangle = \lambda_n |\phi_n\rangle \quad (1.33)$$

Si todos los autovalores de  $z - \hat{L}$  son distintos de cero ( $z \neq \lambda_n$ ), se puede expresar la función de Green como [33]:

$$\hat{G}(z) = \frac{1}{(z - \hat{L})} \quad (1.34)$$

Para el caso en que  $\hat{L}$  corresponde al hamiltoniano independiente del tiempo, la función de Green retardada (causal) se puede escribir como [34]:

$$\hat{G}(E) = \frac{1}{(E - \hat{H} + i\eta)} \quad (1.35)$$

Donde la energía real está acompañada por una parte imaginaria infinitesimal positiva ( $\eta$ ). Utilizando la propiedad de completitud de los autoestados de  $\hat{H}$ , es posible

reescribir la ecuación 1.35 para obtener la representación de Lehmann [33, 34]:

$$\hat{G}(E) = \frac{\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{(E - \hat{H} + i\eta)} = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{(E - \lambda_n + i\eta)} \quad (1.36)$$

Se considera ahora un problema cuyo hamiltoniano puede separarse en dos partes:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I \quad (1.37)$$

Con  $\hat{H}_0$  como un hamiltoniano cuya función de Green, denotada por  $\hat{g}$  (por simplicidad, se omite la dependencia de la energía), es conocida, y  $\hat{H}_I$  como un hamiltoniano de interacción. Para encontrar la función de Green asociada al hamiltoniano general  $\hat{H}$ , denotada por  $\hat{G}$ , se utiliza la ecuación de recurrencia conocida como la ecuación de Dyson [34]:

$$\hat{G} = \hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{G} \quad (1.38)$$

Por otro lado, si  $|\phi\rangle$  (no confundir con los  $|\phi_n\rangle$  antes mencionados) es un autoestado del hamiltoniano  $\hat{H}_0$  y  $|\psi\rangle$  es un autoestado del hamiltoniano general  $\hat{H}$ :

$$(E - \hat{H}_0) |\phi\rangle = 0 \quad (1.39)$$

$$(E - \hat{H}) |\psi\rangle = 0 \quad (1.40)$$

Es posible relacionarlos a través de la ecuación de Lippman Schwinger [34]:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \hat{g}\hat{H}_I |\psi\rangle \quad (1.41)$$

O de forma equivalente:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \hat{G}\hat{H}_I |\phi\rangle \quad (1.42)$$

Proyectando estas ecuaciones sobre la posición, se obtienen expresiones que relacionan las funciones de onda espaciales para el sistema no perturbado y el sistema perturbado. Utilizando un ansatz de tipo onda plana, es posible calcular las amplitudes de transmisión y reflexión, aplicándolas de forma análoga a lo mostrado en la sección 1.3.

Por último, conociendo la función de Green del sistema, es posible calcular la densidad

de estados (DOS) como [33]:

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{\text{Tr}\hat{G}\} \quad (1.43)$$

Para un sistema de enlace fuerte unidimensional, en términos de los elementos de matriz:

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\left\{\sum_i G_{ii}\right\} \quad (1.44)$$

Donde  $i$  representa el  $i$ -ésimo sitio de la cadena.

A continuación, se presentan algunos elementos de matriz de las funciones de Green conocidas para cadenas de enlace fuerte, los cuales se utilizarán en el desarrollo de este trabajo.

Para un sitio aislado:

$$G_{11} = \langle 1|\hat{G}|1\rangle = \frac{1}{E - \epsilon_0 + i\eta} \quad (1.45)$$

Con  $\epsilon_0$  la energía del sitio.

Para una cadena finita de  $N$  sitios, con parámetro de red  $a = 1$ , acoplamiento entre sitios  $v$  y energías de sitio  $\epsilon_0$ , se utiliza el ansatz para la función de onda espacial en el sitio  $j$ :

$$\phi_n(j) \sim \sin(kj) \quad (1.46)$$

donde  $k$  es el número de onda. Con las condiciones de borde correspondientes, se obtiene, a partir de la ecuación 1.36, la expresión para los elementos de matriz:

$$G_{lj} = \langle l|\hat{G}|j\rangle = \frac{2}{N+1} \sum_{n=1}^N \frac{\sin\left(\frac{n\pi l}{N+1}\right) \sin\left(\frac{n\pi j}{N+1}\right)}{(E - \epsilon_n + i\eta)} \quad (1.47)$$

con  $\epsilon_n = \epsilon_0 + 2v \cos\left(\frac{n\pi}{N+1}\right)$ .

Para una cadena semi-infinita, la función de Green de superficie es:

$$G_{11} = \langle 1|\hat{G}|1\rangle = \frac{e^{ik}}{v} \quad (1.48)$$

Para una cadena infinita, los elementos de matriz de la función de Green se calculan como:

$$G_{lj} = \langle l|\hat{G}|j\rangle = \frac{-e^{ik|l-j|}}{2vi \sin(k)} \quad (1.49)$$

y se tiene la siguiente relación de dispersión:

$$E = \epsilon_0 + 2v \cos(k) \quad (1.50)$$

## 1.5 No hermiticidad y simetría PT

En mecánica cuántica, se suele trabajar bajo el supuesto de que el hamiltoniano es un operador hermítico, es decir,  $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ , donde  $\dagger$  representa el adjunto o transpuesto conjugado. Esta condición asegura que el sistema presente autovalores reales y evolución temporal unitaria, lo que preserva la probabilidad de encontrar la partícula en un cierto estado cuántico (la suma de las probabilidades es igual a 1) [17, 20].

Mientras que este tipo de hamiltoniano describe sistemas físicos cerrados, los sistemas que interactúan con su entorno a través de intercambios de energía (ganancia y/o disipación) se modelan con hamiltonianos no hermíticos, es decir,  $\hat{H} \neq \hat{H}^\dagger$ , los cuales pueden tener autoenergías complejas, no conservar la probabilidad total y presentar evolución temporal no unitaria con amplificación o disipación [17, 35].

A pesar de esto, en 1998, Bender y Boettcher [22] demostraron que una amplia gama de hamiltonianos no hermíticos puede tener autoenergías reales al presentar simetría PT (paridad-temporal). Un hamiltoniano no hermítico con simetría PT es aquel que permanece invariante bajo la acción compuesta de los operadores de paridad ( $\hat{P}$ ) e inversión temporal ( $\hat{T}$ ), o que, equivalentemente, conmuta con el operador  $\hat{P}\hat{T}$  [17].

$$[\hat{P}\hat{T}, \hat{H}] = \hat{P}\hat{T}\hat{H} - \hat{H}\hat{P}\hat{T} = 0 \quad (1.51)$$

Donde la acción de los operadores  $\hat{P}$  y  $\hat{T}$  se define como:

$$\hat{P} : i \rightarrow i, \quad \hat{x} \rightarrow -\hat{x}, \quad \hat{p} \rightarrow -\hat{p} \quad (1.52)$$

$$\hat{T} : i \rightarrow -i, \quad \hat{x} \rightarrow \hat{x}, \quad \hat{p} \rightarrow -\hat{p} \quad (1.53)$$

En este tipo de hamiltonianos, la ganancia y la disipación de energía están debidamente balanceadas [36], lo que permite que el espectro de autovalores sea completamente real. Sin embargo, los sistemas con hamiltonianos que presentan simetría PT no siempre tienen autovalores reales, ya que, bajo ciertas condiciones, los autovalores pueden presentarse como pares de complejos conjugados. Generalmente, cuando el parámetro que controla el grado de no-hermiticidad del sistema excede un

cierto valor crítico, ocurre un rompimiento espontáneo de la simetría  $PT$ . La fase  $PT$  simétrica es aquella que ocurre por debajo del punto crítico, en la que los autovalores son reales, mientras que la fase de rompimiento de la simetría  $PT$  ocurre por encima del punto crítico, donde los autovalores existen como pares de complejos conjugados [21, 35].

El valor crítico en el que ocurre la transición de fase se conoce como punto excepcional (EP) y corresponde a un punto en el que ciertos autovalores (tanto su parte real como imaginaria) se encuentran degenerados, y sus autovectores asociados son completamente paralelos, lo que provoca que el sistema se comporte como si perdiera dimensionalidad [17].

# Capítulo 2

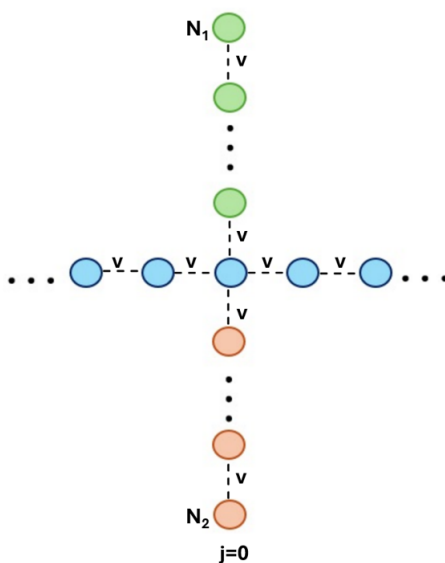
## Modelos y Desarrollo

En este trabajo, se estudian dos sistemas, cuyos modelos se encuentran detallados a continuación.

### 2.1 Una cruz

#### 2.1.1 Modelo

El primer sistema consiste en una estructura en forma de cruz, compuesta por cadenas de sitios acoplados a través de un modelo de enlace fuerte con interacción entre primeros vecinos, como se muestra en la Fig. 2.1.1.



**Figura 2.1.1:** Sistema en forma de cruz compuesta por cadenas de sitios acoplados a través de un modelo de enlace fuerte con interacción entre primeros vecinos.

La cadena horizontal es infinita, y los brazos superior e inferior, acoplados en el sitio 0 de la cadena horizontal, corresponden a cadenas finitas de  $N_1$  y  $N_2$  sitios, respectivamente. Los acoplamientos entre todos los sitios del sistema son iguales, con un valor de  $v = -1$ , y las energías de los sitios se encuentran resumidas en la tabla a continuación:

Color del sitio	Caso Hermítico	Caso No Hermítico
Azul	$\varepsilon = 0$	$\varepsilon = 0$
Verde	$\varepsilon_u = +\Delta$	$\varepsilon_u = +i\Delta$
Rojo	$\varepsilon_d = -\Delta$	$\varepsilon_d = -i\Delta$

**Tabla 2.1.1:** Energías de sitio para las cadenas que forman los sistemas estudiados.

Es decir, los sitios de la cadena infinita horizontal tienen energía de sitio  $\varepsilon = 0$ , los del brazo superior tienen energía de sitio  $\varepsilon_u = +\Delta$  para el caso hermítico y  $\varepsilon_u = +i\Delta$  para el caso no hermítico, y los del brazo inferior tienen energía de sitio  $\varepsilon_d = -\Delta$  para el caso hermítico y  $\varepsilon_d = -i\Delta$  para el caso no hermítico, donde las energías de los sitios corresponden a parámetros perturbativos en el sistema y toman valores pequeños en comparación con el valor de los acoplamientos.

## 2.1.2 Funciones de onda

Se divide el sistema de la Fig. 2.1.1 en cuatro secciones, y se consideran soluciones de tipo onda plana, de tal forma que las funciones de onda correspondientes son las siguientes:

$$u_j = \begin{cases} e^{ikj} + re^{-ikj} & , \text{ si } j < 0 \\ te^{ikj} & , \text{ si } j > 0 \end{cases} \quad (2.1)$$

$$u'_l = \begin{cases} Ae^{ikul} + Be^{-ikul} & , \text{ si } 0 < l \leq N_1 \\ Ce^{ikdl} + De^{-ikdl} & , \text{ si } -N_2 \leq l < 0 \end{cases} \quad (2.2)$$

Donde los sitios  $j < 0$  corresponden a los sitios a la izquierda del 0, los sitios  $j > 0$  a los sitios a la derecha del 0, los sitios  $-N_2 \leq l < 0$  a los sitios del brazo inferior y los sitios  $0 < l \leq N_1$  a los sitios del brazo superior. A partir de dichas funciones de onda, se escriben las ecuaciones de tipo enlace fuerte del problema:

$$\varepsilon u_j = v(u_{j+1} + u_{j-1}), \text{ si } j \neq 0 \quad (2.3)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_u)u'_l = v(u'_{l+1} + u'_{l-1}), \text{ si } 0 < l < N_1 \quad (2.4)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_d)u'_l = v(u'_{l+1} + u'_{l-1}), \text{ si } -N_2 < l < 0 \quad (2.5)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_u)u'_{N_1} = vu'_{(N_1-1)} \quad (2.6)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_d)u'_{-N_2} = vu'_{(-N_2+1)} \quad (2.7)$$

$$\varepsilon u_0 = v(u_1 + u_{-1} + u'_1 + u'_{-1}) \quad (2.8)$$

A partir de las relaciones de dispersión para las cadenas se obtienen los valores de los momentum  $k$  asociados:

$$\varepsilon = 2v \cos(k) \quad (2.9)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_{(u,d)}) = 2v \cos(k_{u,d}) \implies k_{u,d} = \arccos\left(\frac{2v \cos k - \varepsilon_{(u,d)}}{2v}\right) \quad (2.10)$$

Reemplazando las expresiones de las funciones de onda para  $j = 1$  y  $j = -1$  en la ecuación 2.3, y para  $l = 1$  y  $l = -1$  en las ecuaciones 2.4 y 2.5, respectivamente, se obtienen las siguientes relaciones:

$$u_0 = t = 1 + r = A + B = C + D \quad (2.11)$$

Además, reemplazando las expresiones de las funciones de onda correspondientes en las ecuaciones 2.6 a 2.8 se obtiene:

$$A = -Be^{-2ik_u(N_1+1)} \quad (2.12)$$

$$D = -Ce^{-2ik_d(N_2+1)} \quad (2.13)$$

$$t = \frac{e^{-ik} + re^{ik} + Ae^{ik_u} + Be^{-ik_u} + Ce^{-ik_d} + De^{ik_d}}{e^{-ik}} \quad (2.14)$$

Las ecuaciones 2.11 a 2.14 constituyen un sistema de ecuaciones que se resuelve para encontrar los valores de los coeficientes  $t$ ,  $r$ ,  $A$ ,  $B$ ,  $C$  y  $D$ . El coeficiente  $t$  es la amplitud de transmisión y el coeficiente  $r$  es la amplitud de reflexión. Una vez obtenidos dichos coeficientes, se calcula la transmisión total del sistema como el módulo al cuadrado de  $t$ :

$$T = |t|^2 \quad (2.15)$$

Por último, se obtiene la densidad local de estados (LDOS) de los brazos verticales como:

$$\begin{aligned} \text{brazo superior : } \quad |u'_l|^2 &= |A|^2 + |B|^2 + AB^*e^{2ik_u l'} + A^*Be^{-2ik_u l'} \\ \rho_u &= \sum_{l'=1}^{N_1} (|A|^2 + |B|^2 + AB^*e^{2ik_u l'} + A^*Be^{-2ik_u l'}) \end{aligned} \quad (2.16)$$

$$\begin{aligned} \text{brazo inferior : } \quad |u'_l|^2 &= |C|^2 + |D|^2 + CD^*e^{2ik_d l'} + C^*De^{-2ik_d l'} \\ \rho_d &= \sum_{l'=-N_2}^{-1} (|C|^2 + |D|^2 + CD^*e^{2ik_d l'} + C^*De^{-2ik_d l'}) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Y la suma para ambos brazos:

$$\rho = \rho_u + \rho_d \quad (2.18)$$

### 2.1.3 Funciones de Green

Se considera nuevamente el sistema descrito en la Fig. 2.1.1. Como se explicó en la Sección 2.1.1, el sistema consiste en cadenas de sitios acoplados a través de un modelo de enlace fuerte, el cual se puede considerar como el resultado de acoplar, a través de un hamiltoniano de interacción, dos cadenas finitas a una cadena infinita horizontal, de tal forma que el hamiltoniano total del sistema se escriba de la forma planteada en la ecuación 1.37. Una vez realizada dicha distinción, el problema se puede resolver a través del método de funciones de Green. Para esto, se consideran las funciones de Green conocidas de los sistemas desacoplados, correspondientes a la ecuación 1.49 para la cadena infinita y 1.47 para las cadenas finitas (para hacer la distinción entre los sitios de la cadena infinita y los de las cadenas finitas, los sitios de estas últimas se escriben con un ' en las ecuaciones, con signo positivo para los brazos superiores y con signo negativo para los brazos inferiores). Se calcula la transmisión del sistema utilizando la ecuación de Lippmann-Schwinger 1.42. Para el sistema estudiado se considera:

$$\langle j|\psi\rangle = \psi_j = \begin{cases} e^{ikj} + re^{-ikj} & , \text{ si } j < 0 \\ te^{ikj} & , \text{ si } j > 0 \end{cases} \quad (2.19)$$

$$\langle l|\psi\rangle = \psi'_l = \begin{cases} Ae^{ik_u l} + Be^{-ik_u l} & , \text{ si } 0 < l \leq N_1 \\ Ce^{ik_d l} + De^{-ik_d l} & , \text{ si } -N_2 \leq l < 0 \end{cases} \quad (2.20)$$

Para el sistema desacoplado, se considera incidencia desde la izquierda a través de la cadena infinita:

$$\langle j|\phi\rangle = \phi_j = e^{ikj} \quad (2.21)$$

$$\langle l|\phi\rangle = \phi'_l = 0 \quad (2.22)$$

Se considera el siguiente hamiltoniano de interacción:

$$\hat{H}_I = v(|-1'\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle -1'| + |1'\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1'|) \quad (2.23)$$

Se proyecta la ecuación de Lippman-Schwinger sobre el sitio  $j = 1$ :

$$\langle 1|\psi\rangle = \psi_1 = \phi_1 + v(G_{11'} + G_{1-1'})\phi_0 \quad (2.24)$$

Reemplazando las expresiones para  $\psi_1$ ,  $\phi_0$  y  $\phi_1$  se obtiene una nueva ecuación para  $t$ :

$$t = 1 + e^{-ik}v(G_{11'} + G_{1-1'}) \quad (2.25)$$

Donde  $G_{11'}$  y  $G_{1-1'}$  son elementos de matriz de la función de Green. Se calculan dichos elementos a partir de la ecuación de Dyson 1.38. Primero el elemento  $G_{11'}$ :

$$\begin{aligned} \langle 1|\hat{G}|1'\rangle &= \langle 1|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{G}|1'\rangle \\ G_{11'} &= g_{10}v(G_{1'1'} + G_{-1'1'}) \end{aligned} \quad (2.26)$$

