

DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA
INSTITUTO UNIVERSITARIO DE MATEMÁTICA PURA Y APLICADA



MODELIZACIÓN Y SIMULACIÓN DE DISPOSITIVOS
MICROMÉTRICOS BASADOS EN ESTRUCTURAS
ESPACIALES DE SOLITONES ÓPTICOS

Tesis Doctoral

Autor: Miguel Ángel García March

Directores: Pedro Fernández de Córdoba Castellá y Albert Ferrando Cogollos

Marzo 2008

*A mis padres y a mi hermano
Juan Fran*

Resumen

En la presente Tesis se utilizan las herramientas de la teoría de grupos discretos, de la física del estado sólido y de la dinámica no lineal para estudiar los nuevos fenómenos que se pueden obtener al combinar la periodicidad y la no linealidad para controlar el comportamiento de la luz. Los modelos matemáticos obtenidos consisten en ecuaciones diferenciales no lineales en derivadas parciales tipo Schrödinger que presentan variaciones periódicas en la parte lineal y no lineal. En los sistemas con simetría rotacional discreta el estudio de estos modelos se ha centrado en el concepto clave de pseudomomento angular mientras que en los sistemas periódicos se ha explotado la analogía con los sistemas estudiados en la física del estado sólido.

Adicionalmente, se han desarrollado métodos de resolución numérica capaces de simular la propagación electromagnética en sistemas no lineales periódicos bidimensionales. Además se han simulado manipulaciones de propiedades de la luz que sirvan como base a dispositivos micrométricos pasivos (como memorias netamente ópticas) o activos (capaces de realizar operaciones booleanas) basadas en estructuras solitónicas sobre las que se pueden definir propiedades y dinámica magnética. El objetivo último es la simulación de dispositivos capaces de ser fabricados experimentalmente.

Resum

En la present Tesi s'utilitzen les eines de la teoria de grups discrets, de la física de l'estat sòlid i de la dinàmica no lineal per a estudiar els nous fenòmens que es poden obtenir quan es combina la periodicitat i la no linealitat per a controlar el comportament de la llum. Els models matemàtics proposats consisteixen en equacions diferencials no lineals en derivades parcials, del tipus Schrödinger no lineal, que presenten variacions periòdiques en la part lineal i no lineal. En els sistemes que presenten simetria rotacional discreta l'estudi s'ha basat en el concepte clau de pseudomoment angular. En els sistemes periòdics s'ha explotat l'analogia en els sistemes estudiats en la física de l'estat sòlid.

Addicionalment, s'han desenvolupat mètodes numèrics per a simular la propagació de la llum en sistemes no lineals periòdics i bidimensionals. A més a més, s'han simulat algunes manipulacions de les propietats de la llum, les quals poden ser útils per a desenvolupar dispositius micromètrics passius o actius basats en estructures solitòniques. El darrer objectiu de la Tesi es la simulació de dispositius que es poden obtenir experimentalment.

Abstract

New optical phenomena can be obtained if light is propagated in periodic or discrete rotational symmetry media in the nonlinear limit. In this work, to study these phenomena arising from the combination of symmetry and nonlinearity, the mathematical tools provided by discrete group theory, solid state and nonlinear dynamics are used. The behavior of light is modeled by a partial differential equation of the Schrödinger type, with a linear and nonlinear periodicity or discrete rotational symmetry. For the systems showing discrete rotational symmetry the study is based on the key concept of angular pseudomomentum. For the systems showing discrete translational symmetry the analogy with solid state physics is deeply explored.

Additionally, numerical methods to solve that partial differential equation in two-dimensions and in the nonlinear limit have been developed. These methods have been used to simulate the control of light by using discrete symmetry and other phenomena. New optical devices based on these effects related to discrete rotational symmetry or in solitonic periodic structures can be designed. The ultimate goal of this work is to simulate experimentally feasible optical devices based on these phenomena.

Agradecimientos

Me gustaría expresar mi agradecimiento a aquellas personas de las que he podido aprender durante estos cuatro años y algunos meses en los que he realizado la presente Tesis. Me parece que este aprendizaje, que espero que continúe en el futuro, no se ha restringido sólo al contenido del conocimiento sino también a los diferentes métodos, técnicas, o incluso comportamientos éticos con los que se aproximan a la ciencia las personas que he conocido y con las que he trabajado en algún momento en estos años. Por otra parte, debo admitir que lo que haya podido aprender estos años no sólo se ha intercambiado por transmisión directa y explícita o por el simple hecho de observar e imitar a las personas cercanas, sino que conscientemente he copiado las actitudes de aquellas personas que no han dejado de impresionarme y a las que admiro, tanto por su habilidad técnica y su capacidad de trabajo, como por sus cualidades humanas. Evidentemente, las dos personas de las que más he aprendido y a las que más agradecido estoy son mis directores de Tesis, los Doctores Albert Ferrando y Pedro Fernández de Córdoba. En los primeros años los Doctores Francisco Villatoro y Mario Zacarés, me permitieron aprender mucho de ellos y durante los nueve meses que estuve en la Universidad de Castilla-La Mancha intenté aprender todo lo que pude del Doctor Víctor Pérez García, a cuyo grupo estoy igualmente agradecido. Últimamente confieso que he admirado y 'copiado' sin nocturnidad pero con alevosía a los Doctores José María Isidro, Javier Vijande y Tetyana Bandos, y en general siempre ha sido y es un placer escuchar a Javier Urchueguía, Álvaro Montero, Daniele Tomassini, Humberto Michinel, José Ramón Salgueiro, Fernando Giménez y muchos otros, incluidos algunos con los que únicamente he compartido conversaciones de café aparentemente 'inofensivas'.

En otros ámbitos no voy a extenderme, porque son más personales. Sólo quiero destacar a aquellos a los que les debo la 'vida', en su vertiente científica ;). Como bien saben, en algunos momentos esta 'vida científica', que no me planteo abandonar, ha pasado por dificultades. Además de algunos de los mencionados más arriba, quiero citar a Juan Fran, José Rafa, Clara, Marianela, mis padres, Minerva, el grupo InterTech, Pepe Bonet y otros tantos. Cada uno de ellos sabe qué y por qué se lo agradezco.

Finalmente, dejando a un lado los ámbitos anteriores que me parece que, abusando de la terminología de Jürgen Habermas, pertenecen al 'sistema', y pasando a las situaciones que forman parte del 'mundo de la vida' (*Lebenswelt*), debo agradecer a las personas anteriormente citadas, a todos los miembros de InterTech, en particular a la gente que hace cosas raras con bichos como Arnau y Emilio, por las risas que nos echamos, a Isma, Llúcia, Julio, Voya, Miguel Arevalillo, Carles, Erin, Lucas, Celes, Pilar Aliaga, Sergio Abraham, Jeza, Sergio, Nico, la gente del IUMPA y de la secretaria del departamento de Matemática Aplicada, y otros muchos, por diversas razones. En el mundo de la vida los actores cooperan dentro de las bases

de un mutuo entendimiento y las relaciones no se basan en el intercambio, normas, etc. como en el mundo del sistema. En la actualidad, cada vez más, modos de entendimiento y comunicación pertenecientes al mundo del sistema invaden ámbitos tradicionalmente pertenecientes al mundo de la vida. Como reacción a ello, muchas veces formas de comunicación del mundo de la vida se involucran excesivamente en el mundo de sistema. Quiero agradecer, pues, a todos aquellos que han entendido que haya intentado mantener las formas de comunicación pertenecientes al mundo de la vida y del sistema en sus respectivos ámbitos. Desde luego que esta división es subjetiva y variable en el tiempo y la cultura, así que espero no haber molestado a nadie. En todo caso, a este mundo de la vida, en el que se desarrolla la cotidianidad menos espectacular, me gustaría otorgarle al menos tanta importancia como al mundo del sistema.