Al ser una ecuación de recurrencia, se deben calcular los nuevos elementos de matriz que van apareciendo en las ecuaciones hasta que el sistema se cierre:

$$\begin{aligned} \langle 1'|\hat{G}|1'\rangle &= \langle 1'|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{G}|1'\rangle \\ G_{1'1'} &= g_{1'1'} + g_{1'1'}vG_{01'} \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \langle -1'|\hat{G}|1'\rangle &= \langle -1'|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{G}|1'\rangle \\ G_{-1'1'} &= g_{-1'-1'}vG_{01'} \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned} \langle 0|\hat{G}|1'\rangle &= \langle 0|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{G}|1'\rangle \\ G_{01'} &= g_{00}v(G_{1'1'} + G_{-1'1'}) \end{aligned} \quad (2.29)$$

Utilizando las ecuaciones 2.26 a 2.29 se obtiene la expresión para el elemento de matriz  $G_{11'}$  en términos de las funciones de Green de los componentes desacoplados

del sistema:

$$G_{11'} = \frac{e^{ik} g_{00} v g_{1'1'}}{1 - g_{00} v^2 (g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \quad (2.30)$$

De forma análoga, se utiliza la ecuación de Dyson para calcular  $G_{1-1'}$ :

$$\begin{aligned} \langle 1|\hat{G}| - 1' \rangle &= \langle 1|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{G}| - 1' \rangle \\ G_{1-1'} &= g_{10}v(G_{1'-1'} + G_{-1'-1'}) \end{aligned} \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} \langle 1'|\hat{G}| - 1' \rangle &= \langle 1'|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{G}| - 1' \rangle \\ G_{1'-1'} &= g_{1'1'}vG_{0-1'} \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\begin{aligned} \langle -1'|\hat{G}| - 1' \rangle &= \langle -1'|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{G}| - 1' \rangle \\ G_{-1'-1'} &= g_{-1'-1'} + g_{-1'-1'}vG_{0-1'} \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} \langle 0|\hat{G}| - 1' \rangle &= \langle 0|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{G}| - 1' \rangle \\ G_{0-1'} &= g_{00}v(G_{1'-1'} + G_{-1'-1'}) \end{aligned} \quad (2.34)$$

Utilizando las ecuaciones 2.31 a 2.34, se obtiene la expresión para el elemento de matriz  $G_{1-1'}$  en términos de las funciones de Green de los componentes desacoplados del sistema:

$$G_{1-1'} = \frac{e^{ik} g_{00} v g_{-1'-1'}}{1 - g_{00} v^2 (g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \quad (2.35)$$

Reemplazando las expresiones 2.30 y 2.35 en la ecuación 2.25, se reescribe la amplitud de transmisión:

$$t = 1 + \frac{g_{00} v^2 (g_{1'1'} + g_{-1'-1'})}{1 - g_{00} v^2 (g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \quad (2.36)$$

Finalmente, reordenando los términos:

$$t = \frac{1}{1 - g_{00} v^2 (g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \quad (2.37)$$

Esta ecuación puede reescribirse en términos de las autoenergías  $\Sigma^*$  (no confundir con los autovalores del hamiltoniano), las cuales proporcionan información sobre las interacciones de los componentes del sistema con los contactos. Para este sistema, la autoenergía proporciona información sobre la interacción de los brazos con el sitio 0 de la cadena infinita y tiene la siguiente forma:

$$\Sigma_0^* = v^2 g_{00} \quad (2.38)$$

Con esto la ecuación 2.37 puede reescribirse como:

$$t = \frac{1}{1 - \Sigma_0^*(g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \quad (2.39)$$

A partir de la expresión 2.39 para la amplitud de transmisión, se calcula la transmisión total del sistema:

$$T = |t|^2 \quad (2.40)$$

Para calcular la LDOS de los brazos verticales, se utiliza la ecuación 1.44. Se calculan los elementos de matriz  $G_{i'i'}$  utilizando la ecuación de Dyson. Para  $i'$  perteneciente al brazo superior:

$$\begin{aligned} \langle i' | \hat{G} | i' \rangle &= \langle i' | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | i' \rangle \\ G_{i'i'} &= g_{i'i'} + g_{i'1'} v G_{0i'} \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{G} | i' \rangle &= \langle 0 | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | i' \rangle \\ G_{0i'} &= g_{00} v (G_{1'i'} + G_{-1'i'}) \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$\begin{aligned} \langle 1' | \hat{G} | i' \rangle &= \langle 1' | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | i' \rangle \\ G_{1'i'} &= g_{1'i'} + g_{1'1'} v G_{0i'} \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$\begin{aligned} \langle -1' | \hat{G} | i' \rangle &= \langle -1' | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | i' \rangle \\ G_{-1'i'} &= g_{-1'-1'} v G_{0i'} \end{aligned} \quad (2.44)$$

Utilizando las ecuaciones 2.41 a 2.44, se obtiene la expresión para el elemento de matriz  $G_{i'i'}$  en términos de las funciones de Green de los componentes desacoplados del sistema:

$$G_{i'i'} = g_{i'i'} + \frac{g_{i'1'} g_{00} v^2 g_{1'i'}}{1 - g_{00} v^2 (g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \quad (2.45)$$

De forma análoga para  $i'$  perteneciente al brazo inferior:

$$\begin{aligned} \langle -i' | \hat{G} | -i' \rangle &= \langle -i' | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | -i' \rangle \\ G_{-i'-i'} &= g_{-i'-i'} + g_{-i'-1'} v G_{0-i'} \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{G} | -i' \rangle &= \langle 0 | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | -i' \rangle \\ G_{0-i'} &= g_{00} v (G_{1'-i'} + G_{-1'-i'}) \end{aligned} \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned} \langle 1' | \hat{G} | -i' \rangle &= \langle 1' | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | -i' \rangle \\ G_{1'-i'} &= g_{1'1'} v G_{0-i'} \end{aligned} \quad (2.48)$$

$$\begin{aligned} \langle -1' | \hat{G} | -i' \rangle &= \langle -1' | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | -i' \rangle \\ G_{-1'-i'} &= g_{-1'-i'} + g_{-1'-1'} v G_{0-i'} \end{aligned} \quad (2.49)$$

Utilizando las ecuaciones 2.46 a 2.49, se obtiene la expresión para el elemento de matriz  $G_{-i'-i'}$  en términos de las funciones de Green de los componentes desacoplados del sistema:

$$G_{-i'-i'} = g_{-i'-i'} + \frac{g_{-i'-1'} g_{00} v^2 g_{-1'-i'}}{1 - g_{00} v^2 (g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \quad (2.50)$$

Reemplazando las expresiones 2.45 y 2.50 en la ecuación 1.44, se obtiene una expresión para la LDOS de los brazos verticales:

$$\begin{aligned} \rho &= -\frac{1}{\pi} \left( \sum_{i=1}^{N_1} \text{Im}[G_{i'i'}] + \sum_{i=1}^{N_2} \text{Im}[G_{-i'-i'}] \right) \\ &= -\frac{1}{\pi} \left( \sum_{i=1}^{N_1} \text{Im} \left[ g_{i'i'} + \frac{g_{i'1'} g_{00} v^2 g_{1'i'}}{1 - g_{00} v^2 (g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \right] + \right. \\ &\quad \left. \sum_{i=1}^{N_2} \text{Im} \left[ g_{-i'-i'} + \frac{g_{-i'-1'} g_{00} v^2 g_{-1'-i'}}{1 - g_{00} v^2 (g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \right] \right) \end{aligned} \quad (2.51)$$

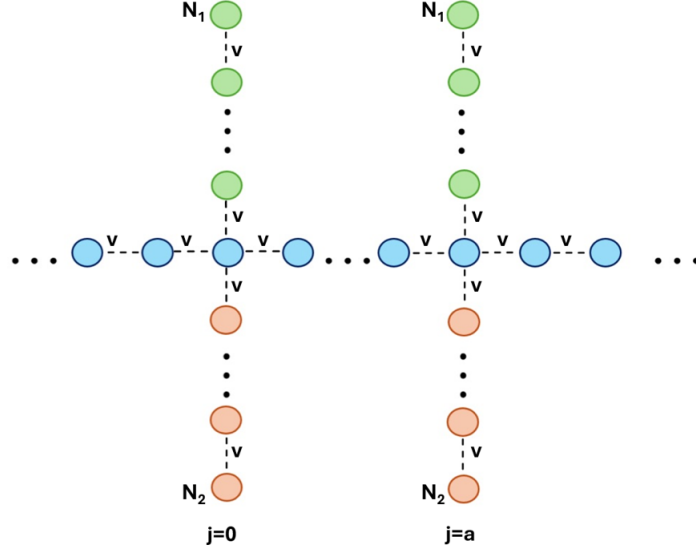
O, reemplazando la autoenergía definida en la ecuación 2.38:

$$\begin{aligned} \rho &= -\frac{1}{\pi} \left( \sum_{i=1}^{N_1} \text{Im} \left[ g_{i'i'} + \frac{g_{i'1'} \Sigma_0^* g_{1'i'}}{1 - \Sigma_0^* (g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \right] + \right. \\ &\quad \left. \sum_{i=1}^{N_2} \text{Im} \left[ g_{-i'-i'} + \frac{g_{-i'-1'} \Sigma_0^* g_{-1'-i'}}{1 - \Sigma_0^* (g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \right] \right) \end{aligned} \quad (2.52)$$

## 2.2 Dos cruces

### 2.2.1 Modelo

El segundo sistema consiste en una variación del primero. En lugar de una cruz, este sistema consta de dos estructuras idénticas, separadas por  $a - 1$  sitios de la cadena infinita, de tal forma que la primera estructura se encuentra en el sitio 0 de la cadena horizontal y la segunda en el sitio  $a$ . Nuevamente, las energías de sitio son las especificadas en la tabla 2.1.1, y los acoplamientos tienen todos el mismo valor ( $v = -1$ ).



**Figura 2.2.1:** Sistema compuesto por dos estructuras idénticas en forma de cruz, formadas por cadenas de sitios acoplados mediante un modelo de enlace fuerte con interacción entre los primeros vecinos.

## 2.2.2 Funciones de onda

De forma análoga a lo realizado para el sistema de una cruz, se divide el sistema de dos cruces de la Fig. 2.2.1 en siete secciones, y se consideran soluciones de tipo onda plana, de tal forma que las funciones de onda correspondientes son las siguientes:

$$u_j = \begin{cases} e^{ikj} + re^{-ikj} & , \text{ si } j < 0 \\ Fe^{ikj} + Ge^{-ikj} & , \text{ si } 1 \leq j < a \\ te^{ikj} & , \text{ si } j > a \end{cases} \quad (2.53)$$

$$u'_{l(1,2)} = \begin{cases} A_{(1,2)}e^{ik_{ul(1,2)}} + B_{(1,2)}e^{-ik_{ul(1,2)}} & , \text{ si } 0 < l_{(1,2)} \leq N_1 \\ C_{(1,2)}e^{ik_{dl(1,2)}} + D_{(1,2)}e^{-ik_{dl(1,2)}} & , \text{ si } -N_2 \leq l_{(1,2)} < 0 \end{cases} \quad (2.54)$$

Donde los sitios  $j < 0$  corresponden a los sitios a la izquierda del 0, los sitios  $j > a$  a los sitios a la derecha del  $a$ , y los sitios  $0 \leq j \leq a$  a los sitios entre ambas cruces. Los sitios  $-N_2 < l_{(1,2)} < 0$  son los sitios de los brazos inferiores, y los sitios  $0 < l_{(1,2)} < N_1$  corresponden a los sitios de los brazos superiores (los índices  $(1, 2)$  indican que el sitio puede pertenecer a la primera cruz o a la segunda, respectivamente). A partir de dichas funciones de onda, se escriben las ecuaciones de tipo enlace fuerte del problema:

$$\varepsilon u_j = v(u_{j+1} + u_{j-1}), \text{ si } j \neq \{0, a\} \quad (2.55)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_u)u'_{l_{(1,2)}} = v(u'_{l_{(1,2)}+1} + u'_{l_{(1,2)}-1}), \text{ si } 0 < l_{(1,2)} < N_1 \quad (2.56)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_d)u'_{l_{(1,2)}} = v(u'_{l_{(1,2)}+1} + u'_{l_{(1,2)}-1}), \text{ si } -N_2 < l_{(1,2)} < 0 \quad (2.57)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_u)u'_{N_1(1,2)} = vu'_{(N_1(1,2)-1)} \quad (2.58)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_d)u'_{-N_2(1,2)} = vu'_{(-N_2(1,2)+1)} \quad (2.59)$$

$$\varepsilon u_0 = v(u_1 + u_{-1} + u'_{1(1)} + u'_{-1(1)}) \quad (2.60)$$

$$\varepsilon u_a = v(u_{a+1} + u_{a-1} + u'_{1(2)} + u'_{-1(2)}) \quad (2.61)$$

Los valores de los momentum  $k$  asociados son los obtenidos en las ecuaciones 2.9 y 2.10.

Reemplazando las expresiones de las funciones de onda para  $j = 1$  y  $j = -1$  en la ecuación 2.55, y para  $l_{(1)} = 1$  y  $l_{(1)} = -1$  en las ecuaciones 2.56 y 2.57, respectivamente, se obtienen las siguientes relaciones:

$$u_0 = 1 + r = F + G = A_{(1)} + B_{(1)} = C_{(1)} + D_{(1)} \quad (2.62)$$

Reemplazando las expresiones de las funciones de onda para  $j = a + 1$  y  $j = a - 1$  en la ecuación 2.55, y para  $l_{(2)} = 1$  y  $l_{(2)} = -1$  en las ecuaciones 2.56 y 2.57, respectivamente, se obtienen las siguientes relaciones:

$$u_a = te^{ika} = Fe^{ika} + Ge^{-ika} = A_{(2)} + B_{(2)} = C_{(2)} + D_{(2)} \quad (2.63)$$

Además, al reemplazar las expresiones de las funciones de onda correspondientes en las ecuaciones 2.58 y 2.59, se obtiene:

$$A_{(1,2)} = -B_{(1,2)}e^{-2ik_u(N_1+1)} \quad (2.64)$$

$$D_{(1,2)} = -C_{(1,2)}e^{-2ik_d(N_2+1)} \quad (2.65)$$

Por último, al reemplazar las expresiones de las funciones de onda correspondientes en las ecuaciones 2.60 y 2.61, se obtienen dos ecuaciones, respectivamente:

$$Fe^{-ik} + Ge^{ik} = e^{-ik} + re^{ik} + A_{(1)}e^{ik_u} + B_{(1)}e^{-ik_u} + C_{(1)}e^{-ik_d} + D_{(1)}e^{ik_d} \quad (2.66)$$

$$t = \frac{Fe^{ik(a-1)} + Ge^{-ik(a-1)} + A_{(2)}e^{ik_u} + B_{(2)}e^{-ik_u} + C_{(2)}e^{-ik_d} + D_{(2)}e^{ik_d}}{e^{ik(a-1)}} \quad (2.67)$$

Las ecuaciones 2.62 a 2.67 constituyen un sistema de ecuaciones que se resuelve para encontrar los valores de los coeficientes  $t$ ,  $r$ ,  $A_{(1,2)}$ ,  $B_{(1,2)}$ ,  $C_{(1,2)}$ ,  $D_{(1,2)}$ ,  $F$  y  $G$ . Una vez obtenidos dichos coeficientes, se calcula la transmisión total del sistema como el módulo al cuadrado de  $t$ , según la ecuación 2.15.

Por último, se obtiene la densidad local de estados (LDOS) para tres regiones de interés: los brazos verticales de las dos intersecciones y la región entre las cruces (sitios 1 al  $(a - 1)$ ).