Índice general

Resumen	5
Resum	7
Abstract	9
Agradecimientos	11
Capítulo 1. Introducción	15
Parte 1. Solitones espaciales e invariancia rotacional continua o discreta	31
Capítulo 2. Teoría Matemática del Pseudomomento Angular	33
2.1. Introducción	33
2.2. Teoría de grupos aplicada a un operador no lineal real	34
2.3. Teoría de Bloch aplicada a un operador no lineal real	42
2.4. Aplicación a un operador no lineal no real	47
2.5. Propiedades cerca del eje de simetría rotacional	50
2.6. Singularidades de fase, carga, vorticidad y líneas nodales	55
2.7. Interpretación de la teoría de pseudomomento angular	58
Capítulo 3. Singularidades, líneas nodales, carga y vorticidad: soluciones simples y compuestas	61
3.1. Introducción	61
3.2. Soluciones simples	61
3.3. Soluciones simples con líneas nodales radiales y angulares	72
3.4. Soluciones compuestas	78
Capítulo 4. Dinámica de soluciones con simetría rotacional	87
4.1. Introducción	87
4.2. Soluciones estacionarias y no estacionarias	87
4.3. Simetría rotacional y cantidades conservadas	89
4.4. Reducción de la simetría de $V(\mathbf{x})$	90
4.5. Relación entre vorticidad y momento o pseudomomento angular	98
Parte 2. Solitones espaciales e invariancia traslacional discreta	105
Capítulo 5. Teoría matemática del pseudomomento lineal y dinámica de soluciones no lineales con invariancia traslacional	107
5.1. Introducción	107
5.2. Soluciones estacionarias con simetría traslacional discreta	107

5.3. Dinámica de soluciones con invariancia traslacional	116
Capítulo 6. Propiedades de la luz en sistemas con invariancia traslacional	129
6.1. Introducción	129
6.2. Soluciones estáticas y hamiltoniano	130
6.3. Ordenación de largo alcance y coeficientes de Wannier	131
6.4. Fluctuaciones en torno a una solución estática. Magnetismo	134
6.5. Dinámica de fase	140
6.6. Flujo de las soluciones estáticas	151
6.7. Dominios magnéticos	153
Capítulo 7. Conclusiones	155
Apéndice A. Obtención de las ecuaciones y notación	161
Apéndice B. Conceptos previos de teoría de grupos	165
Apéndice C. Invariancia traslacional, funciones de Bloch y teorema de Bloch	173
C.1. Teoría de las funciones de Bloch	173
C.2. Elementos de materia condensada	174
Apéndice D. Métodos numéricos	177
D.1. Introducción	177
D.2. Método para la ecuación de estados estacionarios	177
D.3. Generalización a mallados y dominios no rectangulares	180
Apéndice E. Hamiltoniano de las excitaciones de baja energía	183
E.1. Simplificación del término H_0 del hamiltoniano 6.4.5	183
E.2. Simplificación del término H_1 del hamiltoniano 6.4.5	184
E.3. Simplificación del término H_2 del hamiltoniano 6.4.5	186
Apéndice F. Ecuaciones de movimiento de las excitaciones de más baja energía	189
F.1. Obtención de las ecuaciones de movimiento a partir del lagrangiano	189
F.2. Simplificación de las ecuaciones de movimiento 6.4.4	189
Apéndice G. Dependencia de E y $\Delta\mu$ del módulo de \mathbf{m} .	191
Índice de figuras	193
Índice de cuadros	199
Bibliografía	201

CAPÍTULO 1

Introducción

Durante el Siglo XIX y hasta principios del Siglo XX, la luz dejó de ser un fenómeno intrigante o misterioso y proporcionó algunas de las sorpresas más revolucionarias de la historia de la ciencia. En la primera mitad del siglo XIX Michael Faraday, un químico-físico sin formación académica (se inició de manera autodidacta leyendo textos científicos y asistiendo a las conferencias de la *Royal Institution* hasta que logró un puesto como auxiliar de laboratorio de su maestro, Sir Humphrey Davy) y empeñado en la unidad de todas las fuerzas como principio filosófico, logró demostrar que las fuerzas eléctricas y magnéticas estaban íntimamente relacionadas, más allá de las relaciones matemáticas y las teorías basadas en fluidos eléctricos o magnéticos que habían desarrollado otros investigadores como Ampère [1]. Un admirador de sus teorías, William Thomson (Lord Kelvin) intentó sin éxito desarrollar las leyes enunciadas cualitativamente por Faraday y transmitió este interés a James Clerk Maxwell [1]. Fue este último quien introdujo el concepto fundamental de Desplazamiento Eléctrico y enunció sus famosas ecuaciones. De ellas se desprendía no sólo que los fenómenos eléctricos y magnéticos estuvieran relacionados, sino que la luz era un fenómeno electromagnético de carácter ondulatorio que viajaba a una velocidad constante en el vacío (lo cual encajaba con los experimentos previos de Thomas Young). Sin embargo, aunque fueron una gran síntesis de buena parte del conocimiento físico de la época, albergaban aún sorpresas que generarían muchos de los avances científicos del Siglo XX. En particular, la catástrofe del infrarrojo, es decir, el incremento infinito de la cantidad de energía transmitida a frecuencias pequeñas, hizo que Max Planck en 1900, para explicar el espectro de emisión de un cuerpo negro, tuviera que introducir en las ecuaciones una pequeña constante, la constante de Planck, que significaba en definitiva una discretización de la energía transmitida por cada onda. Además, la visión corpuscular de la luz propugnada por Newton y dominante hasta los trabajos de Maxwell estaba esperando una buena explicación. Hubo que esperar hasta Einstein y a la introducción del concepto de dualidad onda-corpúsculo para dar sentido a los resultados de Planck y, al mismo tiempo, para lanzar a la humanidad a conocimientos mucho más profundos sobre la naturaleza que nos rodea.

Conforme fue conociéndose la naturaleza de la luz, y se fueron entendiendo muchos de los fenómenos naturales que la tenían como protagonista, nació el interés por manipularla. Sin embargo, así como otros fenómenos electromagnéticos encontraron utilidad práctica rápidamente (motores y generadores eléctricos, comunicaciones por radio, radares, etc), la tecnología basada en la luz siguió un proceso mucho más lento. Una vez entendido el comportamiento de la luz en el vacío, la posibilidad de manipularla pasaba por comprender bien su interacción con los medios materiales, tanto en la interfase entre dos medios distintos como en la propagación dentro de un medio material. Hasta la segunda mitad del siglo XX la tecnología no

fue capaz de generar luz suficientemente centrada en torno a una única frecuencia (es decir, de un único color) mediante los *láseres*, o bien de transportarla de manera controlada mediante las fibras ópticas. Los logros en esta dirección han contribuido a grandes avances tecnológicos que se disfrutan en la actualidad. Ambos avances se basan, precisamente, en la naturaleza de la interacción de la luz con la materia, la cual fue resumida por Maxwell en el concepto fundamental de Desplazamiento Eléctrico.

Pero la imaginación aún llevó a los científicos un paso más allá, ¿podremos encontrar algún material capaz de permitirnos controlar completamente la luz? ¿hay algún modo, por ejemplo, de conseguir realizar con ella operaciones lógicas tal y como lo hacemos con los electrones? Curiosamente, la analogía entre mecánica y óptica ha estado presente en el desarrollo de la física de los últimos dos siglos. Lo estuvo cuando Maxwell escribió sus ecuaciones (conocían bien el método de las analogías y estaba pensando en términos mecánicos), también cuando Einstein formuló su dualidad onda-corpúsculo, pero mucho más lo estuvo en los desarrollos posteriores de la física cuántica y, en particular, en la ecuación de ondas obtenida por Schrödinger. Esta ecuación permite, por ejemplo, modelizar el comportamiento de los electrones dentro de un potencial. En particular, permite estudiar el comportamiento de los electrones dentro de cristales periódicos, lo cual es la base física que sustenta la tecnología electrónica. Entonces, si dentro de un cristal periódico podemos conseguir que a determinadas energías los electrones se propaguen y a otras no, ¿se comportará de un modo análogo la luz dentro de un medio cuyo índice de refracción tenga cierta periodicidad? La respuesta fue que, efectivamente, dentro de estos materiales, conocidos como cristales fotónicos, se podían lograr bandas de propagación y bandas prohibidas para la frecuencia de las ondas electromagnéticas. Este excepcional fenómeno abrió la puerta a nuevas aplicaciones tecnológicas de la luz [2].

Paralelamente, desde la segunda mitad del siglo XX, en diferentes ramas de la ciencia ha crecido el interés por los fenómenos no lineales (es decir, aquellos fenómenos cuyo resultado depende de la propia magnitud estudiada). En óptica, los fenómenos no lineales, ligados de nuevo a la propagación de la luz dentro de un material, han atraído un gran interés en las últimas décadas. Al igual que en el caso de los medios periódicos, las propiedades no lineales de los materiales pueden permitir el control del flujo luminoso, abriendo nuevos caminos para las aplicaciones tecnológicas. Hay diferentes fenómenos no lineales relacionados con la propagación de luz, tal y como se recoge en referencias como las [3, 4, 5]. En la presente tesis nos vamos a ocupar únicamente de los efectos no lineales que originan *solitones*, es decir, paquetes de ondas que no cambian de forma a lo largo de la propagación, en oposición a la tendencia a ensancharse de cualquier paquete de ondas en el caso lineal [6, 7, 8, 9, 10].