Para los brazos verticales de la primera cruz:

$$\begin{aligned} \text{brazo superior : } \quad |u'_{l(1)}|^2 &= |A_{(1)}|^2 + |B_{(1)}|^2 + A_{(1)}B_{(1)}^*e^{2ik_u l'_{(1)}} + A_{(1)}^*B_{(1)}e^{-2ik_u l'_{(1)}} \\ \rho_u &= \sum_{l'_{(1)}=1}^{N_1} (|A_{(1)}|^2 + |B_{(1)}|^2 + A_{(1)}B_{(1)}^*e^{2ik_u l'_{(1)}} + A_{(1)}^*B_{(1)}e^{-2ik_u l'_{(1)}}) \end{aligned} \quad (2.68)$$

$$\begin{aligned} \text{brazo inferior : } \quad |u'_{l(1)}|^2 &= |C_{(1)}|^2 + |D_{(1)}|^2 + C_{(1)}D_{(1)}^*e^{2ik_d l'_{(1)}} + C_{(1)}^*D_{(1)}e^{-2ik_d l'_{(1)}} \\ \rho_d &= \sum_{l'_{(1)}=-N_2}^{-1} (|C_{(1)}|^2 + |D_{(1)}|^2 + C_{(1)}D_{(1)}^*e^{2ik_d l'_{(1)}} + C_{(1)}^*D_{(1)}e^{-2ik_d l'_{(1)}}) \end{aligned} \quad (2.69)$$

Para los brazos verticales de la segunda cruz:

$$\begin{aligned} \text{brazo superior : } \quad |u'_{l(2)}|^2 &= |A_{(2)}|^2 + |B_{(2)}|^2 + A_{(2)}B_{(2)}^*e^{2ik_u l'_{(2)}} + A_{(2)}^*B_{(2)}e^{-2ik_u l'_{(2)}} \\ \rho_u &= \sum_{l'_{(2)}=1}^{N_1} (|A_{(2)}|^2 + |B_{(2)}|^2 + A_{(2)}B_{(2)}^*e^{2ik_u l'_{(2)}} + A_{(2)}^*B_{(2)}e^{-2ik_u l'_{(2)}}) \end{aligned} \quad (2.70)$$

$$\begin{aligned} \text{brazo inferior : } \quad |u'_{l(2)}|^2 &= |C_{(2)}|^2 + |D_{(2)}|^2 + C_{(2)}D_{(2)}^*e^{2ik_d l'_{(2)}} + C_{(2)}^*D_{(2)}e^{-2ik_d l'_{(2)}} \\ \rho_d &= \sum_{l'_{(2)}=-N_2}^{-1} (|C_{(2)}|^2 + |D_{(2)}|^2 + C_{(2)}D_{(2)}^*e^{2ik_d l'_{(2)}} + C_{(2)}^*D_{(2)}e^{-2ik_d l'_{(2)}}) \end{aligned} \quad (2.71)$$

Y la suma para cada una de las cruces:

$$\rho = \rho_u + \rho_d \quad (2.72)$$

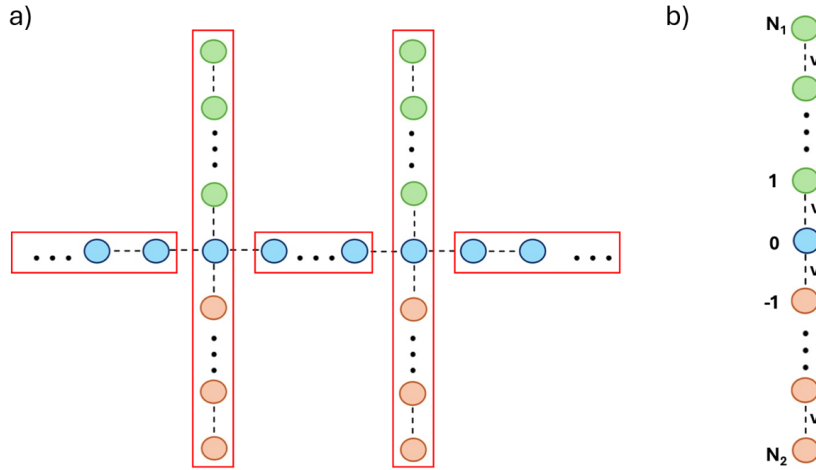
Para la región entre cruces:

$$|u_j|^2 = |F|^2 + |G|^2 + FG^*e^{2ikj} + F^*Ge^{-2ikj}$$

$$\rho_m = \sum_{j=1}^{a-1} (|F|^2 + |G|^2 + FG^*e^{2ikj} + F^*Ge^{-2ikj}) \quad (2.73)$$

### 2.2.3 Funciones de Green

Para este desarrollo, se separa el sistema de la Fig. 2.2.1 como se muestra en la Fig. 2.2.2 (a). Se tienen dos 'regiones verticales' idénticas (que en el tratamiento anterior corresponden a las cadenas finitas verticales acopladas a los denominados sitios 0 y  $a$ , respectivamente), mostradas en la Fig. 2.2.2 (b), cada una acoplada a una cadena semi-infinita y unidas entre sí por una cadena finita de  $a - 1$  sitios, todo esto a través del sitio 0 (o, equivalentemente, a través del sitio  $a$ ) de las 'regiones verticales'. Esta nueva forma de considerar el sistema desacoplado simplifica el desarrollo con funciones de Green para el caso de dos cruces y genera el mismo sistema final deseado.



**Figura 2.2.2:** a) Separación en secciones del sistema formado por dos estructuras en forma de cruz para el desarrollo con funciones de Green. b) Región vertical de las estructuras, estudiada por separado.

En primer lugar, se estudian las funciones de Green de las regiones verticales mostradas en la Fig. 2.2.2 (b). El sistema desacoplado consiste en dos cadenas finitas, cuyas funciones de Green corresponden a las mostradas en la ecuación 1.47, y un sitio aislado, cuya función de Green corresponde a la mostrada en la ecuación 1.45. Las energías de sitio de los componentes son las indicadas en la Tabla 2.1.1.

Por claridad de notación, los sitios de las cadenas finitas se escriben con un ' en las ecuaciones (con signo positivo para los brazos superiores y con signo negativo para los brazos inferiores), y las funciones de Green vestidas de las regiones verticales se denotan como  $\tilde{g}$ , de tal forma que la ecuación de Dyson se escribe:

$$\hat{\tilde{g}} = \hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{\tilde{g}} \quad (2.74)$$

Se considera el siguiente hamiltoniano de interacción:

$$\hat{H}_I = v (| - 1' \rangle \langle 0| + |0\rangle \langle -1'| + |1'\rangle \langle 0| + |0\rangle \langle 1'|) \quad (2.75)$$

Se calcula el elemento de matriz  $\tilde{g}_{00}$ :

$$\begin{aligned} \langle 0|\hat{\tilde{g}}|0\rangle &= \langle 0|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{\tilde{g}}|0\rangle \\ \tilde{g}_{00} &= g_{00} + g_{00}v(\tilde{g}_{1'0} + \tilde{g}_{-1'0}) \end{aligned} \quad (2.76)$$

$$\begin{aligned} \langle 1'|\hat{\tilde{g}}|0\rangle &= \langle 1'|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{\tilde{g}}|0\rangle \\ \tilde{g}_{1'0} &= g_{1'1'}v\tilde{g}_{00} \end{aligned} \quad (2.77)$$

$$\begin{aligned} \langle -1'|\hat{\tilde{g}}|0\rangle &= \langle -1'|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{\tilde{g}}|0\rangle \\ \tilde{g}_{-1'0} &= g_{-1'-1'}v\tilde{g}_{00} \end{aligned} \quad (2.78)$$

Utilizando las ecuaciones 2.76 a 2.78, se obtiene la expresión para el elemento de matriz  $\tilde{g}_{00}$  en términos de las funciones de Green de los componentes desacoplados del sistema:

$$\tilde{g}_{00} = \frac{g_{00}}{1 - g_{00}v^2(g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \quad (2.79)$$

Para  $i$  perteneciente al brazo superior, se calculan  $\tilde{g}_{i'i'}$ ,  $\tilde{g}_{i'0}$  y  $\tilde{g}_{0i'}$ :

$$\begin{aligned} \langle i'|\hat{\tilde{g}}|i'\rangle &= \langle i'|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{\tilde{g}}|i'\rangle \\ \tilde{g}_{i'i'} &= g_{i'i'} + g_{i'1'}v\tilde{g}_{0i'} \end{aligned} \quad (2.80)$$

$$\begin{aligned} \langle 0|\hat{\tilde{g}}|i'\rangle &= \langle 0|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{\tilde{g}}|i'\rangle \\ \tilde{g}_{0i'} &= g_{00}v(\tilde{g}_{1'i'} + \tilde{g}_{-1'i'}) \end{aligned} \quad (2.81)$$

$$\begin{aligned} \langle 1'|\hat{\tilde{g}}|i'\rangle &= \langle 1'|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{\tilde{g}}|i'\rangle \\ \tilde{g}_{1'i'} &= g_{1'i'} + g_{1'1'}v\tilde{g}_{0i'} \end{aligned} \quad (2.82)$$

$$\begin{aligned}\langle -1'|\hat{g}|i'\rangle &= \langle -1'|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{g}|i'\rangle \\ \tilde{g}_{-1'i'} &= g_{-1'-1'}v\tilde{g}_{0i'}\end{aligned}\tag{2.83}$$

$$\begin{aligned}\langle i'|\hat{g}|0\rangle &= \langle i'|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{g}|0\rangle \\ \tilde{g}_{i'0} &= g_{i'1'}v\tilde{g}_{00}\end{aligned}\tag{2.84}$$

Utilizando las ecuaciones 2.80 a 2.84, se obtienen las expresiones para los elementos de matriz  $\tilde{g}_{0i'}$ ,  $\tilde{g}_{i'i'}$  y  $\tilde{g}_{i'0}$ :

$$\tilde{g}_{0i'} = \frac{g_{00}vg_{1'i'}}{1 - g_{00}v^2(g_{1'1'} + g_{-1'-1'})}\tag{2.85}$$

$$\tilde{g}_{i'i'} = g_{i'i'} + \frac{g_{00}v^2g_{1'i'}^2}{1 - g_{00}v^2(g_{1'1'} + g_{-1'-1'})}\tag{2.86}$$

$$\tilde{g}_{i'0} = \frac{g_{i'1'}vg_{00}}{1 - g_{00}v^2(g_{1'1'} + g_{-1'-1'})}\tag{2.87}$$

Dado que  $g_{i'1'}$  y  $g_{1'i'}$  son idénticas, se tiene:

$$\tilde{g}_{i'0} = \tilde{g}_{0i'}\tag{2.88}$$

De forma análoga, para  $i$  perteneciente al brazo inferior, se calculan  $\tilde{g}_{-i'-i'}$ ,  $\tilde{g}_{-i'0}$  y  $\tilde{g}_{0-i'}$ :

$$\begin{aligned}\langle -i'|\hat{g}|-i'\rangle &= \langle -i'|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{g}|-i'\rangle \\ \tilde{g}_{-i'-i'} &= g_{-i'-i'} + g_{-i'-1'}v\tilde{g}_{0-i'}\end{aligned}\tag{2.89}$$

$$\begin{aligned}\langle 0|\hat{g}|-i'\rangle &= \langle 0|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{g}|-i'\rangle \\ \tilde{g}_{0-i'} &= g_{00}v(\tilde{g}_{-1'-i'} + \tilde{g}_{1'-i'})\end{aligned}\tag{2.90}$$

$$\begin{aligned}\langle -1'|\hat{g}|-i'\rangle &= \langle -1'|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{g}|-i'\rangle \\ \tilde{g}_{-1'-i'} &= g_{-1'-i'} + g_{-1'-1'}v\tilde{g}_{0-i'}\end{aligned}\tag{2.91}$$

$$\begin{aligned}\langle 1'|\hat{g}|-i'\rangle &= \langle 1'|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{g}|-i'\rangle \\ \tilde{g}_{1'-i'} &= g_{1'1'}v\tilde{g}_{0-i'}\end{aligned}\tag{2.92}$$

$$\begin{aligned}\langle -i'|\hat{g}|0\rangle &= \langle -i'|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{g}|0\rangle \\ \tilde{g}_{-i'0} &= g_{-i'-1'}v\tilde{g}_{00}\end{aligned}\tag{2.93}$$

Utilizando las ecuaciones 2.89 a 2.93, se obtienen las expresiones para los elementos

de matriz  $\tilde{g}_{0-i'}$ ,  $\tilde{g}_{-i'-i'}$  y  $\tilde{g}_{-i'0}$ :

$$\tilde{g}_{0-i'} = \frac{g_{00}v g_{-1'-i'}}{1 - g_{00}v^2(g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \quad (2.94)$$

$$\tilde{g}_{-i'-i'} = g_{-i'-i'} + \frac{g_{00}v^2 g_{-1'-i'}^2}{1 - g_{00}v^2(g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \quad (2.95)$$

$$\tilde{g}_{-i'0} = \frac{g_{-i'-1'}v g_{00}}{1 - g_{00}v^2(g_{1'1'} + g_{-1'-1'})} \quad (2.96)$$

Dado que  $g_{-i'-1'}$  y  $g_{-1'-i'}$  son idénticas, se tiene:

$$\tilde{g}_{-i'0} = \tilde{g}_{0-i'} \quad (2.97)$$

Ahora se estudia el sistema completo. Se calcula la transmisión del sistema utilizando la ecuación de Lippmann-Schwinger 1.42. Para el sistema estudiado, se considera:

$$\langle j|\psi\rangle = \psi_j = \begin{cases} e^{ikj} + r e^{-ikj} & , \text{ si } j < 0 \\ F e^{ikj} + G e^{-ikj} & , \text{ si } 1 \leq j < a \\ t e^{ikj} & , \text{ si } j > a \end{cases} \quad (2.98)$$

$$\langle l_{(1,2)}|\psi\rangle = \psi'_{l_{(1,2)}} = \begin{cases} A_{(1,2)} e^{ik_{ul(1,2)}} + B_{(1,2)} e^{-ik_{ul(1,2)}} & , \text{ si } 0 < l_{(1,2)} \leq N_1 \\ C_{(1,2)} e^{ik_{al(1,2)}} + D_{(1,2)} e^{-ik_{al(1,2)}} & , \text{ si } -N_2 \leq l_{(1,2)} < 0 \end{cases} \quad (2.99)$$

Para el sistema desacoplado, se considera incidencia desde la izquierda a través de la primera cadena semi-infinita:

$$\langle j|\phi\rangle = \phi_j = e^{ikj} - e^{-ikj} = 2i \sin(jk), \text{ si } j < 0 \quad (2.100)$$

$$\langle j|\phi\rangle = \phi_j = 0, \text{ si } j \geq 0 \quad (2.101)$$

$$\langle l_{(1,2)}|\phi\rangle = \phi'_l = 0 \quad (2.102)$$

Se considera el siguiente hamiltoniano de interacción:

$$\hat{H}_I = v(|-1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle -1| + |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |a-1\rangle\langle a| + |a\rangle\langle a-1| + |a+1\rangle\langle a| + |a\rangle\langle a+1|) \quad (2.103)$$

Se proyecta la ecuación de Lippmann-Schwinger sobre el sitio  $j = a + 1$ :

$$\langle (a+1)|\psi\rangle = \psi_{(a+1)} = \phi_{(a+1)} + v G_{(a+1)0} \phi_{-1} \quad (2.104)$$

Reemplazando las expresiones para  $\psi_{(a+1)}$ ,  $\phi_{(a+1)}$  y  $\phi_{-1}$ , se obtiene una nueva ecuación para  $t$ :

$$t = -2vi \sin(k) G_{(a+1)0} e^{-ik(a+1)} \quad (2.105)$$

Se calcula  $G_{(a+1)0}$  a partir de la ecuación de Dyson 1.38 (la notación para las funciones de Green de los componentes desacoplados es  $\hat{g}$  para las cadenas semi-infinitas y la cadena finita horizontal, y  $\hat{\tilde{g}}$  para las regiones verticales):

$$\begin{aligned} \langle (a+1) | \hat{G} | 0 \rangle &= \langle (a+1) | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | 0 \rangle \\ G_{(a+1)0} &= g_{(a+1)(a+1)} v G_{a0} \end{aligned} \quad (2.106)$$

$$\begin{aligned} \langle a | \hat{G} | 0 \rangle &= \langle a | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | 0 \rangle \\ G_{a0} &= \tilde{g}_{aa} v (G_{(a+1)0} + G_{(a-1)0}) \end{aligned} \quad (2.107)$$

$$\begin{aligned} \langle (a-1) | \hat{G} | 0 \rangle &= \langle (a-1) | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | 0 \rangle \\ G_{(a-1)0} &= g_{(a-1)(a-1)} v G_{a0} + g_{(a-1)1} v G_{00} \end{aligned} \quad (2.108)$$

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{G} | 0 \rangle &= \langle 0 | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | 0 \rangle \\ G_{00} &= \tilde{g}_{00} + \tilde{g}_{00} v (G_{10} + G_{-10}) \end{aligned} \quad (2.109)$$

$$\begin{aligned} \langle 1 | \hat{G} | 0 \rangle &= \langle 1 | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | 0 \rangle \\ G_{10} &= g_{11} v G_{00} + g_{1(a-1)} v G_{a0} \end{aligned} \quad (2.110)$$

$$\begin{aligned} \langle -1 | \hat{G} | 0 \rangle &= \langle -1 | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | 0 \rangle \\ G_{-10} &= g_{-1-1} v G_{00} \end{aligned} \quad (2.111)$$

Además, se consideran las siguientes igualdades:

$$\tilde{g}_{00} = \tilde{g}_{aa} \quad (2.112)$$

$$g_{(a-1)1} = g_{1(a-1)} \quad (2.113)$$

$$g_{-1-1} = g_{(a+1)(a+1)} \quad (2.114)$$

$$g_{11} = g_{(a-1)(a-1)} \quad (2.115)$$

Utilizando las ecuaciones 2.106 a 2.111 y las igualdades 2.112 a 2.115, se obtiene la expresión para el elemento de matriz  $G_{(a+1)0}$  en términos de las funciones de Green

de los componentes desacoplados del sistema:

$$G_{(a+1)0} = \frac{v^3 g_{-1-1} g_{(a-1)1} \tilde{g}_{00}^2}{1 - 2v^2 \tilde{g}_{00} (g_{11} + g_{-1-1}) + v^4 \tilde{g}_{00}^2 (g_{11} + g_{-1-1})^2 - v^4 \tilde{g}_{00}^2 g_{(a-1)1}^2} \quad (2.116)$$

Al reemplazar este resultado en la ecuación 2.105, se obtiene la amplitud de transmisión:

$$t = \frac{-2i \sin(k) e^{-ik(a+1)} v^4 g_{-1-1} g_{(a-1)1} \tilde{g}_{00}^2}{1 - 2v^2 \tilde{g}_{00} (g_{11} + g_{-1-1}) + v^4 \tilde{g}_{00}^2 (g_{11} + g_{-1-1})^2 - v^4 \tilde{g}_{00}^2 g_{(a-1)1}^2} \quad (2.117)$$

Para este sistema, la autoenergía proporciona información sobre la interacción de las secciones verticales con los contactos laterales (las cadenas semi-infinitas), y tiene la siguiente forma:

$$\Sigma_{-1}^* = v^2 g_{-1-1} = v^2 g_{(a+1)(a+1)} = \Sigma_{(a+1)}^* \quad (2.118)$$

Con esto, la ecuación 2.117 puede reescribirse como:

$$t = \frac{-2i \sin(k) e^{-ik(a+1)} v^2 \Sigma_{-1}^* g_{(a-1)1} \tilde{g}_{00}^2}{1 - 2\tilde{g}_{00} (v^2 g_{11} + \Sigma_{-1}^*) + \tilde{g}_{00}^2 (v^2 g_{11} + \Sigma_{-1}^*)^2 - v^4 \tilde{g}_{00}^2 g_{(a-1)1}^2} \quad (2.119)$$

A partir de la expresión para la amplitud de transmisión, se calcula la transmisión total del sistema con la fórmula 2.15.

Ahora se calcula la densidad local de estados (LDOS) 1.44 para tres regiones de interés: los brazos de las dos regiones verticales (sin considerar los sitios 0 y  $a$ ), y la región entre las cruces, correspondiente a la cadena finita que une ambas estructuras. En primer lugar, se calcula la LDOS de los brazos de las regiones verticales. Debido a la simetría del sistema y al hecho de que el formalismo de funciones de Green utilizado no considera la dirección de incidencia, el cálculo y los resultados de la LDOS son idénticos para ambas regiones verticales.

Se calculan los elementos de matriz  $G_{i'i'}$  utilizando la ecuación de Dyson 1.38. Para  $i'$  perteneciente al brazo superior de la región vertical de la izquierda (sitio 0):

$$\begin{aligned} \langle i' | \hat{G} | i' \rangle &= \langle i' | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | i' \rangle \\ G_{i'i'} &= \tilde{g}_{i'i'} + \tilde{g}_{i'0} v (G_{-1i'} + G_{1i'}) \end{aligned} \quad (2.120)$$

$$\begin{aligned} \langle -1 | \hat{G} | i' \rangle &= \langle -1 | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | i' \rangle \\ G_{-1i'} &= g_{-1-1} v G_{0i'} \end{aligned} \quad (2.121)$$

$$\begin{aligned}\langle 0|\hat{G}|i'\rangle &= \langle 0|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{G}|i'\rangle \\ G_{0i'} &= \tilde{g}_{0i'} + \tilde{g}_{00}v(G_{-1i'} + G_{1i'})\end{aligned}\quad (2.122)$$

$$\begin{aligned}\langle 1|\hat{G}|i'\rangle &= \langle 1|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{G}|i'\rangle \\ G_{1i'} &= g_{11}vG_{0i'} + g_{1(a-1)}vG_{ai'}\end{aligned}\quad (2.123)$$

$$\begin{aligned}\langle a|\hat{G}|i'\rangle &= \langle a|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{G}|i'\rangle \\ G_{ai'} &= \tilde{g}_{aa}v(G_{(a-1)i'} + G_{(a+1)i'})\end{aligned}\quad (2.124)$$

$$\begin{aligned}\langle (a-1)|\hat{G}|i'\rangle &= \langle (a-1)|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{G}|i'\rangle \\ G_{(a-1)i'} &= g_{(a-1)(a-1)}vG_{ai'} + g_{(a-1)1}vG_{0i'}\end{aligned}\quad (2.125)$$

$$\begin{aligned}\langle (a+1)|\hat{G}|i'\rangle &= \langle (a+1)|\hat{g} + \hat{g}\hat{H}_I\hat{G}|i'\rangle \\ G_{(a+1)i'} &= g_{(a+1)(a+1)}vG_{ai'}\end{aligned}\quad (2.126)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones formado por 2.120 a 2.126 y considerando las igualdades 2.112 a 2.115, se obtiene una expresión para  $G_{0i'}$ :

$$G_{0i'} = \frac{\tilde{g}_{0i'}}{1 - \tilde{g}_{00}v^2 \left( g_{-1-1} + g_{11} + \frac{g_{(a-1)1}^2 \tilde{g}_{00}v^2}{1 - \tilde{g}_{00}v^2(g_{11} + g_{-1-1})} \right)}\quad (2.127)$$

$$G_{0i'} = \frac{\tilde{g}_{0i'}}{1 - \tilde{g}_{00} \left( \Sigma_{-1}^* + v^2 g_{11} + \frac{g_{(a-1)1}^2 \tilde{g}_{00}v^4}{1 - \tilde{g}_{00}(v^2 g_{11} + \Sigma_{-1}^*)} \right)}\quad (2.128)$$

Y para  $G_{i'i'}$ :

$$G_{i'i'} = \tilde{g}_{i'i'} + \tilde{g}_{i'0}v^2 \left( g_{-1-1} + g_{11} + \frac{g_{(a-1)1}^2 \tilde{g}_{00}v^2}{1 - \tilde{g}_{00}v^2(g_{11} + g_{-1-1})} \right) G_{0i'}\quad (2.129)$$

$$G_{i'i'} = \tilde{g}_{i'i'} + \tilde{g}_{i'0} \left( \Sigma_{-1}^* + v^2 g_{11} + \frac{g_{(a-1)1}^2 \tilde{g}_{00}v^4}{1 - \tilde{g}_{00}(v^2 g_{11} + \Sigma_{-1}^*)} \right) G_{0i'}\quad (2.130)$$

Realizando el procedimiento de forma análoga para  $i'$  perteneciente al brazo inferior de la región vertical, se obtiene:

$$G_{0-i'} = \frac{\tilde{g}_{0-i'}}{1 - \tilde{g}_{00}v^2 \left( g_{-1-1} + g_{11} + \frac{g_{(a-1)1}^2 \tilde{g}_{00}v^2}{1 - \tilde{g}_{00}v^2(g_{11} + g_{-1-1})} \right)}\quad (2.131)$$

$$G_{0-i'} = \frac{g_{0-i'}}{1 - \tilde{g}_{00} \left( \Sigma_{-1}^* + v^2 g_{11} + \frac{g_{(a-1)1}^2 \tilde{g}_{00} v^4}{1 - \tilde{g}_{00} (v^2 g_{11} + \Sigma_{-1}^*)} \right)} \quad (2.132)$$

Y para  $G_{-i'-i'}$ :

$$G_{-i'-i'} = g_{-i'-i'} + g_{-i'0} v^2 \left( g_{-1-1} + g_{11} + \frac{g_{(a-1)1}^2 \tilde{g}_{00} v^2}{1 - \tilde{g}_{00} v^2 (g_{11} + g_{-1-1})} \right) G_{0-i'} \quad (2.133)$$

$$G_{-i'-i'} = g_{-i'-i'} + g_{-i'0} \left( \Sigma_{-1}^* + v^2 g_{11} + \frac{g_{(a-1)1}^2 \tilde{g}_{00} v^4}{1 - \tilde{g}_{00} (v^2 g_{11} + \Sigma_{-1}^*)} \right) G_{0-i'} \quad (2.134)$$

Reemplazando las expresiones 2.130 y 2.134 en la ecuación 1.44, se obtiene una expresión para la LDOS de los brazos de las regiones verticales:

$$\rho = -\frac{1}{\pi} \left( \sum_{i=1}^{N_1} \text{Im}[G_{i'i'}] + \sum_{i=1}^{N_2} \text{Im}[G_{-i'-i'}] \right) \quad (2.135)$$

Por último, se calcula la LDOS para la región entre las cruces. Para  $i$  perteneciente a dicha región:

$$\langle i | \hat{G} | i \rangle = \langle i | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | i \rangle \quad (2.136)$$

$$G_{ii} = g_{ii} + v(g_{i1} G_{0i} + g_{i(a-1)} G_{ai})$$

$$\langle 0 | \hat{G} | i \rangle = \langle 0 | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | i \rangle \quad (2.137)$$

$$G_{0i} = \tilde{g}_{00} v (G_{1i} + G_{-1i})$$

$$\langle a | \hat{G} | i \rangle = \langle a | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | i \rangle \quad (2.138)$$

$$G_{ai} = \tilde{g}_{aa} v (G_{(a-1)i} + G_{(a+1)i})$$

$$\langle 1 | \hat{G} | i \rangle = \langle 1 | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | i \rangle \quad (2.139)$$

$$G_{1i} = g_{1i} + v(g_{11} G_{0i} + g_{1(a-1)} G_{ai})$$

$$\langle (a-1) | \hat{G} | i \rangle = \langle (a-1) | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | i \rangle \quad (2.140)$$

$$G_{(a-1)i} = g_{(a-1)i} + v(g_{(a-1)(a-1)} G_{ai} + g_{1(a-1)} G_{0i})$$

$$\langle (a+1) | \hat{G} | i \rangle = \langle (a+1) | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | i \rangle \quad (2.141)$$

$$G_{(a+1)i} = g_{(a+1)(a+1)} v G_{ai}$$

$$\langle -1 | \hat{G} | i \rangle = \langle -1 | \hat{g} + \hat{g} \hat{H}_I \hat{G} | i \rangle \quad (2.142)$$

$$G_{-1i} = g_{-1-1} v G_{0i}$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones formado por 2.136 a 2.142 y considerando las igualdades 2.112 a 2.115, se obtiene una expresión para  $G_{0i}$ :

$$G_{0i} = \frac{\tilde{g}_{00}v \left( -\tilde{g}_{00}g_{1i}v^2(g_{11} + g_{-1-1}) + \tilde{g}_{00}g_{(a-1)1}g_{(a-1)i}v^2 + g_{1i} \right)}{\tilde{g}_{00}^2v^4(g_{11} - g_{(a-1)1} + g_{-1-1})(g_{11} + g_{(a-1)1} + g_{-1-1}) - 2\tilde{g}_{00}v^2(g_{11} + g_{-1-1}) + 1} \quad (2.143)$$

$$G_{0i} = \frac{\tilde{g}_{00}v \left( -\tilde{g}_{00}g_{1i}(v^2g_{11} + \Sigma_{-1}^*) + \tilde{g}_{00}g_{(a-1)1}g_{(a-1)i}v^2 + g_{1i} \right)}{\tilde{g}_{00}^2(v^2g_{11} - v^2g_{(a-1)1} + \Sigma_{-1}^*)(v^2g_{11} + v^2g_{(a-1)1} + \Sigma_{-1}^*) - 2\tilde{g}_{00}(v^2g_{11} + \Sigma_{-1}^*) + 1} \quad (2.144)$$

Y para  $G_{ii}$ :

$$G_{ii} = g_{ii} + \frac{g_{(a-1)i}^2v^2\tilde{g}_{00}}{1 - \tilde{g}_{00}v^2(g_{11} + g_{-1-1})} + \left( g_{1i}v + \frac{g_{(a-1)i}^2v^3\tilde{g}_{00}}{1 - \tilde{g}_{00}v^2(g_{11} + g_{-1-1})} \right) G_{0i} \quad (2.145)$$

$$G_{ii} = g_{ii} + \frac{g_{(a-1)i}^2v^2\tilde{g}_{00}}{1 - \tilde{g}_{00}(v^2g_{11} + \Sigma_{-1}^*)} + \left( g_{1i}v + \frac{g_{(a-1)i}^2v^3\tilde{g}_{00}}{1 - \tilde{g}_{00}(v^2g_{11} + \Sigma_{-1}^*)} \right) G_{0i} \quad (2.146)$$

Reemplazando la expresión 2.146 en la ecuación 1.44, se obtiene una expresión para la LDOS en la región intermedia:

$$\rho_m = -\frac{1}{\pi} \left( \sum_{i=1}^{a-1} \text{Im}[G_{ii}] \right) \quad (2.147)$$

# Capítulo 3

## Caso Hermítico: Resultados y Análisis

En esta sección se presentan y analizan los resultados obtenidos para los sistemas compuestos por una y dos cruces, respectivamente, utilizando valores reales para las energías de sitio (caso hermítico), tal como se detalla en la Tabla 2.1.1. El objetivo de este análisis es determinar las condiciones para la formación de BICs en el sistema.

### 3.1 Una cruz

Para el sistema compuesto por una estructura en forma de cruz, se obtuvieron dos expresiones para la transmisión, utilizando los métodos de funciones de onda y funciones de Green, respectivamente, y dos expresiones para la LDOS de los brazos verticales (suma de los brazos). En los gráficos presentados en esta sección, se utiliza el momentum normalizado por  $\pi$ .

Las ecuaciones obtenidas para la transmisión a través de los dos métodos utilizados entregan resultados gráficos idénticos. Para efectos de este trabajo y sin pérdida de generalidad, se analizan los resultados de la transmisión obtenidos a partir del método de funciones de Green (ecuaciones 2.39 y 2.40).

En primer lugar, se analiza el sistema con una configuración en la que  $N_1 = N_2$ . En las Fig. 3.1.1 (a) y 3.1.1 (b) se muestran los gráficos de transmisión para el sistema compuesto por una estructura en forma de cruz con tres sitios en cada uno de los brazos verticales ( $N_1 = N_2 = 3$ ), para dos valores de la perturbación en las energías de sitio ( $\pm\Delta$ ).

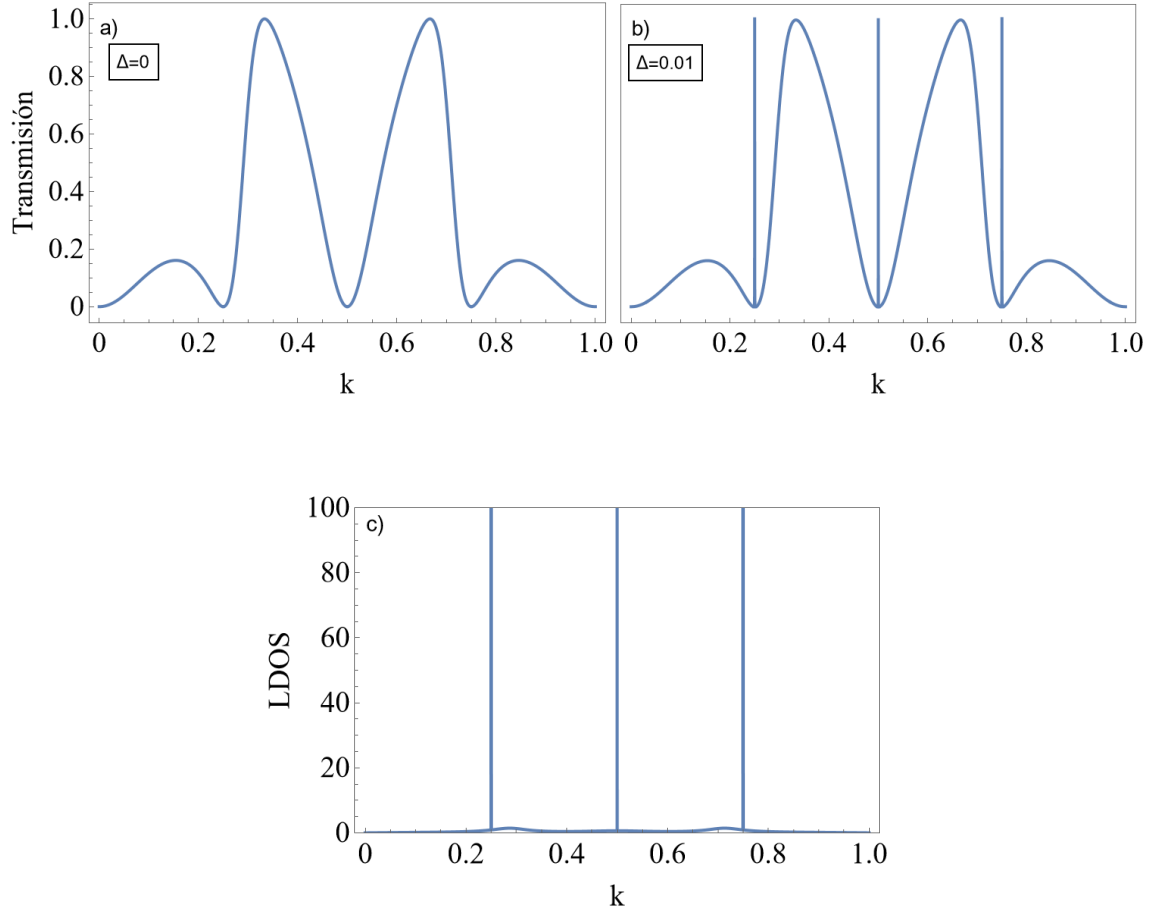
Para el caso con  $\Delta = 0$ , el sistema presenta simetría, ya que ambos brazos verticales

tienen igual energía de sitio e igual cantidad de sitios y, por lo tanto, son equivalentes. El perfil de transmisión es una curva suave que presenta resonancias (puntos de transmisión máxima) y antiresonancias (puntos de transmisión mínima igual a 0). Para el caso con  $\Delta = 0.01$ , la simetría entre los brazos se rompe levemente (las energías de sitio ya no son iguales) y aparecen resonancias agudas en los valores de  $k$  donde previamente había antiresonancias. Estas estructuras resonantes agudas son indicadores de que, en dichos valores de  $k$  y para el caso de simetría absoluta ( $\Delta = 0$ ), podría haber un BIC perfecto. Como se mencionó en la Sección 1.2, los BICs perfectos se encuentran desacoplados del continuo y, por lo tanto, no se aprecian en el perfil de transmisión. Sin embargo, al romper levemente la simetría que los protege, estos estados se acoplan al continuo, filtrando energía fuera del sistema, y aparecen en el perfil de transmisión como resonancias agudas llamadas cuasi-BICs. Para confirmar la naturaleza de estos estados, es necesario analizar en conjunto los resultados de la transmisión y la LDOS.

Las ecuaciones obtenidas a partir de los métodos de funciones de onda y funciones de Green para la LDOS de los brazos verticales generan gráficas cuyos perfiles tienen la misma forma, diferenciándose entre sí únicamente por una constante de normalización que varía la escala. Para este análisis, es necesario conocer la forma del perfil, sin importar la escala, con el objetivo de identificar los valores de  $k$  en los cuales se formarán los BICs. Sin pérdida de generalidad, se grafican los resultados obtenidos con el método de funciones de Green (ecuación 2.52).

En la Fig. 3.1.1 (c) se muestra el gráfico de la LDOS para los brazos verticales del sistema con tres sitios en cada uno de ellos. Se observan picos extremadamente agudos de altura casi infinita en los mismos valores de  $k$  donde aparecen las resonancias agudas en el perfil de transmisión. Estos picos agudos corresponden a funciones  $\delta$  de Dirac, las cuales indican la presencia de BICs.

Con la información proporcionada por los gráficos de transmisión y de LDOS, se confirma que los estados agudos identificados para el quiebre de simetría corresponden a cuasi-BICs, lo que permite identificar la presencia de BICs perfectos en el sistema con simetría absoluta.