Un pulso es un paquete de ondas planas con distintas frecuencias, cada una de las cuales, en el caso lineal, viaja a distinta velocidad de fase dentro del medio, lo cual provoca el ensanchamiento del mismo. Este efecto se conoce como *dispersión cromática*. En óptica, es posible formar otro tipo de paquetes de ondas: si suponemos que la luz se emite *casi* a una única frecuencia (y de este modo toda la dinámica temporal está determinada por esta frecuencia, lo cual es una hipótesis bastante restrictiva), podemos generar un paquete de ondas planas con distintas *frecuencias espaciales*. En este caso, para ondas *quasi-monocromáticas*, el paquete

está formando por un conjunto de ondas planas que se propagan formando distintos ángulos respecto a cierto eje. Por lo tanto, cada una de las ondas se propagará a una velocidad de fase diferente respecto a este eje, dando lugar a un ensanchamiento de este paquete de ondas, que en este caso denominaremos *haz* en lugar de pulso. Este efecto se conoce como *difracción* del haz. En presencia de materiales no lineales, la propagación de la luz modifica el índice de refracción del medio, lo cual permite compensar los efectos de la dispersión o de la difracción, de modo que todas las componentes del paquete viajan a la misma velocidad de fase y el pulso o el haz no cambia de forma a lo largo de la propagación. En el caso de que el paquete de ondas sea un pulso, se dice que la luz ha formado un *solitón temporal*, mientras que en el caso de que el paquete de ondas sea un haz, se dice que ha formado un *solitón espacial*. En la presente tesis nos vamos a ocupar únicamente de los solitones espaciales.

En 1964 se propuso, para explicar cómo la luz genera su propia guía en la que se propaga sin difractar en materiales donde la constante dieléctrica aumenta con la intensidad, que la propagación del campo electromagnético podía modelizarse mediante una ecuación de Schrödinger no lineal, donde la no linealidad es de tipo cúbico (véase apéndice A)[11]. En este trabajo se resolvió analíticamente la ecuación en una dimensión y se obtuvo una solución numérica con simetría cilíndrica en dos dimensiones (en el caso de un campo picado en una frecuencia), siendo la primera predicción teórica de la existencia de solitones espaciales. Sin embargo, aunque permitía explicar una observación experimental realizada ese mismo año (véase cita en [11]), no se trataba profundamente la dinámica de las soluciones. Un año después se analizó semianalítica y numéricamente la tendencia de la luz en estas condiciones a alcanzar intensidades catastróficamente grandes, efecto bautizado como auto-enfoque [12] y observado ya en el experimento de Hercher (véase cita en [11] y [12]¹). Una continuación del trabajo de Kelley permitió observar numéricamente que en el caso de que se consideren no linealidades más complejas en la ecuación tales que permitan que el efecto de autoenfoque sea compensado, no linealidades conocidas como saturables, se puede lograr estabilizar las soluciones [13]. Esta predicción numérica se confirmó algunos años más tarde cuando se observaron solitones en medios saturables [14]. Por otro lado, un par de años antes se había resuelto el problema unidimensional completo en el caso autoenfocante sin saturación, mostrándose que para este caso las soluciones debían ser estables [15]. En este mismo trabajo se demostró también que las soluciones bidimensionales debían ser inestables, incluso aquéllas uniformes en una dirección espacial y con forma de solitón unidimensional en la otra, conocidas como solitones-línea (*soliton stripes*). A partir de aquí la comunidad científica centró su atención en los efectos no lineales temporales y el campo de solitones espaciales tuvo que esperar hasta la última década del siglo XX para ver nuevos resultados, quedando los trabajos realizados en medios saturables como contribuciones aisladas. Entre 1990 y 1991 aparecieron algunos trabajos donde se observaron experimentalmente solitones espaciales unidimensionales en guías de onda y se estudió su interacción [16, 17, 18, 19]. También en esos años aparecieron nuevos trabajos teóricos que demostraron que las soluciones bidimensionales en medios saturables podían ser estables, basándose nuevamente en la idea de que es el propio campo el que crea

¹Obsérvese que el título de este último trabajo *Self-focusing of optical beams* contrasta casi humorísticamente con *Self-trapping of optical beams*, título del trabajo de Chiao *et al.*

su guía de ondas y en el hecho de que en el caso de no linealidades saturables hay un máximo para el índice de refracción inducido por la fibra [20]. Fue en esta línea donde se obtuvieron los resultados más prometedores en años sucesivos. En 1992 se demostró que los materiales fotorrefractivos pueden soportar solitones espaciales [21], aunque sólo *quasi*-estacionarios, y al año siguiente se obtuvieron experimentalmente [22], presentando estos materiales la ventaja de que se podían obtener los solitones con bajas intensidades. En años siguientes se predijo numérica y teóricamente la existencia de solitones espaciales estacionarios sobre materiales fotorrefractivos en presencia de un campo externo y se denominó a estos solitones *screening solitons* [23, 24, 25]. Nuevamente, el sistema se modelizó mediante una ecuación del tipo Schrödinger no lineal que presentaba no linealidades con formas más complejas que en el caso autoenfocante. La observación experimental de solitones en este tipo de sistemas está referenciada en [26, 27]. Otro tipo de solitones sobre materiales fotorrefractivos fueron los solitones fotovoltaicos. En la generación de estos solitones deja de utilizarse un campo externo y la modificación del índice de refracción se debe al efecto fotovoltaico en un material fotorrefractivo. Este tipo de solitones fueron predichos teóricamente en la ref. [28], donde se demuestra que, además de los solitones convencionales en medios autoenfocantes introducidos hasta este punto, existían otro tipo de solitones espaciales, los solitones oscuros, de los que hablaremos más adelante. Este tipo de solitones oscuros sobre materiales fotorrefractivos debido al efecto fotovoltaicos fueron observados experimentalmente durante 1995 [29, 30].

Mención aparte merecen una nueva clase de solitones, basados en mecanismos muy diferentes a los obtenidos sobre medios saturables, fotorrefractivos o autoenfocantes, denominados solitones cuadráticos. Aunque fueron predichos en los años setenta del pasado siglo, no fue hasta 1995 cuando fue estudiada en detalle su estabilidad [31] y se obtuvieron experimentalmente en una y dos dimensiones [32, 33]. En la presente tesis nos vamos a ocupar de sistemas que puedan modelizarse mediante una ecuación de Schrödinger no lineal con una no linealidad dependiente de la intensidad del campo. Dado que la modelización de los solitones en medios cuadráticos no se reduce a una ecuación de este tipo, no nos ocuparemos de solitones de este tipo.

Hasta este punto, todos los solitones considerados son *escalares*, ya que al modelizarlos se puede considerar que la polarización permanece constante durante la propagación, de modo que se desprecia el carácter vectorial de la onda electromagnética (para más detalles véase apéndice A). En un medio lineal y homogéneo los dos estados de polarización perpendiculares son independientes. En el caso no lineal, sin embargo, estos dos estados no son independientes a lo largo de la propagación. En el año 1974 se obtuvieron las condiciones que se deben cumplir para poder asumir que un haz con dos componentes con polarizaciones perpendiculares se guíe sin difractar [34]. Se denominó a estos modos autoconfinados solitones vectoriales o de Manakov. En términos de auto-consistencia se puede entender que cada polarización es el modo fundamental de una guía generada por ambas componentes y el estudio de las soluciones estacionarias se realizó a finales de los años ochenta [35]. Sin embargo, no fueron observados experimentalmente hasta la última década del pasado siglo [36], cuando se obtuvieron los materiales capaces de cumplir con las condiciones fijadas por los modelos teóricos. Adicionalmente, se obtuvieron nuevos solitones vectoriales en los que se permitía el intercambio de potencia entre

ambas componentes a lo largo de la propagación [37]. En ambos casos se observó el caso unidimensional dentro de una guía de ondas plana. Este tipo de solitones se puede modelizar mediante un sistema de dos ecuaciones diferenciales en derivadas parciales no lineales tipo Schrödinger, donde la no linealidad implica las intensidades de ambas polarizaciones y por tanto, en esta tesis no nos vamos a ocupar de ellos. Nótese que los solitones cuadráticos son un tipo de solitones vectoriales pues involucran más de una polarización [8].