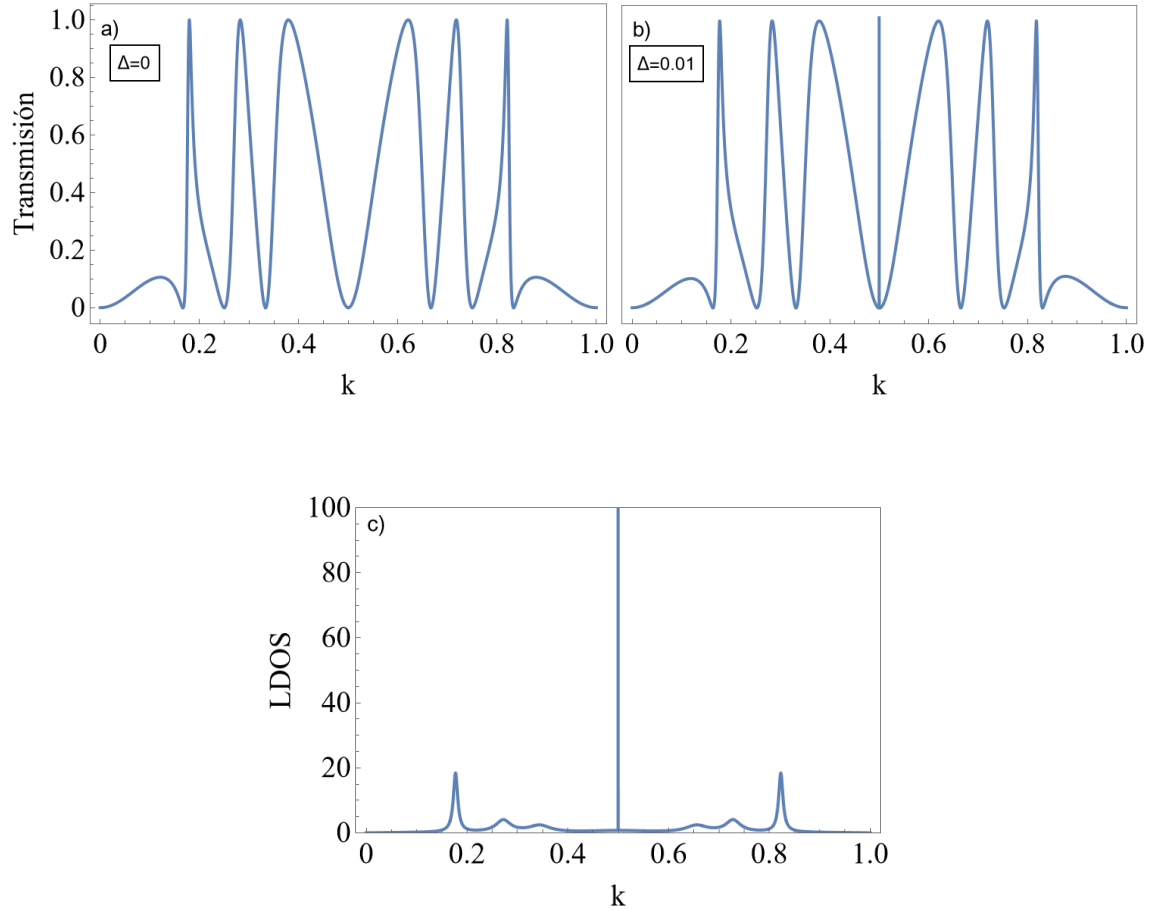
**Figura 3.1.1:** Gráficos para el sistema de una cruz con  $N_1 = N_2 = 3$ . a) Perfil de transmisión para el sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Perfil de transmisión para una perturbación hermítica  $\Delta = 0.01$ . c) Densidad local de estados del sistema no perturbado.

En segundo lugar, se analiza el sistema para una configuración en la que la cantidad de sitios en los brazos superior e inferior es distinta. En las Fig. 3.1.2 (a) y 3.1.2 (b) se muestran los gráficos de transmisión para el sistema con tres sitios en el brazo superior y cinco sitios en el brazo inferior ( $N_1 = 3$  y  $N_2 = 5$ ), para dos valores de la perturbación en las energías de sitio ( $\pm\Delta$ ). Para el caso con  $\Delta = 0$ , el sistema ya no presenta simetría absoluta, puesto que los brazos no tienen la misma cantidad de sitios. Para el caso con  $\Delta = 0.01$ , aparece una sola resonancia aguda en  $k = \frac{1}{2}$ , lo cual indica la posible presencia de un BIC perfecto para el caso  $\Delta = 0$ . Para confirmar la naturaleza del estado, es necesario analizar en conjunto los resultados para la transmisión y la LDOS.

En la Fig. 3.1.2 (c) se muestra el gráfico de la LDOS para los brazos verticales del

sistema. Se observa la aparición de un pico agudo para  $k = \frac{1}{2}$ , el mismo valor de  $k$  en el que aparece la resonancia aguda en la transmisión, el cual corresponde a una función  $\delta$  de Dirac.

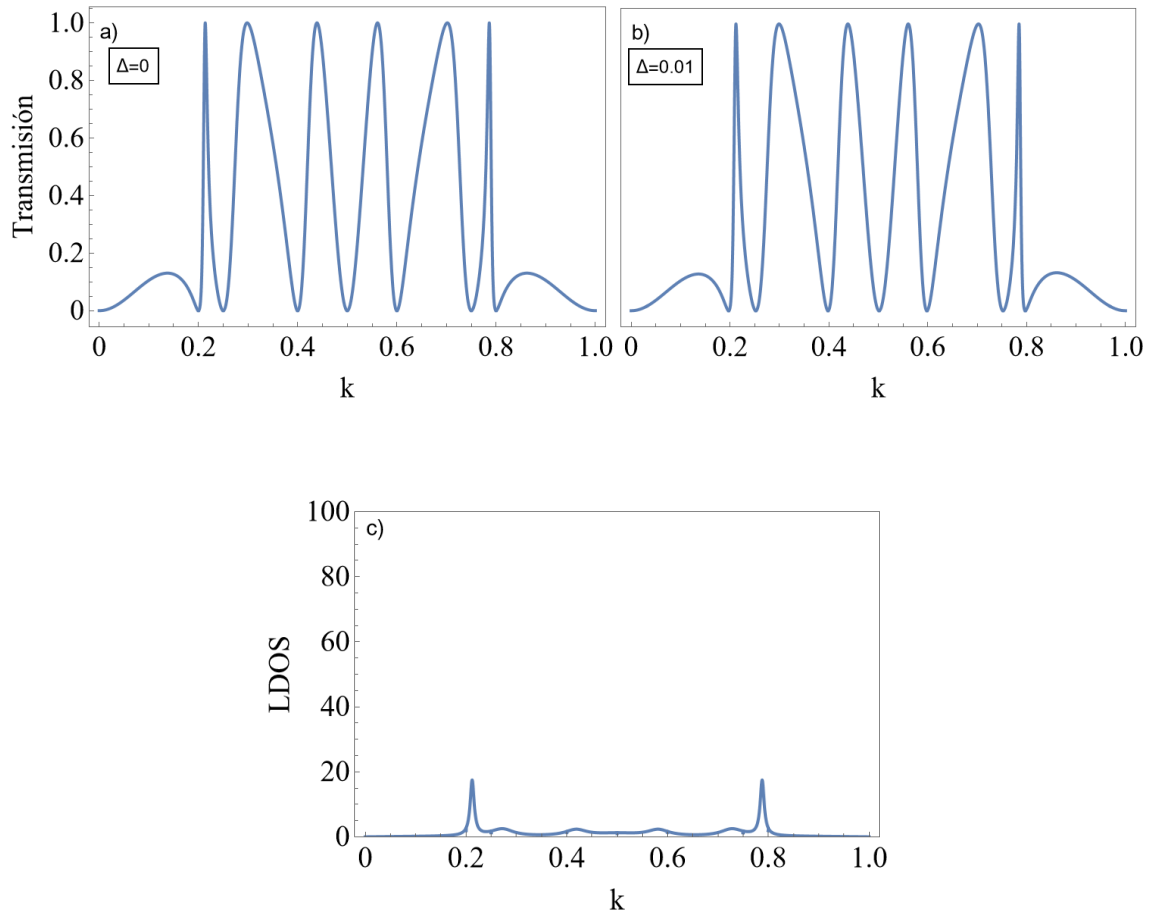
Con la información proporcionada por los gráficos de transmisión y de LDOS, se confirma que el estado agudo corresponde a cuasi-BICs, lo que permite identificar la presencia de un BIC perfecto para el sistema no perturbado con  $\Delta = 0$  en  $k = \frac{1}{2}$ . Esto indica que, a pesar de no haber simetría entre los brazos del sistema, debe existir una condición de commensurabilidad entre los brazos que permita predecir los valores de  $k$  en los que se formarán BICs.



**Figura 3.1.2:** Gráficos para el sistema de una cruz con  $N_1 = 3$  y  $N_2 = 5$ . a) Perfil de transmisión para el sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Perfil de transmisión para una perturbación hermítica  $\Delta = 0.01$ . c) Densidad local de estados del sistema no perturbado.

Por último, se analiza el sistema para otra configuración en la que la cantidad de

sitios en los brazos superior e inferior es distinta. En las Fig. 3.1.3 (a) y 3.1.3 (b) se muestran los gráficos de transmisión para el sistema con tres sitios en el brazo superior y cuatro sitios en el brazo inferior ( $N_1 = 3$  y  $N_2 = 4$ ), para dos valores de la perturbación en las energías de sitio ( $\pm\Delta$ ). Para el caso con  $\Delta = 0$ , el sistema nuevamente no presenta simetría, puesto que los brazos no cuentan con la misma cantidad de sitios. Para esta configuración, en el caso con  $\Delta = 0.01$ , no aparecen resonancias agudas que indiquen la presencia de cuasi-BICs. Además, en la Fig. 3.1.3 (c) se muestra el gráfico de la LDOS para los brazos verticales del sistema. En este caso, no se observan picos agudos correspondientes a  $\delta$  de Dirac. La información proporcionada por los gráficos de transmisión y LDOS indica que, para esta configuración, no existen BICs en el sistema para ningún valor de  $k$ .



**Figura 3.1.3:** Gráficos para el sistema de una cruz con  $N_1 = 3$  y  $N_2 = 4$ . a) Perfil de transmisión para el sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Perfil de transmisión para una perturbación hermítica  $\Delta = 0.01$ . c) Densidad local de estados del sistema no perturbado.

A partir de los resultados obtenidos, se estudia la condición de commensurabilidad que deben cumplir los brazos superior e inferior del sistema para la formación de BICs. Se considera una cadena finita de  $N$  sitios en el modelo de enlace fuerte y el siguiente ansatz:

$$\Psi(j) = A \sin(kj) \quad (3.1)$$

Se aplican las condiciones de borde:

$$\Psi(j = 0) = \Psi(j = N + 1) = 0 \quad (3.2)$$

Se obtiene el espectro discreto de  $k$ :

$$k = \frac{n\pi}{N + 1} \quad , \quad n = 1, 2, \dots, (N) \quad (3.3)$$

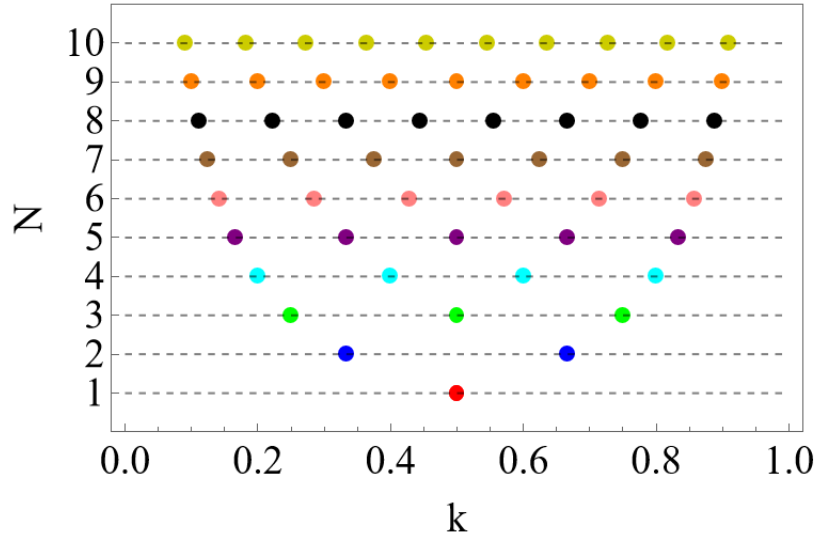
De acuerdo con el análisis, la condición que debe cumplirse para la formación de un BIC es que la cuantización de ambos brazos verticales, considerados como cadenas finitas de  $N_1$  y  $N_2$  sitios, coincida en un valor de  $k$ . Esto implica que, al conectar dichas cadenas a la cadena infinita, los estados con la misma cuantización se hibridizan, lo que lleva al sistema completo a presentar estados degenerados en ese valor de  $k$ . De esta manera, se crea un estado simétrico que se acopla al continuo y un estado antisimétrico que no se acopla al continuo, lo que da lugar a un BIC. Matemáticamente, la condición para la formación de los BICs se expresa como:

$$k = \frac{i\pi}{N_1 + 1} = \frac{j\pi}{N_2 + 1} \quad , \quad i \in \{1, \dots, N_1\} \quad , \quad j \in \{1, \dots, N_2\} \quad (3.4)$$

En este estudio se trabaja con el momentum normalizado en  $\pi$ , por lo que la condición se reescribe como:

$$k = \frac{i}{N_1 + 1} = \frac{j}{N_2 + 1} \quad , \quad i \in \{1, \dots, N_1\} \quad , \quad j \in \{1, \dots, N_2\} \quad (3.5)$$

La Fig. 3.1.4 muestra los valores de  $k$  (normalizado por  $\pi$ ) cuantizados para cadenas finitas con  $N$  sitios.



**Figura 3.1.4:** Espectro de  $k$  (normalizado en  $\pi$ ) para cadenas finitas con  $N$  sitios.

## 3.2 Dos cruces

Para el sistema compuesto por dos estructuras en forma de cruz, se obtuvieron dos expresiones para la transmisión, utilizando los métodos de funciones de onda y funciones de Green, respectivamente, así como dos expresiones para cada una de las LDOS calculadas (suma de los brazos verticales de la primera cruz, suma de los brazos verticales de la segunda cruz y la región entre las cruces con  $a - 1$  sitios). En los gráficos presentados en esta sección, se utiliza el momento normalizado por  $\pi$ .

Las ecuaciones obtenidas para la transmisión a través de los dos métodos utilizados entregan resultados gráficos idénticos. Para efectos de este trabajo y sin pérdida de generalidad, se analizan los resultados para la transmisión obtenidos a partir del método de funciones de Green (ecuaciones 2.119 y 2.40).

Las ecuaciones obtenidas a partir de los métodos de funciones de onda y funciones de Green para la LDOS de la región entre cruces generan gráficas cuyos perfiles tienen la misma forma, diferenciándose entre sí por una constante de normalización que varía la escala de las mismas. Por otro lado, las ecuaciones obtenidas utilizando ambos métodos para las LDOS de los brazos verticales generan gráficas diferentes, debido a que el método de funciones de onda considera la dirección de incidencia, lo que genera gráficas distintas para la primera y la segunda estructura en forma de cruz, mientras que el método de funciones de Green no la considera, generando

gráficos idénticos para ambas estructuras. A pesar de generar gráficas diferentes, ambos métodos entregan la misma información sobre la posición de los BICs, por lo que, para este estudio, se pueden utilizar ambos métodos. Para este análisis, y sin pérdida de generalidad, se grafican los resultados obtenidos con el método de funciones de Green (ecuaciones 2.135 y 2.147).

Si se considera la condición para la formación de BICs en los brazos verticales para el sistema formado por una cruz, mostrada en la ecuación 3.5, y se generaliza para incluir la cadena que une ambas estructuras en el sistema de dos cruces, se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$k = \frac{i}{N_1 + 1} = \frac{j}{N_2 + 1} \quad , \quad i \in \{1, \dots, N_1\} \quad , \quad j \in \{1, \dots, N_2\} \quad (3.6)$$

$$k = \frac{i}{N_1 + 1} = \frac{l}{a} \quad , \quad i \in \{1, \dots, N_1\} \quad , \quad l \in \{1, \dots, a - 1\} \quad (3.7)$$

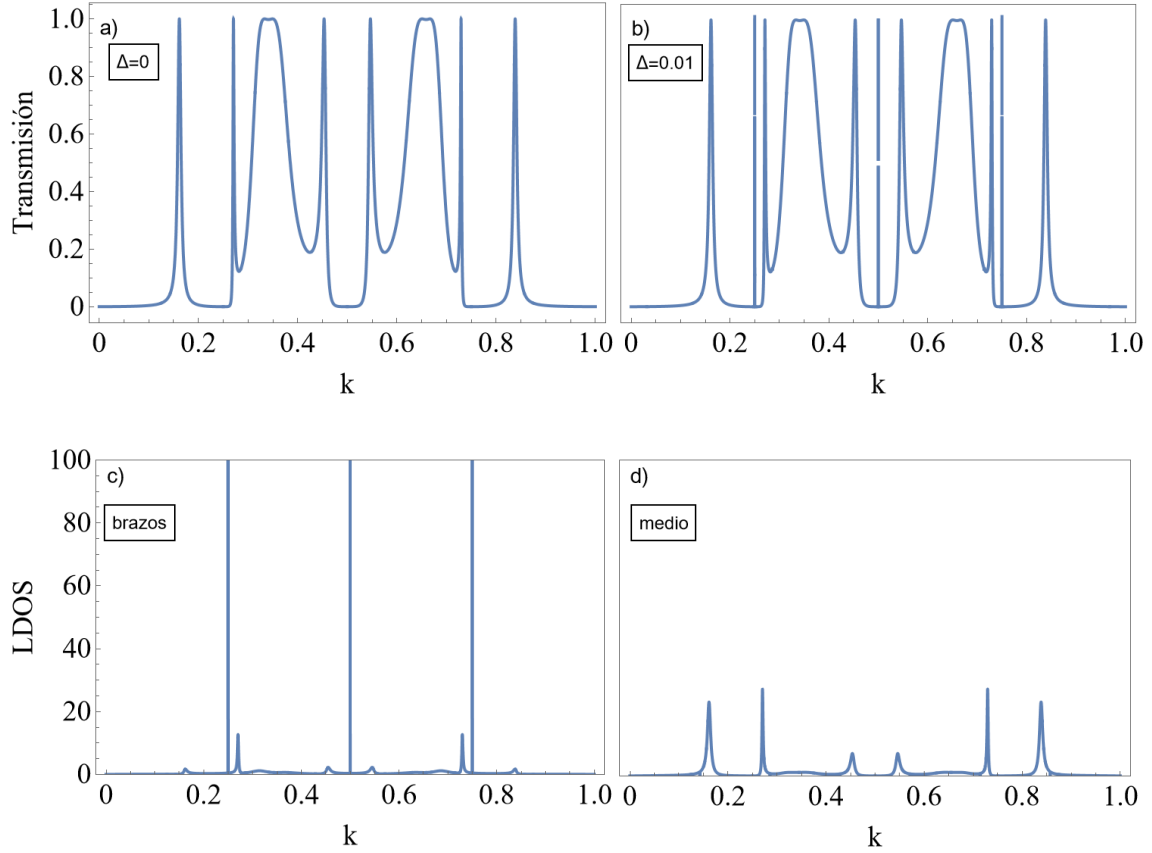
$$k = \frac{j}{N_2 + 1} = \frac{l}{a} \quad , \quad j \in \{1, \dots, N_2\} \quad , \quad l \in \{1, \dots, a - 1\} \quad (3.8)$$

La ecuación 3.6 corresponde a la condición ya encontrada para el sistema de una sola cruz, la cual debe mantenerse para el sistema de dos cruces, mientras que las ecuaciones 3.7 y 3.8 consideran la relación que debe existir entre la cuantización de los brazos verticales y la sección media que une ambas cruces. A continuación, se consideran distintas configuraciones para el sistema de dos cruces para probar dichas condiciones.

En primer lugar, se analiza el sistema para la configuración  $N_1 = N_2$ ,  $a - 1 \neq N_1$  y  $a - 1 \neq N_2$ . En las Fig. 3.2.1 (a) y 3.2.1 (b) se muestran los gráficos de transmisión para dos valores de la perturbación en las energías de sitio ( $\pm\Delta$ ), para el sistema compuesto por dos estructuras en forma de cruz con tres sitios en cada uno de los brazos verticales ( $N_1 = N_2 = 3$ ) y con 6 sitios entre dichas estructuras ( $a - 1 = 6$  o  $a = 7$ ). Esta configuración cumple con la condición mostrada en la ecuación 3.6 (para  $k = \{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}\}$ ), pero no con las mostradas en las ecuaciones 3.7 y 3.8 (para ningún valor de  $k$ ). Para el caso con  $\Delta = 0$ , el sistema presenta simetría en los brazos verticales, ya que ambos tienen igual energía de sitio e igual cantidad de sitios y, por lo tanto, son equivalentes, mientras que la región central no posee la misma cantidad de sitios que los brazos. Para el caso con  $\Delta = 0.01$ , la simetría entre los brazos verticales se rompe levemente y aparecen resonancias agudas en el perfil de

transmisión en los valores de  $k$  que cumplen la condición 3.6, las cuales podrían ser cuasi-BICs e indicar la presencia de BICs perfectos para el caso  $\Delta = 0$ .

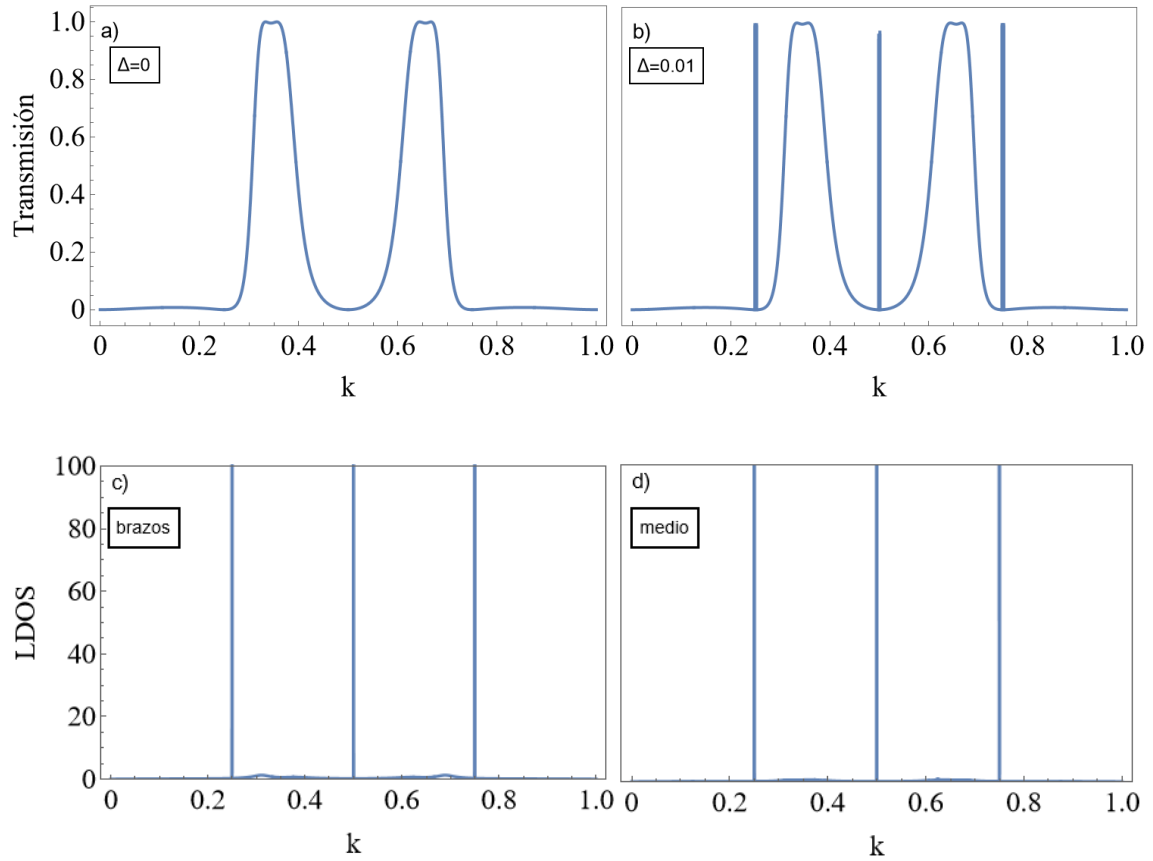
En las Fig. 3.2.1 (c) y 3.2.1 (d) se muestran los gráficos de LDOS para los brazos verticales del sistema y para la región entre cruces. En el gráfico de la LDOS de las regiones verticales se observa la aparición de picos agudos en los mismos valores de  $k$  donde aparecen las resonancias agudas en el perfil de transmisión, los cuales corresponden a funciones  $\delta$  de Dirac. Por otro lado, en el gráfico de la LDOS de la región entre cruces no existen funciones  $\delta$  de Dirac, lo que indica que no hay BICs presentes en dicha región. Con la información proporcionada por los gráficos de transmisión y de LDOS, se confirma que los estados agudos reconocidos para el sistema perturbado corresponden a cuasi-BICs, lo que permite identificar la presencia de BICs perfectos para el sistema sin perturbar. Además, se concluye que dichos estados se encuentran en los brazos verticales del sistema y no en la región entre cruces.



**Figura 3.2.1:** Gráficos para el sistema de dos cruces con  $N_1 = N_2 = 3$  y  $a - 1 = 6$ . a) Perfil de transmisión para el sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Perfil de transmisión para una perturbación hermítica  $\Delta = 0.01$ . c) Densidad local de estados para los brazos verticales del sistema no perturbado. d) Densidad local de estados para la región media del sistema no perturbado.

En segundo lugar, se analiza el sistema para la configuración  $N_1 = N_2 = a - 1$ . En las Fig. 3.2.2 (a) y 3.2.2 (b) se muestran los gráficos de transmisión, para dos valores de la perturbación en las energías de sitio ( $\pm\Delta$ ), para el sistema compuesto por dos estructuras en forma de cruz con tres sitios en cada uno de los brazos verticales y en la región entre cruces ( $N_1 = N_2 = a - 1 = 3$ ). Esta configuración cumple con las condiciones mostradas en las ecuaciones 3.6, 3.7 y 3.8 (para  $k = \{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}\}$ ). Para el caso con  $\Delta = 0$ , los brazos verticales del sistema son simétricos y, a su vez, tienen la misma cantidad de sitios y energía de sitio que la sección que conecta ambas estructuras en forma de cruz. Para el caso con  $\Delta = 0.01$ , el sistema está levemente perturbado y aparecen resonancias agudas en el perfil de transmisión en los valores de  $k$  que cumplen alguna de las condiciones 3.6-3.8, los cuales podrían ser cuasi-BICs e indicar la presencia de BICs perfectos para el caso  $\Delta = 0$ .

En las Fig. 3.2.2 (c) y 3.2.2 (d) se muestran los gráficos de LDOS para los brazos verticales del sistema y para la región entre cruces. En ambos gráficos se observa la aparición de picos agudos en los mismos valores de  $k$  donde aparecen las resonancias agudas en el perfil de transmisión. Para esta configuración, los picos presentes en ambos perfiles de LDOS corresponden a funciones  $\delta$  de Dirac, lo que confirma la naturaleza de los BICs, además de indicar que dichos estados residen no solo en los brazos verticales del sistema, sino también en la región entre cruces.

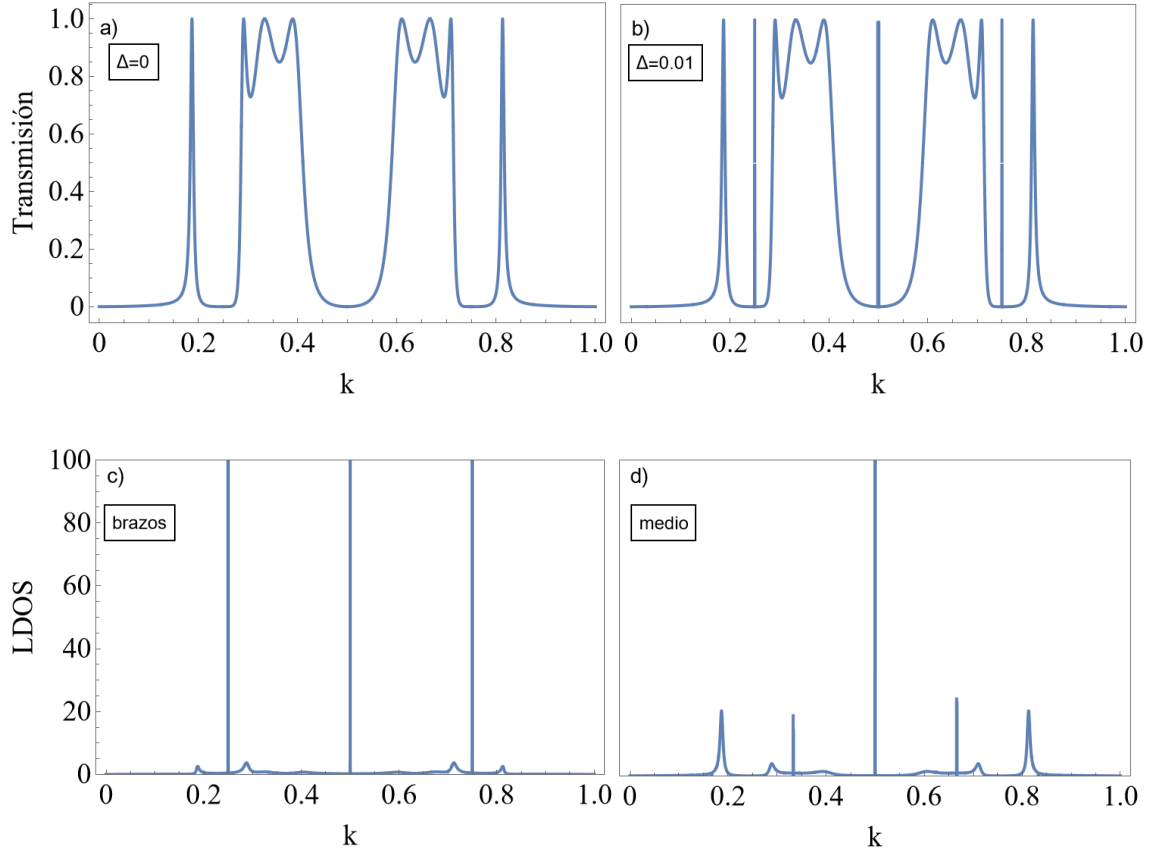


**Figura 3.2.2:** Gráficos para el sistema de dos cruces con  $N_1 = N_2 = a - 1 = 3$ . a) Perfil de transmisión para el sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Perfil de transmisión para una perturbación hermítica  $\Delta = 0.01$ . c) Densidad local de estados para los brazos verticales del sistema no perturbado. d) Densidad local de estados para la región media del sistema no perturbado.

En tercer lugar, se analiza el sistema para otra configuración tal que  $N_1 = N_2$ ,  $a - 1 \neq N_1$  y  $a - 1 \neq N_2$ . En las Fig. 3.2.3 (a) y 3.2.3 (b) se muestran los gráficos de transmisión, para dos valores de la perturbación en las energías de sitio ( $\pm\Delta$ ), para

el sistema compuesto por dos estructuras en forma de cruz con tres sitios en cada uno de los brazos verticales y con cinco sitios en la región entre cruces ( $N_1 = N_2 = 3$  y  $a - 1 = 5$ ). Esta configuración cumple con la condición mostrada en la ecuación 3.6 (para  $k = \{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}\}$ ) y con las mostradas en las ecuaciones 3.7 y 3.8 (solo para  $k = \frac{1}{2}$ ). Para el caso con  $\Delta = 0.01$ , el sistema es levemente perturbado y aparecen resonancias agudas en el perfil de transmisión en los valores de  $k$  que cumplen alguna de las condiciones 3.6-3.7.

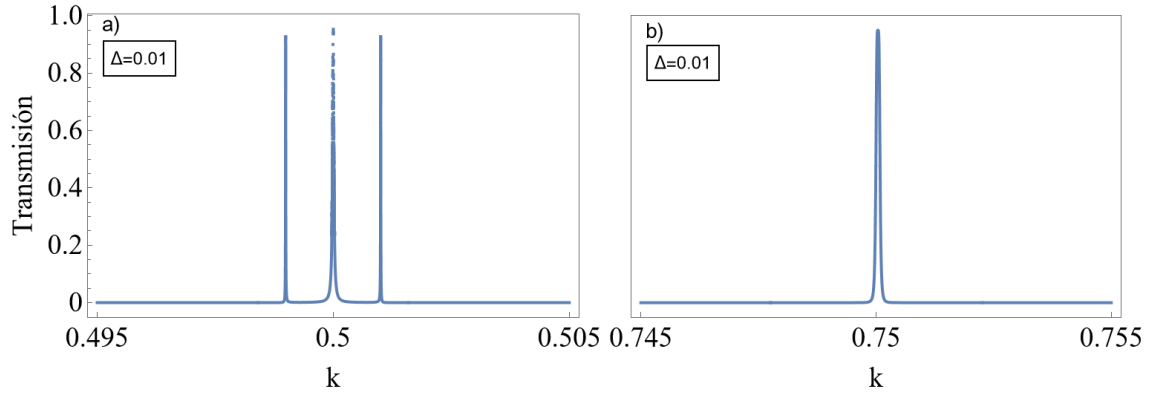
En las Fig. 3.2.3 (c) y 3.2.3 (d) se muestran los gráficos de LDOS para los brazos verticales del sistema y para la región entre cruces. En el gráfico de la LDOS de las regiones verticales se observa la aparición de picos agudos en los mismos valores de  $k$  donde aparecen las resonancias agudas en el perfil de transmisión, los cuales corresponden a funciones  $\delta$  de Dirac. Por otro lado, para el gráfico de la LDOS de la región entre cruces se aprecia la aparición de un solo pico agudo en  $k = \frac{1}{2}$  correspondiente a una función  $\delta$  de Dirac, mientras que en  $k = \frac{1}{4}$  y  $k = \frac{3}{4}$  no se muestran estas funciones, indicando que no hay BICs en esa región para dichos valores de  $k$ .



**Figura 3.2.3:** Gráficos para el sistema de dos cruces con  $N_1 = N_2 = 3$  y  $a - 1 = 5$ . a) Perfil de transmisión para el sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Perfil de transmisión para una perturbación hermítica  $\Delta = 0.01$ . c) Densidad local de estados para los brazos verticales del sistema no perturbado. d) Densidad local de estados para la región media del sistema no perturbado.

Para esta configuración del sistema se forman BICs debido a dos cumplimientos diferentes de las condiciones 3.6-3.8: para  $k = \frac{1}{4}$  y  $k = \frac{3}{4}$  se cumple solo la condición de formación para los brazos (ecuación 3.6), mientras que para  $k = \frac{1}{2}$  se cumplen las condiciones para ambos brazos verticales (ecuación 3.6) y para la región central (ecuaciones 3.7 y 3.8). En la Fig. 3.2.4 (a) se muestra un acercamiento al perfil de transmisión en torno a  $k = \frac{1}{2}$  para  $\Delta = 0.01$ . Se aprecia que lo que parecía ser una sola resonancia aguda corresponde a tres perfiles separados, muy cercanos, que se superponen para  $\Delta = 0$ . Esto se debe a que estos BICs se forman por el cumplimiento de las tres condiciones 3.6-3.8 de forma simultánea, y por lo tanto, tres BICs diferentes coexisten en el sistema no perturbado para  $k = \frac{1}{2}$  y evolucionan de forma diferente al variar el parámetro  $\Delta$ , dando lugar a la formación de los tres cuasi-BICs (este también es el caso para todos los cuasi-BICs mostrados en la

Fig. 3.2.2). Por otro lado, la Fig. 3.2.4 (b) muestra un acercamiento al perfil de transmisión en torno a  $k = \frac{3}{4}$  (caso análogo a  $k = \frac{1}{4}$ ) para  $\Delta = 0.01$ . En este caso, existe una sola resonancia aguda, ya que al no cumplirse las condiciones 3.7 y 3.8, solo se forma un tipo de BIC en el sistema debido a la condición 3.6 (este también es el caso para todos los cuasi-BICs mostrados en la Fig. 3.2.1). Los BICs formados por la condición 3.6 viven en los brazos verticales del sistema y corresponden al mismo tipo de estado que se forma en el caso de una sola cruz (modo antisimétrico no acoplado al continuo), mientras que los BICs formados por las condiciones 3.7 y 3.8 viven en los brazos y en la región central y corresponden a BICs tipo Fabry-Pérot.