Otro tipo de solitones se obtuvo a partir de haces en los que la variación de la amplitud en cada punto no estaba correlacionada con la de otros puntos, de manera que la difracción sigue mecanismos muy diferentes a los convencionales. A partir de este tipo de haces incoherentes se obtuvieron experimentalmente los solitones incoherentes por primera vez en 1996 [38], en los que, en definitiva, la fase variaba de manera aleatoria en el tiempo y en el espacio, llegándose incluso a guiar luz blanca, incoherente en el espacio y en el tiempo [39]. Los modelos teóricos que explicaban estos solitones incoherentes, basados en un conjunto infinito de ecuaciones tipo Schrödinger no lineal o basados en aproximaciones multimodales, fueron desarrollados en diferentes trabajos, como por ejemplo en las refs. [40, 41].

Hasta ahora sólo hemos hablado de solitones espaciales que aparecen como concentraciones de luz en una cierta región del espacio y que se deben a la compensación de un efecto de autoenfoco (originado por diferentes mecanismos físicos) y la difracción del haz luminoso. Sin embargo, ya en los años setenta del pasado siglo se introdujo otro tipo de solitones de naturaleza completamente diferente a los introducidos hasta aquí, los cuales se pueden obtener en medios en los que la no linealidad es tal que la luz reduce el índice de refracción en los puntos iluminados. En el caso lineal, si se propaga un haz uniforme espacialmente con una zona central de baja o nula iluminación, este mínimo de intensidad tenderá a difractar al igual que lo hace un haz Gaussiano. Sin embargo, en el caso no lineal, cuando la no linealidad es desenfocante, el índice de refracción será menor en las zonas iluminadas, mientras que en la zona oscura permanecerá invariable. Por lo tanto, la luz tenderá a ocupar las zonas con mayor índice, compensando el efecto de difracción y formando un *solitón oscuro*, que se propagará sin deformarse [8, 42]². Solitones oscuros tipo *soliton stripes* o redes de solitones fueron observados experimentalmente en dos dimensiones a principios de la última década del siglo pasado [44, 45, 46]. Algunos años más tarde, conforme se desarrollaron los experimentos para solitones brillantes antes descritos, también se obtuvieron los solitones oscuros en materiales fotorrefractivos [47], fotovoltaicos [29] y los *screening solitons* [48, 49]. Todos estos solitones oscuros son en definitiva solitones unidimensionales y presentan un punto (o línea) en el que la intensidad se anula y el campo a ambos lados presenta un desfase de π radianes. Si la intensidad no va a cero se habla de solitones grises, y en este caso la diferencia de fase es diferente de π . En el caso de oscuros o grises, si no hay diferencia de fase a ambos lados, a lo largo de la propagación se separan desde el centro dos solitones oscuros que se repelen y este efecto, conocido como *Y-junctions*, ha sido observado nuevamente en medios fotovoltaicos [30] o en el caso de *screening solitons* [50].

²Como se describe en estas referencias, para que el solitón oscuro sea estable es necesario que el *background* (la zona con iluminación constante) sea estable. Sólo como curiosidad destacamos aquí que, a principios de este siglo, se demostró que utilizando haces incoherentes es posible generar un *background* estable en medios autoenfocantes, sobre el que propagar solitones anti-oscuros (*antidark-solitons*) [43].

Los solitones oscuros bidimensionales en medios homogéneos fueron objeto de estudio únicamente teórico hasta los primeros años de la última década del siglo pasado. Este tipo de soluciones presenta una singularidad de fase en el punto donde se sitúa el cero de intensidad correspondiente al solitón oscuro, donde se anula tanto la parte real como la parte imaginaria del campo, y la fase experimenta incrementos de $2\pi l$ con $l \in \mathbb{Z}$, si se evalúa en un circuito cerrado en torno a dicho punto. Es decir, cerca de dicho punto, el campo es proporcional a $e^{il\theta}$ donde θ es el ángulo azimutal en coordenadas cilíndricas. Si $l = \pm 1$, cuando se evalúa la fase a lo largo de líneas rectas que pasan por el origen, ésta experimenta un salto de π en el origen, al igual que sucedía en el caso de soluciones unidimensionales. Al entero l se le denomina *carga topológica* de la singularidad de fase y se denomina *vórtice* a cualquier solitón espacial (oscuro o brillante) que presente una singularidad de fase de carga arbitraria, si bien dado que en medios homogéneos sólo son estables en el caso desenfocante, es común que se identifiquen con los solitones oscuros bidimensionales. De hecho, en general, un vórtice es cualquier onda que posea una singularidad de fase y un flujo rotacional en torno al punto singular [8, 42, 51, 52]. Estas estructuras de fase aparecen en múltiples ramas de la física. Los estudios teóricos y numéricos permitieron estudiar su comportamiento cerca de la singularidad y obtenerlos numéricamente [53], o predecir su estabilidad [54]. Los vórtices fueron observados experimentalmente a principios de la década pasada en medios desenfochantes [55, 56], en no linealidades desenfochantes pero saturables [57, 58, 59], medios fotorrefractivos [47], fotovoltaicos [60], o como *screening solitons* [61]. Aunque todos estos solitones oscuros tenían carga topológica $l = \pm 1$, también se propusieron vórtices con cargas topológicas $l \neq \pm 1$, los cuales fueron obtenidos numéricamente y se propuso una aproximación analítica a su forma funcional [62]. Sin embargo, se demostró que un vórtice de carga $l \neq \pm 1$ era menos favorable energéticamente que l vórtices de carga unidad. La desintegración de vórtices con cargas superiores en vórtices de carga unidad fue observada experimentalmente con posterioridad [63].

Los vórtices en medios autoenfocantes homogéneos fueron predichos teóricamente en la década de los años ochenta y se denominan vórtices brillantes. Sin embargo, los estudios de estabilidad mostraron que estos solitones eran inestables incluso en medios saturables, por lo que presentaban algún otro tipo de inestabilidad, además de la inestabilidad por colapso. La obtención de estas soluciones y su inestabilidad puede consultarse en la ref. [64], donde se completaron trabajos de la década de los años ochenta de los mismos autores. La inestabilidad que presentan este tipo de soluciones se conoce como *inestabilidad azimutal*, y está asociada a perturbaciones a lo largo de la coordenada azimutal θ . Además, mientras que para la inestabilidad por colapso se pudo establecer un criterio, el criterio de Vakhitov-Kolokolov [7, 52], para este tipo de inestabilidad no se ha obtenido ningún criterio universal, lo que hace necesario realizar un estudio numérico de estabilidad lineal para cada sistema, como los ofrecidos en las refs. [65, 66, 67]. Por lo tanto, los estudios teóricos y experimentales se encaminaron hacia el estudio de nuevos sistemas donde se pudieran estabilizar este tipo de soluciones, como veremos más adelante.

Por otra parte, al mismo tiempo que se estudiaban los vórtices brillantes, se introdujeron otro tipo de soluciones caracterizadas, al igual que estos, por la presencia de anillos brillantes de intensidad. Estas soluciones podían presentar un máximo en el centro [68, 69] o bien un punto oscuro [70, 71] y, al igual que los vórtices

brillantes, también mostraron inestabilidad azimutal. Las soluciones con un máximo de intensidad en el centro fueron predichas y obtenidas numéricamente en el decenio de los sesenta [72].

La búsqueda de medios o sistemas donde los vórtices brillantes fueran estables y, por tanto, observables experimentalmente, siguió diversas líneas de investigación. Por un lado, se obtuvieron resultados en medios cuadráticos [73, 74, 75, 76] y se realizaron estudios sobre vórtices vectoriales, multimodales y otros solitones vectoriales y multimodales con estructuras de fase complejas [77, 78, 79], de los que no nos vamos a ocupar en la presente Tesis. Por otro lado, se estudiaron sistemas escalares con no linealidades complejas. En este sentido, se intentó estabilizar vórtices en sistemas que alternaban secciones con no linealidad autoenfocante y desenfocante a lo largo de la coordenada axial [80] o se propusieron vórtices estables en medios con no linealidades cúbico-quínticas (véase apéndice A), predichos teóricamente por el grupo del Prof. Michinel de Ourense [81]. En estos sistemas se obtuvo una transición, dependiente de la potencia, desde vórtices inestables en un régimen de autoenfoco a vórtices estables en un régimen desenfocante [82, 83] y se obtuvieron analogías formales con el comportamiento de un fluido [84].

Otra línea de investigación que perseguía la estabilización de vórtices brillantes combinó resultados provenientes del estudio de la interacción entre solitones con los estudios del momento angular del sistema y de los mecanismos de la inestabilización de vórtices. Veremos que esta línea llevó a la obtención de solitones con estructuras de fase no triviales, como los *clusters de solitones* o los *necklace beams*. Pero para entender estos solitones, es necesario comentar los estudios realizados sobre interacciones entre solitones, sobre el momento angular y la desintegración de vórtices.

La idea de interacción entre solitones está incluida en el propio concepto de solitón desde los primeros artículos de los años setenta, ya que estas soluciones no difractivas eran equivalentes en muchos aspectos a partículas [8, 9]. El interés en sus interacciones en una y dos dimensiones es evidente desde el punto de vista de la manipulación de la luz y sus posibles aplicaciones tecnológicas, por lo que los estudios relacionados con las interacciones entre solitones fueron, en muchos casos, la continuación lógica de las investigaciones sobre existencia o estabilidad de solitones. Se puede entender la interacción de solitones en términos de interferencia: cuando dos solitones en un medio autoenfocante interfieren constructivamente, para lo cual es necesario que compartan la misma fase, en la zona donde ambos se superponen la amplitud se ve incrementada. Debido a la no linealidad en esta zona el índice de refracción aumenta, con lo que más luz tiende a concentrarse en esta zona. De este modo, el efecto global es que es como si los solitones con la misma fase tendieran a atraerse. Si ambos solitones están en oposición de fase la interferencia es repulsiva, por lo que el efecto es el contrario y los solitones se repelen [8]. Si la fase relativa es un valor entre 0 y π , la interferencia es más complicada, y en general se produce un trasvase de energía entre ambos solitones [8]. Obviamente, en un medio desenfocante el escenario es justo el contrario. Si los solitones son incoherentes, entonces la interferencia es siempre constructiva, pues sólo depende de la intensidad, por lo que los solitones espaciales siempre se atraen.

En medios autoenfocantes en una dimensión, dado que el sistema es integrable, todas las interacciones (por ejemplo, las colisiones de solitones) son elásticas, es decir, se conserva el número de solitones, la energía y los solitones recuperan sus

velocidades previas a la colisión. En el caso de que los solitones estén en fase pueden formarse estados ligados donde los solitones se combinan y separan periódicamente [8]. Interacciones en medios autoenfocantes unidimensionales, como repulsión y atracción en función de la fase relativa o división de un solitón en dos solitones repulsivos, fueron observadas experimentalmente a principio de la década de los noventa [17, 18, 19].

Las interacciones entre solitones en dos dimensiones sólo podían ser observadas experimentalmente en el caso de solitones espaciales estables, por lo que su observación tuvo que esperar hasta la obtención de estos en medios saturables, fotorrefractivos, etc. según hemos visto con anterioridad. En este caso, la interacción debía ser inelástica debido a la no integrabilidad del modelo, y efectos como la fusión, fisión o aniquilación de solitones fueron predichos teórica y numéricamente a principios de la década de los noventa [85, 86]. Estos estudios utilizaron nuevamente el concepto de guía autoinducida y de las condiciones para el guiado de un solitón en la guía generada por otro, con lo que, por ejemplo, si la guía puede guiar más de un modo ambos pueden fundirse. Estas predicciones fueron seguidas por observaciones experimentales en medios saturables [87], en medios fotorrefractivos en el caso incoherente [88], coherentes en una [89, 90] o dos dimensiones [91, 92]. También se demostraron interacciones anómalas o repulsivas en el caso incoherente [93]. Pero las interacciones entre solitones no tenían por qué reducirse a choques o fisiones, ya que si existía una 'fuerza' de atracción entre ellos, era posible pensar en trayectorias más complejas. De este modo se obtuvieron trayectorias espirales, en las que dos solitones siguen trayectorias curvadas semejantes a las de los objetos celestiales o las partículas cargadas. Este tipo de interacciones también se estudiaron teórica y numéricamente desde principios de la década de los noventa [94, 95, 96]. Posteriormente se obtuvo experimentalmente en medios fotorrefractivos que las trayectorias de los solitones, que en ausencia del otro solitón serían líneas rectas, pueden curvarse. De este modo, un solitón puede alejarse de otro indefinidamente, acercarse a otro hasta fundirse con éste o bien atraparse mutuamente con otros solitones en una trayectoria espiral [97]. En este último caso es necesario que la fuerza de atracción compense de modo exacto la 'fuerza centrífuga' debida a la rotación. Este sistema fue estudiado en profundidad desde el punto de vista teórico un año después [98].

El estudio de las interacciones entre solitones en dos dimensiones, y en particular de este tipo de trayectorias espirales, conectó directamente con las otras dos líneas de investigación que fueron la base de los *clusters de solitones* o los *necklace beams*, es decir, el estudio del momento angular y de la desintegración de vórtices. De hecho, este tipo de trayectorias espirales ya habían sido observadas en el estudio de la ruptura de vórtices inestables, en particular, al estudiar la inestabilización de un vórtice con carga topológica $l = 1$, ligeramente elíptico y por tanto sin simetría rotacional, en dos solitones en oposición de fase que se alejaban siguiendo trayectorias ligeramente curvadas [99]. En el caso de cargas superiores se observó la generación de más solitones con distintas estructuras de fase relativa e interacciones más complejas [87]. La inestabilización de vórtices de distinta carga topológica también fue observada experimentalmente en la referencia [100]. En estos trabajos, dado que el vórtice inicial tenía momento angular coincidente con su carga topológica, se relacionaron las diferentes trayectorias con la conservación del momento angular a lo largo de la evolución. Un estudio detallado de la relación entre la carga

topológica del vórtice inicial y el número y fase de los solitones en que se rompía éste fue desarrollado en las refs. [66, 67]. Obviamente los trabajos sobre ruptura de solitones debían estar relacionados con los trabajos sobre movimientos espirales de conjuntos de solitones espaciales. En particular, las trayectorias espirales obtenidas en [97] y predichas de modo teórico a principio de la década de los noventa [94], debían estar relacionadas con un momento angular existente en el sistema compuesto por dos o más solitones, aunque individualmente no presentaran carga topológica³.

Los conceptos anteriores sobre interacción entre solitones en medios bidimensionales homogéneos, momento angular del vórtice y trayectorias espirales fueron utilizados para sugerir nuevos tipo de soluciones observables en medios autoenfocantes o en medios saturables: los *optical necklace beams* y los *soliton clusters*. Dado que, como hemos visto, en medios autoenfocantes tanto los vórtices como soluciones con anillos de intensidad pero con carga topológica nula presentaban inestabilidad azimutal, se intentó estabilizar los vórtices introduciendo una modulación azimutal de la intensidad. Los *optical necklace beams*, por lo tanto, estaban compuestos por conjuntos de *quasi*-solitones o 'perlas'⁴ situados formando un collar, y de ahí el nombre de este tipo de soluciones, que fueron predichas teórica y numéricamente en la ref. [103]. En este trabajo la diferencia de fase entre 'perlas' vecinas era de π radianes, por lo que, debido a la repulsión, los collares tendían a ensancharse - difractar - lentamente. La condiciones para reducir, invertir o eliminar este ensanchamiento fueron estudiadas en [104], donde se obtuvieron numérica y semi-analíticamente soluciones *quasi*-estacionarias. Posteriormente se estudiaron *optical necklace beams* tipo vórtice, es decir, en los que la fase se modulaba de modo que la solución presentaba carga topológica no nula [105], cuya dinámica mostró efectos normalmente relacionados con sólidos rígidos, como por ejemplo una rotación del 'collar' relacionada con el momento angular de la solución⁵. Resultados similares se obtuvieron desde un planteamiento ligeramente distinto a principios del presente siglo: dado que los solitones interaccionan en función de su fase y grupos de solitones pueden presentar momento angular o fuerzas centrífugas, se planteó que podían encontrarse configuraciones de solitones con cierta estabilidad. Estas configuraciones fueron bautizadas como *soliton clusters*, y a diferencia de los *optical necklace beams*, están formados por solitones estacionarios [107, 108], por lo que para que estos sean estables fueron propuestos en medios saturables. Los *soliton clusters* presentan momento angular no nulo, y al igual que los *optical necklace beams* experimentan rotación del anillo de solitones [107]. En esta línea, el estudio de las interacciones entre solitones permitió, además de la obtención de estas soluciones *quasi*-estacionarias, estudiar cuándo los solitones se alejan indefinidamente o cuando convergen a un único punto y eventualmente se funden para recomponer un

³Tal y como se apunta en la ref. [52] se distingue entre el momento angular de espín (asociado a la polarización de la luz) y el momento angular orbital [101, 102], asociado a la estructura espacial del haz. Sin embargo, es habitual el uso del concepto de momento angular de espín para referirse al momento asociado a un conjunto de solitones interaccionando (*spinning solitons*) y este concepto no debe confundirse con el asociado a la polarización.

⁴En los trabajos sobre *optical necklace beams* no se utilizó el término solitón, sino el término 'perla', pues los componentes de este tipo de collares no eran estables aisladamente y su potencia individual era inferior a la de un solitón estacionario.