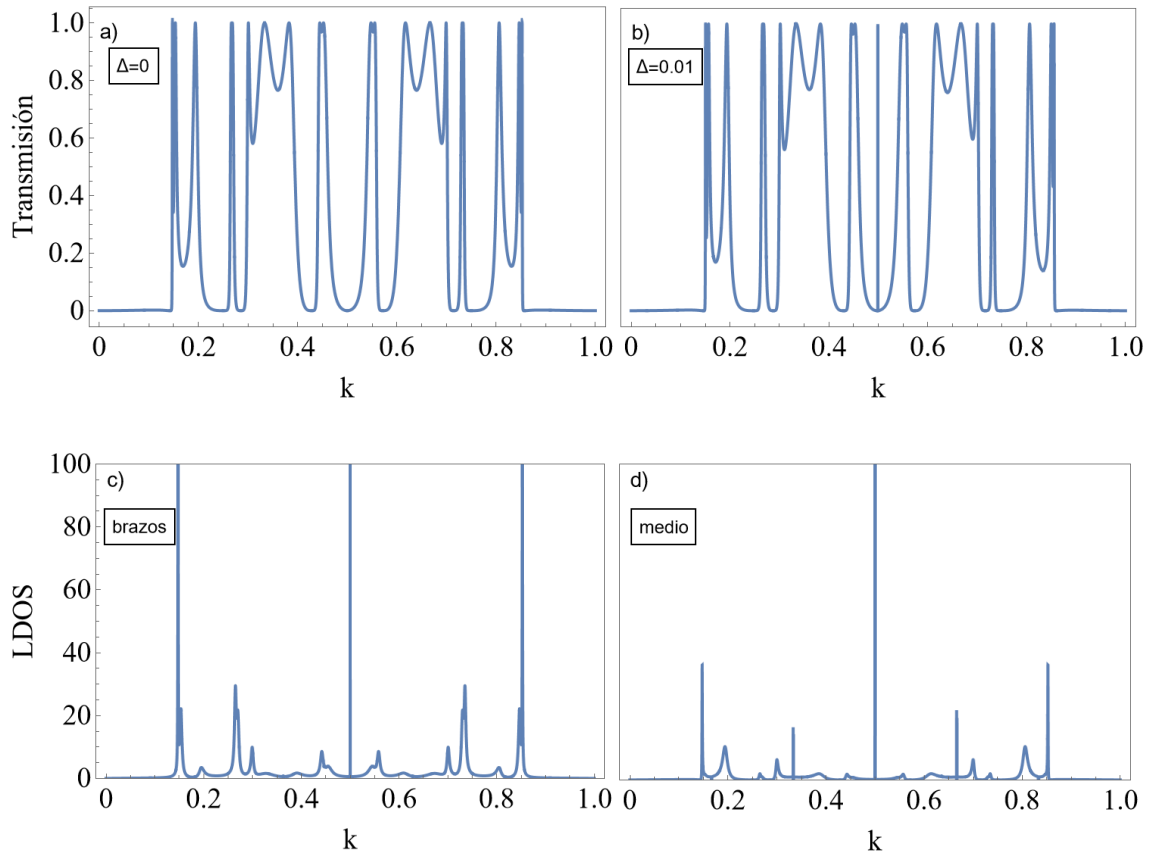


**Figura 3.2.4:** Acercamientos al perfil de transmisión mostrado en la Fig. 3.2.3 (b). a) En torno a  $k = \frac{1}{2}$ . b) En torno a  $k = \frac{3}{4}$ .

Con la información proporcionada por los gráficos de transmisión y de LDOS, se confirma que los estados agudos reconocidos para el sistema perturbado corresponden a cuasi-BICs, lo que permite identificar la presencia de BICs perfectos para el sistema sin perturbar. Además, se concluye que para  $k = \frac{1}{4}$  y  $k = \frac{3}{4}$  los BICs residen exclusivamente en los brazos verticales, mientras que para  $k = \frac{1}{2}$ , los BICs se encuentran tanto en los brazos verticales como en la región intermedia.

Por último, se analiza el sistema para una configuración tal que  $N_1 \neq N_2$ ,  $a - 1 \neq N_1$  y  $a - 1 \neq N_2$ , pero cumpliendo la condición de formación 3.8. En las Fig. 3.2.5 (a) y 3.2.5 (b) se muestran los gráficos de transmisión, para dos valores de la perturbación en las energías de sitio ( $\pm\Delta$ ), para el sistema compuesto de dos estructuras en forma de cruz con seis sitios en el brazo superior, tres en el brazo inferior y cinco en la región intermedia ( $N_1 = 6$ ,  $N_2 = 3$  y  $a - 1 = 5$ ). Esta configuración no cumple con las condiciones mostradas en las ecuaciones 3.6 y 3.7 (para ningún valor de  $k$ ), pero

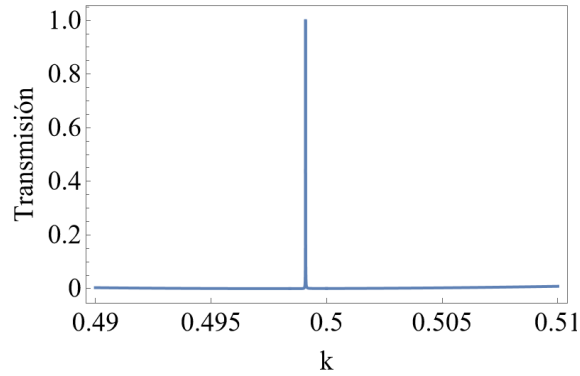
sí con la mostrada en la ecuación 3.8 (solo para  $k = \frac{1}{2}$ ), es decir, las cuantizaciones solo coinciden en un valor para el brazo inferior y la región entre cruces. Para el caso con  $\Delta = 0.01$  el sistema está levemente perturbado y aparece una resonancia aguda en el perfil de transmisión en el valor de  $k$  que cumple con la condición 3.8. En las Fig. 3.2.5 (c) y 3.2.5 (d) se muestran los gráficos de LDOS para los brazos verticales del sistema y para la región entre cruces. En ambos gráficos se observa la aparición de funciones  $\delta$  de Dirac en  $k = \frac{1}{2}$ , lo que confirma la naturaleza de los cuasi-BICs y la presencia de BICs perfectos para el caso  $\Delta = 0$ .



**Figura 3.2.5:** Gráficos para el sistema de dos cruces con  $N_1 = 6$ ,  $N_2 = 3$  y  $a - 1 = 5$ . a) Perfil de transmisión para el sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Perfil de transmisión para una perturbación hermítica  $\Delta = 0.01$ . c) Densidad local de estados para los brazos verticales del sistema no perturbado. d) Densidad local de estados para la región media del sistema no perturbado.

En la Fig. 3.2.6 se muestra un acercamiento en torno a  $k = \frac{1}{2}$  del perfil de transmisión para  $\Delta = 0.01$ , donde se evidencia que el cuasi-BIC corresponde a una sola resonancia aguda, desplazada levemente de  $k = \frac{1}{2}$ . Esto se debe a que se está

cumpliendo únicamente la condición de formación 3.8, por lo que solo se forma un BIC de Fabry-Pérot que reside en el brazo inferior y en la región media.



**Figura 3.2.6:** Acercamiento al perfil de transmisión mostrado en la Fig. 3.2.5 (b) en torno a  $k = \frac{1}{2}$ .

Al comparar los casos estudiados con las condiciones planteadas en las ecuaciones 3.6-3.8, se concluye que, al cumplirse las tres condiciones, los BICs se formarán tanto en ambos brazos verticales como en la región intermedia (BICs protegidos por simetría y BICs tipo Fabry-Pérot). Por otro lado, si solo se cumple la condición 3.6, los BICs se formarán únicamente en los brazos verticales (BICs protegidos por simetría). Finalmente, si se cumple solo la condición 3.7 o la condición 3.8, se formarán BICs en el brazo vertical involucrado (superior o inferior) y en la región intermedia (BICs tipo Fabry-Pérot).

# Capítulo 4

## Caso No Hermítico: Resultados y Análisis

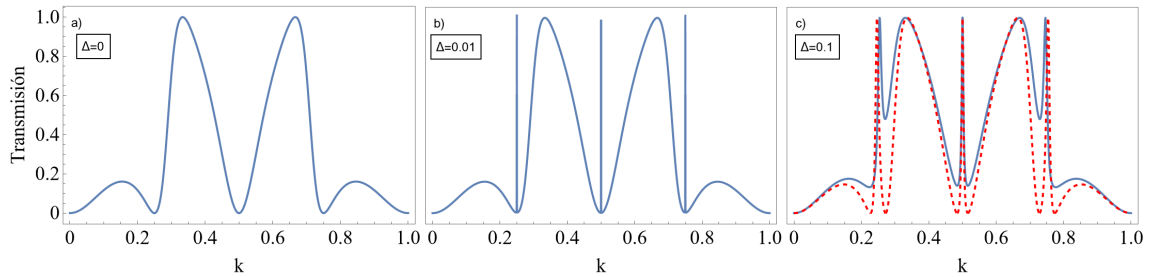
En esta sección se presentan y analizan los resultados obtenidos para los sistemas compuestos por una y dos cruces, respectivamente, utilizando valores imaginarios para las energías de sitio (caso no hermítico), como se detalla en la Tabla 2.1.1, lo que representa la interacción con el entorno. Para este estudio, se consideran configuraciones del sistema que preservan la simetría PT, lo que se conoce como régimen cuasi-hermítico. El objetivo de este análisis de resultados es estudiar el efecto de las perturbaciones no hermíticas en la formación de cuasi-BICs y en la coherencia del sistema.

### 4.1 Una cruz

Para el sistema compuesto por una estructura en forma de cruz, se obtuvieron dos ecuaciones para la transmisión, utilizando los métodos de funciones de onda y funciones de Green, respectivamente. Para este análisis, se grafican, sin pérdida de generalidad, los resultados obtenidos con el método de funciones de Green (ecuaciones 2.39 y 2.40). En los gráficos presentados en esta sección, se utiliza el momentum normalizado por  $\pi$ .

Se analiza una configuración del sistema que cumple con  $N_1 = N_2$ , con el objetivo de preservar la simetría PT. En la Fig. 4.1.1 se muestran los gráficos de transmisión para el sistema compuesto por una estructura en forma de cruz con tres sitios en cada uno de los brazos verticales ( $N_1 = N_2 = 3$ ), para distintos valores de la perturbación en las energías de sitio ( $\pm i\Delta$ ). Del análisis realizado en la Sección 3.1, se sabe que

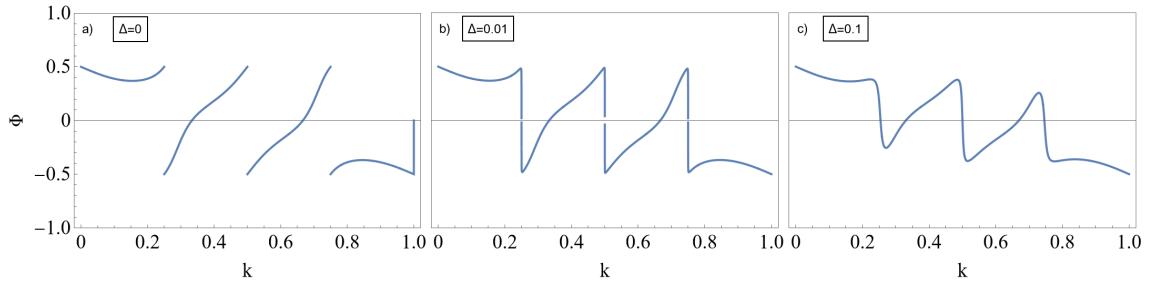
esta configuración presenta BICs perfectos en los brazos verticales para  $k = \{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}\}$  para el sistema no perturbado. Para una perturbación no hermítica pequeña,  $\Delta = 0.01$ , aparecen nuevamente resonancias agudas correspondientes a cuasi-BICs en los valores de  $k$  que cumplen las condiciones 3.6-3.8, sin que se aprecien diferencias significativas con el gráfico para el caso de la perturbación hermítica mostrado en la Figura 3.1.1 (b). Al aumentar la magnitud de la perturbación no hermítica, tal que  $\Delta = 0.1$ , la parte inferior del gráfico de transmisión se eleva en comparación con el gráfico obtenido para una perturbación hermítica de igual magnitud, marcado en rojo. Este efecto indica una pérdida de coherencia en el sistema, la cual se estudia por medio de la fase de transmisión.



**Figura 4.1.1:** Perfiles de transmisión para el sistema de una cruz con  $N_1 = N_2 = 3$  y perturbaciones no hermíticas que preservan la simetría PT: a) Sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Sistema con perturbación no hermítica  $\Delta = 0.01$ . c) Sistema con perturbación no hermítica  $\Delta = 0.1$ . En rojo y con línea segmentada se muestra el perfil de transmisión para el sistema con perturbación hermítica de igual magnitud.

A partir de la amplitud de transmisión  $t$  obtenida en la ecuación 2.39 para el sistema de una cruz, se calcula la fase de transmisión del sistema utilizando la fórmula 1.26. Como se mencionó en la Sección 1.3, la fase de transmisión proporciona información sobre la coherencia del sistema. La Figura 4.1.2 muestra los gráficos de la fase de transmisión (normalizada en  $\pi$ ) para distintos valores de la perturbación no hermítica  $\Delta$ . Para  $\Delta = 0$  se observan discontinuidades en el perfil de la fase de transmisión en los valores de  $k$  donde el perfil de transmisión presenta antiresonancias. Esto ocurre porque, en los puntos de transmisión igual a cero ( $T = 0$ ), se tiene  $|t| = 0$ , lo que implica que el recorrido de la amplitud de transmisión  $t$  en el plano complejo pasa por el origen, y, por lo tanto, la fase de transmisión salta de  $\Phi = \frac{\pi}{2}$  a  $\Phi = -\frac{\pi}{2}$ . Para  $\Delta = 0.01$ , las discontinuidades en el gráfico de la fase de transmisión desaparecen, lo que implica que  $|t| \neq 0$  para todos los valores de  $k$  y, por lo tanto, las antiresonancias

ya no llegan a 0. Para  $\Delta = 0.1$ , la curva se suaviza y disminuye su amplitud, lo que implica una pérdida de la información de la fase de transmisión y, por lo tanto, un proceso de decoherencia en el sistema debido a la interacción con el entorno. A medida que  $\Delta$  sigue aumentando, la curva se aplana y converge a  $\Phi = 0$ , lo cual implica una pérdida total de coherencia del sistema. A su vez, la parte inferior del gráfico de transmisión continúa elevándose hasta converger a  $T = 1$ .



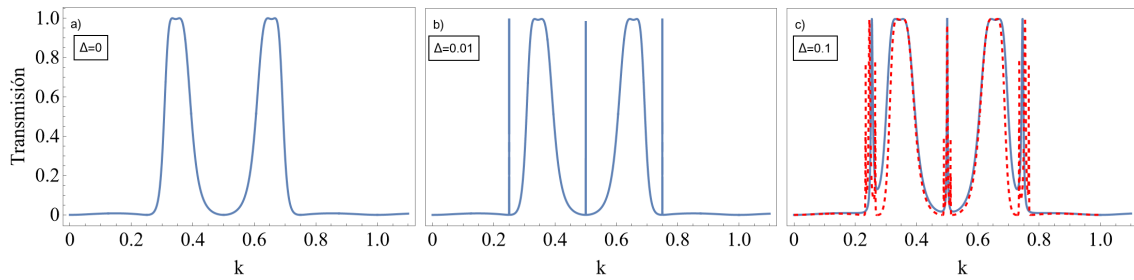
**Figura 4.1.2:** Gráficos de la fase de transmisión  $\Phi$  (normalizada en  $\pi$ ) para el sistema de una cruz con  $N_1 = N_2 = 3$  y perturbaciones no hermíticas que preservan la simetría PT. a) Sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Sistema con perturbación no hermítica  $\Delta = 0.01$ . c) Sistema con perturbación no hermítica  $\Delta = 0.1$ .

## 4.2 Dos cruces

Para el sistema compuesto por dos estructuras en forma de cruz, se obtuvieron dos ecuaciones para la transmisión utilizando los métodos de funciones de onda y funciones de Green, respectivamente. Para este análisis, se grafican, sin pérdida de generalidad, los resultados obtenidos con el método de funciones de Green (ecuaciones 2.119 y 2.40). En los gráficos presentados en esta sección, se utiliza el momentum normalizado por  $\pi$ .

Se analiza el sistema para la configuración  $N_1 = N_2 = a - 1$  (la condición  $N_1 = N_2$  preserva la simetría PT). Se selecciona esta configuración ya que, al cumplir las tres condiciones de formación de BICs planteadas en las ecuaciones 3.6-3.8, permite un análisis general de los efectos de la perturbación no hermítica sobre los distintos tipos de cuasi-BICs. En la Figura 4.2.1 se muestran los gráficos de transmisión, para distintos valores de la perturbación en las energías de sitio ( $\pm i\Delta$ ), para el sistema compuesto de dos estructuras en forma de cruz con tres sitios en cada uno de los brazos verticales y en la región entre cruces ( $N_1 = N_2 = a - 1 = 3$ ). Del análisis realizado en la Sección 3.2 se sabe que esta configuración presenta BICs perfectos para  $\Delta = 0$  en  $k = \{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}\}$ , debido al cumplimiento simultáneo

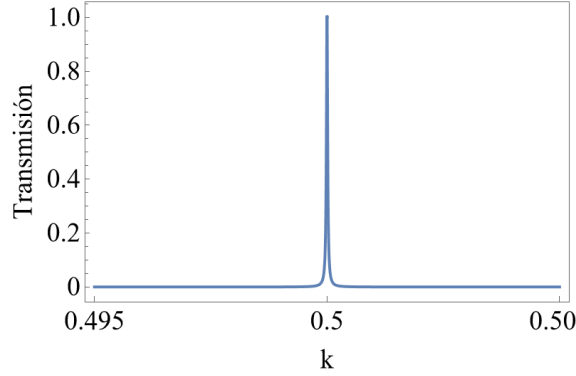
de las tres condiciones de formación. Dependiendo de la condición que se cumpla, el BIC se localiza en diferentes regiones del sistema: en los brazos verticales de las cruces por la condición 3.6, en los brazos superiores y la región intermedia por la condición 3.7, o en los brazos inferiores y la región intermedia por la condición 3.8. Para una perturbación no hermítica pequeña,  $\Delta = 0.01$ , aparecen nuevamente resonancias agudas correspondientes a cuasi-BICs en los valores de  $k$  correspondientes. Nuevamente, al igual que para el caso de una cruz, al aumentar la magnitud de la perturbación no hermítica tal que  $\Delta = 0.1$ , la parte inferior del gráfico de transmisión se eleva en comparación con el gráfico obtenido para una perturbación hermítica de igual magnitud, marcado en rojo, lo que indica una pérdida de coherencia del sistema debido a la interacción con el entorno ocurrida en las secciones verticales de ambas cruces.