⁵Esto estaba en relación con un resultado obtenido teórica y numéricamente algunos años antes, cuando se propuso la existencia de solitones *quasi*-estables con anillos de amplitud y cargas topológicas no nulas que tendían a mostrar rotación de la amplitud incluso cuando el haz de entrada estaba en reposo [106].

vórtice [109]. Finalmente, una versión con estructuras de fase más compleja de estas soluciones son los azimutones [110]. Adicionalmente, se profundizó en la analogía entre solitones en partículas, desarrollándose estudios de potenciales efectivos de interacción entre solitones coherentes [111] o incoherentes [112], o estudios sobre la conservación del momento angular [101, 102, 113, 114, 115, 116].

Al margen de los *clusters de solitones* o los *necklace beams*, una línea de investigación alternativa que permitió obtener solitones estables con estructuras de fase no triviales fue el estudio de sistemas donde el índice de refracción presenta una modulación periódica, lo cual afecta a la difracción y modifica la propagación dinámica de la luz y la localización de soluciones (véase apéndice A). Como veremos, el uso de estos sistemas periódicos permitió obtener, por ejemplo, vórtices discretos estables. Para entender este tipo de solitones vamos a introducir previamente los resultados obtenidos en las redes de guías de onda (*waveguide arrays*), que son, en definitiva, sistemas periódicos unidimensionales (para una revisión de los resultados en redes de guías de onda, véase [117, 118]).

En estos sistemas se predijo la existencia de solitones, conocidos como solitones discretos, a final de la década de los ochenta [119]. En este trabajo se modelizó dicho sistema como un conjunto de ecuaciones discretas acopladas, cada una de las cuales describía la propagación del campo en una de las guías de ondas de la red. La interacción con las guías vecinas se modelizó mediante un término de acoplamiento en el que se consideraba sólo las guías más cercanas (aproximación de enlace fuerte) y se incluyó un término de autointeracción dependiente del módulo del campo en cada guía. Este sistema, conocido como la ecuación discreta de Schrödinger no lineal, puede reducirse a un sistema continuo para la envolvente del campo en cada guía, el cual puede presentar soluciones estables tipo solitón espacial, conocidas como solitones discretos [119]. En los siguientes años un gran desarrollo teórico permitió predecir otros tipos de solitones, como por ejemplo solitones discretos antisimétricos (con diferencias de fase de π radianes entre guías vecinas) en medios desenfoantes [120]. Asimismo se estudió la inestabilidad modulacional en medios discretos, su relación con la existencia de solitones brillantes u oscuros, la dinámica y las interacciones de los solitones en las redes de guías de ondas [121, 122].

Pese a la existencia de resultados teóricos, hubo que esperar hasta el final de la década para observarlos experimentalmente [128] y a partir de aquí se estudiaron multitud de propiedades relacionadas con estos solitones y su dinámica [129]. Para entender este tipo de solitones es necesario entender los efectos de la difracción discreta, ya que como en el caso de los solitones espaciales en medios homogéneos, estas soluciones localizadas aparecen cuando se compensa esta difracción [117]. Al igual que en el caso lineal existen dos regímenes de difracción, normal y anómala, dependiendo de las condiciones del haz de entrada, por lo que el estudio de la difracción no lineal tuvo una gran repercusión, con trabajos teórico-experimentales sobre oscilaciones de Bloch [130, 131] o gestión de la difracción [132]. Esto se tradujo en el caso no lineal en que fue posible observar experimentalmente efectos autoenfocantes y desenfoantes [132, 133], con lo que en un mismo material se pueden observar solitones discretos oscuros o brillantes.

Por otra parte, se estudió la formación de solitones en medios donde el índice de refracción varía de manera periódica en la dirección de propagación [123, 124]. Un ejemplo de estos medios son las fibras conocidas como *fiber Bragg gratings*. Los solitones que se forman en estos medios se conocen como *Bragg Solitons* o

gap solitons. Se demostró teóricamente utilizando la teoría de modos acoplados que, debido a la periodicidad, en estos casos existía una estructura de bandas de conducción y prohibidas, y que los solitones se obtenían en las prohibidas. Más adelante se estudió la existencia de estos solitones en bandas superiores [125] y la propagación de estos solitones cuando la periodicidad del medio no se encuentra en la dirección de propagación, sino que el haz se lanza con un cierto ángulo respecto a la *fiber Bragg grating* o incluso perpendicularmente a la misma. Se llamó a estos solitones, que también aparecían en la banda prohibida, *spatial gap solitons* [126] y, evidentemente, están muy relacionados con los solitones discretos en *waveguide arrays*. En estos trabajos los solitones se movían con cierta velocidad transversal, de modo que en un trabajo posterior se estudió el control de la velocidad e intensidad de un *gap soliton* espacial en redes ópticamente inducidas unidimensionales [127], las cuales serán introducidas más adelante.

La extensión a sistemas periódicos bidimensionales se basó en la tecnología desarrollada para obtener solitones en medios fotorrefractivos homogéneos. A principios del siglo XXI fueron predichos teóricamente [134] y se obtuvieron experimentalmente solitones espaciales discretos estables en sistemas periódicos bidimensionales [135, 136, 137]. Para ello se utilizaron redes ópticamente inducidas, donde la red es creada por la modificación del índice de refracción del medio mediante un haz más débil que se propaga con la polarización ortogonal al haz que forma el solitón. Este tipo de soluciones también fueron propuestos teóricamente y numéricamente en modelos discretos de cristales fotónicos [138, 139] y en modelos continuos de cristales fotónicos [140], de redes ópticamente inducidas [141, 142, 143, 144, 145] y de fibras de cristal fotónico [146] (para una definición de fibras de cristal fotónico, véase apéndice A). En esos años, los vórtices discretos fueron igualmente predichos teóricamente y numéricamente en modelos basados en la ecuación de Schrödinger no lineal discreta [147, 148, 149, 150, 151]⁶. Asimismo se obtuvieron vórtices discretos en modelos continuos de redes ópticamente inducidas [141, 143, 144, 145, 153]⁷ o de fibras de cristal fotónico [154]. Estos vórtices fueron observados experimentalmente en redes ópticamente inducidas [155, 156, 157]. En la ref. [158] se estudió la relación entre estos vórtices discretos y los *soliton clusters*, ya que aquellos pueden considerarse una variación de estos últimos, con la restricción de que, en los primeros, los solitones individuales deben estar situados en ciertas posiciones en la red. De este modo se utilizó la teoría desarrollada en el ámbito de los *soliton clusters* para predecir nuevos tipos de solitones simétricos y asimétricos con estructuras de fase no triviales. Además se encontró un efecto basado en la asimetría entre solitones individuales: si la amplitud de un solitón era algo inferior a la de otro en la posición opuesta en una red cuadrada, se producía una variación de la fase que finalmente podía dar lugar a una inversión de la carga topológica del vórtice. Este efecto se conocía como *charge flipping*. Este trabajo se basó adicionalmente en estudios teóricos previos de la interacción de solitones en función de la modificación de la amplitud del solitón individual debida a la presencia de otros solitones [159, 160, 161]. En estos trabajos se obtuvo las condiciones que debía cumplir

⁶Téngase en cuenta la ref. [152] al considerar la ref. [149].

⁷Algunos de estos trabajos, en particular los de Baizakov *et al.*, fueron desarrollados o son de aplicabilidad en el campo de los condensados de Bose-Einstein (BEC). Como veremos más adelante, en el estudio de los BEC se modeliza la dinámica de condensados de átomos fríos mediante una ecuación de Schrödinger no lineal, la ecuación de Gross-Pitaevskii.

la fase para obtener propagación estable de superposiciones de solitones o *soliton clusters*, las cuales se satisfacían trivialmente para solitones en fase o en oposición de fase.

En los últimos años, en sistemas periódicos han sido encontrados una gran diversidad de solitones estables, como por ejemplo los dipolos, parejas de solitones en oposición de fase, que fueron estudiados numérica y teóricamente en redes ópticamente inducidas [143, 162, 163] y en fibras de cristal fotónico [164], y obtenidos experimentalmente en el primer sistema [163]. Dipolos y conjuntos de tres solitones fueron estudiados en la ref. [165] utilizando la ecuación de Schrödinger no lineal discreta. En la ref. [162] se introdujeron también cuadrupolos, es decir, conjuntos de cuatro solitones en oposición de fase. Adicionalmente se estudiaron complejos de solitones en oposición de fase con diversas estructuras espaciales, por ejemplo con la forma de la letra Y mayúscula [166]. Otro tipo de solitones, relacionados con los dipolos, son los *soliton trains*, formados por redes de solitones extendidas en una de las direcciones espaciales [167, 168]. Estos se obtuvieron al lanzar un haz semejante a un *soliton stripe* (es decir, cuya fase experimenta un salto de π radianes a ambos lados del máximo de intensidad) en una red ópticamente inducida y estudiando las condiciones para obtener formación de un solitón o difracción, al igual que se hacía en las redes de guías de onda [167] o bien, estudiando la existencia y estabilidad de este tipo de soluciones en función de la fase relativa entre solitones vecinos [168]. Adicionalmente se estudió la posibilidad de mover este tipo de estructuras a lo largo de la red [169]. En la ref. [170] se estudiaron soluciones semejantes a los *soliton trains* en una dimensión, y se relacionaron con ondas de Bloch no lineales truncadas en el caso unidimensional. Al extender este tipo de soluciones a dos dimensiones se observó que eran semejantes a otro tipo de redes de solitones, los *pixel solitons*, de los que hablaremos más adelante y al aplicarlas a ondas de materia en condensados de Bose-Einstein se obtuvieron redes de solitones con estructuras de fase no triviales [171].

Finalmente, se observaron experimentalmente distintos tipos de solitones localizados en redes hexagonales ópticamente inducidas [172], y en particular se observaron estructuras de vórtices conocidas como multivórtices [173].

Otra técnica para estabilizar solitones con fases no triviales utilizaba otro tipo de redes, las inducidas por haces de Bessel. En este tipo de sistemas se estabilizaron solitones rotantes como los *necklace beams* [174], dipolos rotantes [175], otros complejos de solitones en oposición de fase [176] y vórtices con invariancia rotacional [177] o discretos [178]. Solitones discretos en redes de Bessel fueron observados experimentalmente en las refs. [179, 180] mientras que solitones rotantes en redes de este tipo se presentaron en [180].

Como hemos visto más atrás, en medios homogéneos se estudiaron soluciones con anillos concéntricos de intensidad y momento angular nulo. Estas soluciones fueron identificadas con excitaciones del solitón fundamental [68, 72]. Este concepto fue extendido a los medios discretos valiéndose de la teoría de bandas desarrollada para el caso lineal y utilizando conceptos de la teoría matemática de bifurcaciones [181]. Se predijeron solitones discretos en bandas superiores desde el punto de vista teórico y numérico [142]. La existencia y estabilidad de vórtices en bandas superiores fue estudiada en 2004 [182] y fueron demostrados experimentalmente durante el año siguiente [183].

Al margen de las soluciones con fase no trivial en medios periódicos presentadas, como los vórtices o los dipolos, a mitad de la década de los noventa se inició el interés por el estudio de la propagación en paralelo de redes solitones espaciales en medios homogéneos. En los primeros trabajos, realizados en sistemas diversos como cavidades ópticas, medios cuadráticos, etc., se bautizó a este tipo de estructuras como *pixel solitons* [184, 185, 186, 187, 188, 189]. El problema de la inestabilidad modulacional y de la interacción entre solitones hizo que hasta 2002 no fueran observados experimentalmente en medios fotorrefractivos, para lo que se utilizó tanto haces incoherentes [190] como coherentes [191]. En ambos trabajos se estudió, no sólo cómo usar estas estructuras para guiar otro haz a distinta longitud de onda, sino también cómo modificar la red de solitones mediante un haz adicional, produciendo fusiones o movimientos de los solitones que forman la red. Este tipo de estructuras, sin embargo, requerían que los solitones en la red interaccionaran débilmente, por lo que debían estar suficientemente separados. En trabajos posteriores se obtuvo numérica y experimentalmente que, en el caso coherente, se obtenían estructuras más estables y con menores distancias entre solitones si, en vez de utilizar redes de solitones con la misma fase relativa, se utilizaba redes de solitones en oposición de fase [192]. Al igual que las redes ópticamente inducidas, los *pixel solitons* fueron utilizados para generar redes ópticas bidimensionales sobre las que generar los solitones discretos descritos más arriba, como por ejemplo los *soliton trains* [167]. La diferencia entre los *pixel solitons* y las redes ópticamente inducidas es que, mientras que los primeros se obtienen para intensidades elevadas para las que se forman los solitones individuales que conforman el *pixel soliton*, las redes ópticamente inducidas se obtienen a intensidades pequeñas. También fueron estudiadas las deformaciones o dislocaciones de un *pixel soliton* debido a las posibles aplicaciones tecnológicas de estos efectos [193] así como la interacción entre *soliton stripes* y *pixel solitons* formados por haces incoherentes, donde se obtuvo un nuevo tipo de solitón compuesto por acoplamiento entre la red no lineal y el haz localizado [194]. Finalmente, se relacionó estas soluciones con ondas de Bloch no lineales, se obtuvieron experimentalmente diferentes tipos de estructuras extendidas, se estudiaron estructuras de este tipo en redes hexagonales y se obtuvieron estructuras más complejas, como redes de vórtices [195, 196].

Muchos de los resultados obtenidos suponían grandes avances en la manipulación controlada de la luz. Se había podido localizar luz dentro de diferentes sistemas en una y dos dimensiones, se había logrado hacer interaccionar los condensados de luz entre sí, logrando fusiones, fisiones y movimientos en trayectorias complicadas, se habían obtenido redes de solitones sensibles a la introducción de un haz externo, etc. Para muchos de estos efectos se propusieron algunas aplicaciones tecnológicas de las que vamos a hablar a continuación.

La aplicación fundamental perseguida en muchos trabajos fue reproducir dispositivos existentes en la actualidad con tecnologías electrónicas o mixtas (electrónicas y ópticas) en un dispositivo únicamente óptico. Los solitones brillantes unidimensionales fueron propuestos con este fin [16] y especialmente las interacciones estudiadas se propusieron como posibles dispositivos capaces, por ejemplo, de realizar la conmutación entre dos estados (*switching*) [17, 18, 85, 86]. Algunos autores propusieron dispositivos específicos basados en las colisiones entre solitones espaciales [197]. Este tipo de dispositivos también se propusieron en sistemas con solitones oscuros en una y dos dimensiones, del tipo *soliton stripe* [20, 44].

Incluso se propusieron puertas lógicas *XOR* y *AND* basadas en solitones oscuros unidimensionales y bidimensionales como extensión de este último trabajo [198]. Finalmente, en relación con los solitones espaciales y sus interacciones, se propuso una serie de puertas lógicas basadas en las interacciones de solitones espaciales tridimensionales o *light bullets* [199]. Más adelante se reprodujeron las interacciones en medios autoenfocantes en los nuevos medios, como los fotorrefractivos, proponiéndose aplicaciones tecnológicas como las anteriores tanto en una como en dos dimensiones [89, 90, 91, 92, 93]. También se propusieron acopladores basados en solitones incoherentes [200].

Por otra parte se exploró la posibilidad de utilizar solitones para guiar sobre ellas otros haces, y en por ejemplo, se obtuvieron experimentalmente interconexiones en Y (*Y-junction*) basadas en la interacción entre solitones oscuros [30, 50, 201, 202]. También se propusieron aplicaciones basadas en las posibilidades de guiado mediante el uso de solitones brillantes unidimensionales [203] y bidimensionales [204, 205]. Igualmente los solitones oscuros bidimensionales fueron propuestos para guiado de otras ondas o control de un solitón oscuro bidimensional mediante otro haz más débil [55, 198, 206, 207]. Finalmente, se propuso el control y guiado en redes de solitones oscuros unidimensionales [208], un tipo de solitón del que no hemos hablado más arriba y que está relacionado con las redes de solitones brillantes o *pixel solitons*.

Posteriormente, el estudio de la inestabilización de estos *soliton stripe* y la formación correspondiente de vórtices permitió suponer que se podría utilizar para implementar puertas lógicas o interconexiones [56]. Sin embargo, en los trabajos sobre desintegración de vórtices brillantes, trayectorias espirales, etc. no se encuentran fácilmente referencias a posibles aplicaciones tecnológicas. Tampoco se encuentran muchos comentarios sobre aplicaciones en los trabajos sobre *necklace beams* y *soliton clusters*.

Por otra parte, los solitones discretos en redes de guías de ondas fueron propuestos como fundamento para la obtención de dispositivos todo ópticos, como interruptores y otros. En particular, se estudió su dinámica, sus interacciones y cómo moverlos a lo largo de la red de guías de ondas [122, 129], se estudió los regímenes de difracción en función de las condiciones de entrada [133] o se estudiaron sistemas con difracción gestionada [132], y en todos estos casos se comentaron las posibles aplicaciones tecnológicas de los resultados. También se propusieron interruptores, enrutado, funciones lógicas, etc. basados en solitones discretos en redes de guías de onda [209, 210]. Para una revisión de las aplicaciones tecnológicas basadas en redes de guías de onda véase [118].