**Figura 4.2.1:** Perfiles de transmisión para el sistema de dos cruces con  $N_1 = N_2 = a - 1 = 3$  y perturbaciones no hermíticas que preservan la simetría PT. a) Sistema no perturbado ( $\Delta = 0$ ). b) Sistema con perturbación no hermítica  $\Delta = 0.01$ . c) Sistema con perturbación no hermítica  $\Delta = 0.1$ . En rojo y con línea segmentada se muestra el perfil de transmisión para el sistema con perturbación hermítica de igual magnitud.

En la Figura 4.2.2 se muestra un acercamiento del perfil de transmisión para  $\Delta = 0.01$  en torno a  $k = \frac{1}{2}$  (en  $k = \frac{1}{4}$  y  $k = \frac{3}{4}$  el efecto sobre los cuasi-BICs es idéntico). A diferencia del caso para la perturbación hermítica, en el que aparecen tres cuasi-BICs en el perfil de transmisión para  $\Delta = 0.01$ , en este caso, para la perturbación no hermítica, aparece solo uno. El cuasi-BIC que se muestra en el perfil de transmisión para el sistema perturbado corresponde al formado por la condición de conmensurabilidad 3.6 en los brazos verticales de las cruces, mientras que los cuasi-BICs de Fabry-Pérot, formados por el cumplimiento de las condiciones 3.7 y 3.8, desaparecen de forma casi instantánea al introducir la perturbación no hermítica en las energías de sitio. Esto implica que los cuasi-BICs formados en los brazos

verticales son robustos frente a este tipo de perturbaciones no hermíticas, mientras que los cuasi-BICs tipo Fabry-Pérot presentan una alta sensibilidad a las mismas.



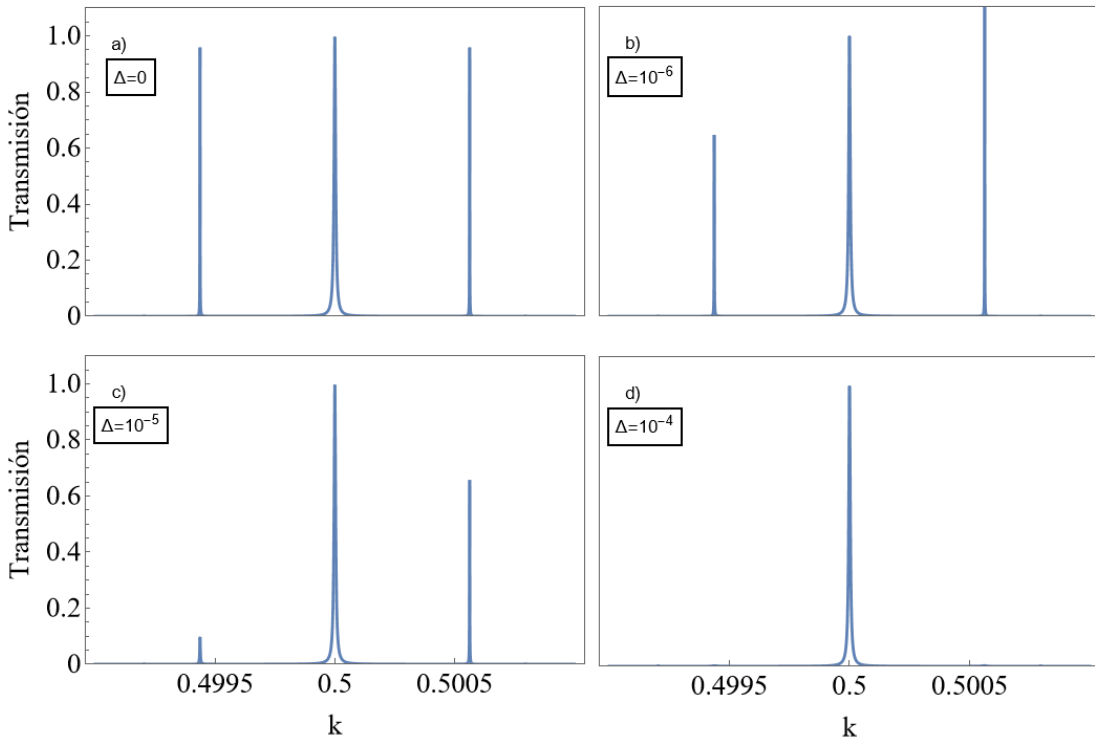
**Figura 4.2.2:** Acercamiento al perfil de transmisión mostrado en la Fig. 4.2.1 (b) en torno a  $k = \frac{1}{2}$ .

Debido a que los tres tipos de BICs se encuentran centrados en  $k = \frac{1}{2}$ , al aumentar el valor de la perturbación no hermítica, los cuasi-BICs tipo Fabry-Pérot, que desaparecen de forma casi inmediata, se encuentran solapados con el ensanchamiento del cuasi-BIC antisimétrico y no es posible apreciar directamente su decaimiento. Para mostrar este efecto, se aplican energías de sitio de la forma:

$$\epsilon_{u,d} = \pm(\delta + i\Delta) \quad (4.1)$$

De tal forma que, a la perturbación no hermítica (imaginaria)  $i\Delta$ , se le está agregando un valor real  $\delta$ . El signo  $+$  corresponde a los sitios de uno de los brazos verticales, mientras que el signo  $-$  corresponde a los sitios del otro. Al agregar la parte real, los cuasi-BICs se separan de la misma forma que se estudió en el caso hermítico. Si bien este tipo de energía de sitio no preserva la simetría  $PT$  (por la diferencia de signos en sus partes reales), permite de igual forma apreciar el decaimiento de los cuasi-BICs tipo Fabry-Pérot, aún cuando la evolución temporal no es unitaria y, por lo tanto, la transmisión puede ser mayor a 1. En la Figura 4.2.3 se muestra un acercamiento de la transmisión en torno a  $k = \frac{1}{2}$  para un valor real fijo pequeño  $\delta = 0.005$  y para distintos valores de la perturbación no hermítica. Para  $\Delta = 0$  el sistema solo presenta energías de sitio reales, lo que permite apreciar los tres cuasi-BICs por separado. Para  $\Delta = 10^{-6}$ , el cuasi-BIC tipo Fabry-Pérot de la izquierda (energía de sitio  $-(\delta + i\Delta)$ ) presenta un leve decaimiento, mientras que el de la derecha (energía

de sitio  $+(\delta + i\Delta)$ ) presenta amplificación de la transmisión. Esto podría deberse a que el cuasi-BIC de la izquierda está sometido a una perturbación no hermítica que representa pérdida de energía, mientras que el de la derecha está sometido a una ganancia. Para  $\Delta = 10^{-5}$ , ambos cuasi-BICs presentan decaimiento de la transmisión, disminuyendo su altura con respecto al caso hermítico. Por último, para  $\Delta = 10^{-4}$ , ambos cuasi-BICs de Fabry-Pérot han decaído completamente y no aparecen en el perfil de transmisión. En los casos mostrados, el cuasi-BIC formado en los brazos verticales no presenta diferencias significativas, demostrando su robustez ante este tipo de perturbaciones no hermíticas.



**Figura 4.2.3:** Acercamiento al perfil de transmisión en torno a  $k = \frac{1}{2}$  para el sistema de dos cruces con  $N_1 = N_2 = a - 1 = 3$  y perturbaciones de tipo  $\pm(0.005 + i\Delta)$ . a) Para  $\Delta = 0$  (sin perturbación de tipo no hermítica). b) Para  $\Delta = 10^{-6}$ . c) Para  $\Delta = 10^{-5}$ . d) Para  $\Delta = 10^{-4}$ .

Debido a la sensibilidad de los BICs tipo Fabry-Pérot aquí estudiados frente a las perturbaciones no hermíticas consideradas, las posibles aplicaciones de los mismos se ven limitadas por las características del problema: para sistemas en los que la pérdida y/o ganancia es significativa o poco controlable, estos estados disminuyen su utilidad, mientras que pueden resultar útiles para sensores que busquen medir

perturbaciones de este tipo muy pequeñas.

# Capítulo 5

## Conclusiones

En este trabajo se estudió la formación de BICs y cuasi-BICs para dos sistemas específicos de tipo enlace fuerte, consistentes en una y dos estructuras en forma de cruz, respectivamente. Para el desarrollo de este estudio se utilizaron tanto el método de funciones de onda como el de funciones de Green. Se analizaron los resultados obtenidos para los casos con perturbaciones de tipo hermítico y no hermítico, manteniendo la simetría  $PT$ , y se estudiaron gráficamente cantidades de interés como la transmisión, la densidad local de estados (LDOS) y la fase de transmisión.

A partir de los resultados obtenidos, se concluye que, para el caso de una estructura en forma de cruz, se formarán BICs protegidos por simetría para los valores de  $k$  en que existan estados degenerados en las cadenas que constituyen ambos brazos verticales (ecuación 3.6). Por otro lado, para el caso de dos estructuras en forma de cruz, se formarán BICs protegidos por simetría al cumplirse la condición antes mencionada, y BICs tipo Fabry-Pérot para los valores de  $k$  en que existan estados degenerados en algunos de los brazos verticales (superiores o inferiores) y en la sección media que conecta ambas estructuras (ecuaciones 3.7 y 3.8).

Se concluye también que, al introducir las perturbaciones no hermíticas que preservan la simetría  $PT$  en las energías de sitio de los brazos, los cuasi-BICs de Fabry-Pérot decaen de forma casi instantánea, indicando una gran sensibilidad, a diferencia de los cuasi-BICs de los brazos verticales, que presentan mayor robustez. Finalmente, se concluye que la introducción de las perturbaciones no hermíticas presentadas en este trabajo genera una pérdida de coherencia en los sistemas, afectando los procesos de interferencia que ocurren en los mismos.

A modo de trabajo futuro, se propone estudiar un sistema análogo a los mostrados

en este trabajo, compuesto por tres o más cruces, para determinar la relevancia de la estructura vertical central en la formación de BICs. Además, se sugiere investigar el efecto sobre la formación de BICs y cuasi-BICs debido a la introducción de parámetros no hermíticos en los acoplamientos del sistema. Finalmente, se propone realizar un estudio experimental en redes fotónicas de los sistemas propuestos, con el fin de verificar los resultados obtenidos, utilizando las técnicas experimentales implementadas por Vicencio et al. en su trabajo [37].

# Bibliografía

- [1] Chia Wei Hsu, Bo Zhen, A. Douglas Stone, Jhon D. Joannopoulos, and Marin Soljacic. Bound states in the continuum. *Nature Reviews Materials*, 2016.
- [2] Andrey E Miroshnichenko, Sergej Flach, and Yuri S Kivshar. Fano resonances in nanoscale structures. *Reviews of Modern Physics*, 82(3):2257–2298, 2010.
- [3] John von Neumann and Eugene Wigner. Über merkwürdige diskrete eigenwerte. 1929.
- [4] Kirill Koshelev, Andrey Bogdanov, and Yuri Kivshar. Engineering with bound states in the continuum. *Optics and Photonics News*, 2020.
- [5] H. Friedrich and D. Wintgen. Physical realization of bound states in the continuum. *Phys. Rev. A*, 31:3964–3966, Jun 1985.
- [6] D. C. Marinica, A. G. Borisov, and S. V. Shabanov. Bound states in the continuum in photonics. *Phys. Rev. Lett.*, 2008.
- [7] Yonatan Plotnik, Or Peleg, Felix Dreisow, Matthias Heinrich, Stefan Nolte, Alexander Szameit, and Mordechai Segev. Experimental observation of optical bound states in the continuum. *Phys. Rev. Lett.*, 107:183901, Oct 2011.
- [8] Shaimaa I. Azzam and Alexander V. Kildishev. Photonic bound states in the continuum: From basics to applications. *Advanced Optical Materials*, 9(1): 2001469, 2021.
- [9] Meng Kang, Tao Liu, CT Chan, and Meng Xiao. Applications of bound states in the continuum in photonics. *Nature Reviews Physics*, 5(11):659–678, 2023.
- [10] Pavel Pankin, B.-R Wu, Jhen-Hong Yang, Kuo-Ping Chen, Ivan Timofeev, and Almas Sadreev. One-dimensional photonic bound states in the continuum. *Communications Physics*, 3:91, 05 2020.
- [11] Ilya Deriy, Ivan Toftul, Mihail Petrov, and Andrey Bogdanov. Bound states in the continuum in compact acoustic resonators. *Phys. Rev. Lett.*, 128:084301, Feb 2022.
- [12] Madiha Amrani, Soufyane Khattou, Y Rezzouk, Abdelkader Mouadili, A Noul, EH El Boudouti, and Bahram Djafari-Rouhani. Analytical and numerical study of t-shaped plasmonic demultiplexer based on fano and induced transparency resonances. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 55(7):075106, 2021.

- [13] Sofia Pinto, Rafael A Molina, and Pedro A Orellana. Bound states in the continuum in asymmetric crossbar junctions in one-dimensional waveguides. *Physical Review A*, 110(1):013501, 2024.
- [14] ML Ladrón de Guevara and PA Orellana. Electronic transport through a parallel-coupled triple quantum dot molecule: Fano resonances and bound states in the continuum. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 73(20):205303, 2006.
- [15] Bastián Grez, Juan Pablo Ramos-Andrade, Vladimir Juričić, and Pedro A Orellana. Bound states in the continuum in a two-channel fano-anderson model. *Physical Review A*, 106(1):013719, 2022.
- [16] Alexis R. Legón, M. Ahumada, J. P. Ramos-Andrade, Rafael A. Molina, and P. A. Orellana. Bound states in the continuum in a double whispering-gallery resonator. *Phys. Rev. A*, 111:013529, Jan 2025.
- [17] Ş. K. Özdemir, S. Rotter, F. Nori, and L. Yang. Parity–time symmetry and exceptional points in photonics. *Nature Materials*, 18(8):783–798, August 2019.
- [18] George Gamow. Zur quantentheorie des atomkernes. *Zeitschrift für Physik*, 51(3):204–212, 1928.
- [19] S. Praveena and K. Senthilnathan. A review: Rise of pt-symmetry for laser applications. *Optik*, 289:171260, 2023. ISSN 0030-4026.
- [20] Hongfei Wang, Xiujuan Zhang, Jinguo Hua, Dangyuan Lei, Minghui Lu, and Yanfeng Chen. Topological physics of non-hermitian optics and photonics: a review. *Journal of Optics*, 23(12):123001, oct 2021.
- [21] Qiuchen Yan, Boheng Zhao, Rong Zhou, Rui Ma, Qinghong Lyu, Saisai Chu, Xiaoyong Hu, and Qihuang Gong. Advances and applications on non-hermitian topological photonics. *Nanophotonics*, 12(13):2247–2271, 2023.
- [22] Carl M. Bender and Stefan Boettcher. Real spectra in non-hermitian hamiltonians having  $PT$  symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 80:5243–5246, Jun 1998.
- [23] Stefano Longhi. Parity-time symmetry meets photonics: A new twist in non-hermitian optics. *Europhysics Letters*, 120(6):64001, 2018.
- [24] Mikhail F. Limonov. Fano resonance for applications. *Advances in Optics and Photonics*, 2021.
- [25] Leonard Dobrzyński, Housni Al-Wahsh, Abdellatif Akjouj, and Eman A Abdel-Ghaffar. Bound states in the continuum and long-lived electronic resonances in mesoscopic structures. *Physical Review B*, 110(3):035428, 2024.
- [26] Shaimaa I Azzam and Alexander V Kildishev. Photonic bound states in the continuum: from basics to applications. *Advanced Optical Materials*, 9(1):2001469, 2021.

- [27] Peter Markos and Costas M Soukoulis. Wave propagation. In *Wave Propagation*. Princeton University Press, 2008.
- [28] Supriyo Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering. Cambridge University Press, 1995.
- [29] David J. Griffiths and Darrell F. Schroeter. *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 3 edition, 2018.
- [30] Tooru Taniguchi and Markus Büttiker. Friedel phases and phases of transmission amplitudes in quantum scattering systems. *Phys. Rev. B*, 60:13814–13823, Nov 1999.
- [31] Gregor Hackenbroich. Phase coherent transmission through interacting mesoscopic systems. *Physics Reports*, 343(6):463–538, 2001. ISSN 0370-1573.
- [32] Changrui Chen and Wenan Guo. Formal green’s function theory in non-hermitian lattice systems. *Phys. Rev. B*, 109:205407, May 2024.
- [33] E.N. Economou. *Green’s Functions in Quantum Physics*. Springer Series in Solid-State Sciences. Springer, 2006. ISBN 9783540122661.
- [34] G. Grosso and G.P. Parravicini. *Solid State Physics*. Academic Press, 2000. ISBN 9780080481029.
- [35] Ramy El-Ganainy, Konstantinos G. Makris, Mercedeh Khajavikhan, Ziad H. Musslimani, Stefan Rotter, and Demetrios N. Christodoulides. Non-Hermitian physics and PT symmetry. *Nature Physics*, 14(1):11–19, January 2018.
- [36] Bo Peng, Sahin Ozdemir, Fuchuan Lei, Faraz Monifi, Mariagiovanna Gianfreda, Gui Long, Shanhui Fan, Franco Nori, Carl Bender, and Lan Yang. Parity–time-symmetric whispering-gallery microcavities. *Nature Physics*, 10:394–398, 04 2014.
- [37] Rodrigo A. Vicencio, Camilo Cantillano, Luis Morales-Inostroza, Bastián Real, Cristian Mejía-Cortés, Steffen Weimann, Alexander Szameit, and Mario I. Molina. Observation of localized states in lieb photonic lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 114:245503, Jun 2015.