En otros sistemas periódicos como las fibras de cristal fotónico, las aplicaciones tecnológicas estaban muy relacionadas con el caso lineal, por lo que eran buenos candidatos para el control completamente óptico de la señal [138, 139], en particular por la existencia de bandas de propagación permitidas y prohibidas. Sin embargo, en los trabajos sobre vórtices discretos u otras estructuras de solitones en redes ópticamente inducidas hay pocas referencias a las posibles aplicaciones tecnológicas de estos. El escenario es completamente diferente en relación a los *pixel solitons*, donde prácticamente todos los autores hacen referencias a sus posibles aplicaciones para el almacenamiento y tratamiento de la información en dispositivos completamente ópticos [184, 185, 186, 187, 189, 190, 191, 192].

Por último, gran parte de los trabajos sobre solitones en medios periódicos, en particular en redes ópticamente inducidas o redes de Bessel, hacen referencias no sólo a su aplicabilidad en la óptica no lineal, sino también en el campo de los condensados de Bose-Einstein. Esto se debe a que el modelo teórico es formalmente idéntico, esto es viene dado por una ecuación de Schrödinger no lineal⁸, por lo que muchos de los resultados obtenidos en uno de los campos son de aplicabilidad prácticamente directa en el otro. Por lo tanto, los resultados que se van a presentar en la presente Tesis son de aplicabilidad en el estudio de los condensados de Bose-Einstein, lo cual extiende las posibles aplicaciones tecnológicas de los resultados obtenidos a las aplicaciones tecnológicas de estos condensados. Sin embargo a lo largo del texto no vamos a hacer comentarios sobre condensados de Bose-Einstein o sobre su aplicabilidad.

En la presente Tesis vamos a ocuparnos de estudiar matemáticamente los fenómenos no lineales dentro de sistemas periódicos o con simetría rotacional discreta, así como de modelizar y simular los nuevos efectos dinámicos que prediciremos y que sean susceptibles de servir como base para posibles aplicaciones tecnológicas futuras en el ámbito de la óptica no lineal. Veremos que todos los solitones discretos presentados más arriba pueden caracterizarse mediante una nueva variable, el pseudomomento angular, y podremos predecir a partir de ella nuevos tipos de solitones. Asimismo, demostraremos que en medios discretos esta variable se conserva y obtendremos cómo se transforma cuando a lo largo de la propagación la simetría discreta varía. Simularemos dinámicamente los efectos obtenidos, los cuales permitirán obtener un 'álgebra' del momento y pseudomomento angular, la cual puede ser utilizada para diseñar nuevos dispositivos completamente ópticos. A continuación extenderemos los conocimientos desarrollados para sistemas con simetría rotacional discreta a sistemas con simetría traslacional discreta, lo cual nos permitirá obtener nuevos tipos de solitones. En este caso el pseudomomento lineal será la variable característica de los solitones y, nuevamente, demostraremos que se conserva a lo largo de la propagación. Con el fin de profundizar en estos sistemas y encontrar nuevas propiedades dinámicas, más allá de las conocidas para sistemas con simetría rotacional discreta, desarrollaremos en profundidad la analogía con la teoría del estado sólido o de la materia condensada. El estudio de la dinámica de estos sistemas, mediante las herramientas de estado sólido, nos permitirá deducir nuevos tipos de soluciones así como nuevas propiedades dinámicas y abrirá el camino para estudiar nuevos efectos dinámicos sobre estos sistemas, capaces de servir como base a nuevas tecnologías fotónicas.

En el capítulo 2 estudiaremos en profundidad las soluciones estacionarias simétricas con simetría rotacional utilizando las herramientas de la teoría de grupos y de las funciones de Bloch. Definiremos el pseudomomento angular de las soluciones y obtendremos las propiedades de esta variable, y en consecuencia de las posibles soluciones simétricas. El trabajo realizado supondrá una extensión del presentado en las refs. [211, 212, 213, 214] al caso no lineal escalar. En el tercer capítulo utilizaremos esta teoría para calcular soluciones estacionarias de manera sistemática en sistemas con distintas simetrías discretas. Algunas de estas soluciones son conocidas en la literatura y otras son nuevos tipos de solitones. En el cuarto capítulo estudiaremos la dinámica de las soluciones con simetría rotacional discreta. Demostraremos

⁸Para una demostración de la obtención de esta ecuación en el campo de los condensados de Bose-Einstein se puede consultar la ref. [7].

la conservación del pseudomomento angular y obtendremos las reglas de transformación de éste y del momento angular cuando la simetría del sistema cambia a lo largo de la propagación. Ofreceremos simulaciones numéricas de los distintos escenarios de cambio del momento o pseudomomento angular. Adicionalmente estudiaremos la relación entre la vorticidad, el número de vórtices y el pseudomomento angular. En la segunda parte, en el capítulo 5 estudiaremos las soluciones con simetría traslacional discreta. Demostraremos la existencia del pseudomomento lineal, calcularemos numéricamente distintos tipos de soluciones, demostraremos la conservación del pseudomomento lineal y estudiaremos numéricamente la estabilidad de las soluciones obtenidas. Finalmente, en el capítulo 6 escribiremos una teoría para la dinámica de las soluciones con invariancia traslacional discreta basada en la teoría de estado sólido, lo cual nos permitirá predecir nuevos tipos de soluciones, como las soluciones con dominios magnéticos, y nuevos efectos dinámicos, como la interacción con un campo exterior. En el último capítulo presentaremos las conclusiones más relevantes del trabajo realizado.

Parte 1

Solitones espaciales e invariancia rotacional continua o discreta

Teoría Matemática del Pseudomomento Angular

2.1. Introducción

En el presente capítulo vamos a definir y estudiar, en el contexto de la ecuación no lineal de Schrödinger, las soluciones estacionarias simétricas con simetría rotacional continua o discreta. Veremos que, al igual que las soluciones con simetría rotacional continua presentan momento angular bien definido, las soluciones con simetría rotacional discreta presentan una cantidad, que denominaremos *pseudomomento angular*, que juega un papel análogo. Para estudiar dichas soluciones y entender profundamente la utilidad del concepto de pseudomomento angular, utilizaremos dos enfoques alternativos, aunque complementarios: la teoría de grupos discretos y la teoría de las funciones de Bloch. Comprobaremos que el pseudomomento angular tiene una importancia fundamental en el estudio de las soluciones estacionarias con simetría rotacional discreta. Dado que, como veremos, para soluciones en un grupo de simetría discreta dicha variable sólo puede tomar un conjunto finito de valores, podremos, por ejemplo, clasificar las posibles soluciones en función del valor del pseudomomento. Además, seremos capaces de predecir a priori ciertas condiciones que deben cumplir las soluciones con distinto pseudomomento, como, por ejemplo, si éstas deben ser funciones reales o complejas. Más aún, seremos capaces de deducir la forma funcional de cualquier solución cerca del eje de simetría rotacional, teniendo en cuenta el pseudomomento angular que presente. Finalmente, introduciremos los conceptos de singularidades de fase, carga de una singularidad, vorticidad y líneas nodales, y los relacionaremos con el pseudomomento angular.

La teoría del pseudomomento angular servirá como base teórica sobre la que desarrollaremos los dos siguientes capítulos. En el primero de ellos, explotaremos la teoría presentada en este capítulo para obtener y caracterizar soluciones estacionarias con simetría rotacional discreta o continua en distintos sistemas y con diferentes propiedades. En el segundo de ellos extenderemos los resultados a soluciones no estacionarias, pero simétricas, de la ecuación de Schrödinger no lineal. Esto nos permitirá relacionar, por ejemplo, el concepto de vorticidad con el de pseudomomento angular y con el número de singularidades de fase que presente la solución.

El presente capítulo se organiza del siguiente modo. En el primer apartado utilizaremos los conceptos de la teoría de grupos para clasificar las soluciones con simetría rotacional discreta o continua. Definiremos el concepto de pseudomomento angular y clasificaremos las soluciones en función de su valor. Asimismo obtendremos las cotas sobre el valor mínimo y máximo de éste y deduciremos algunas conclusiones sobre la forma funcional de las soluciones con distinto pseudomomento. En el segundo apartado obtendremos el concepto de pseudomomento angular desde el punto de vista de la teoría de las funciones de Bloch. Esto nos permitirá

entender desde otro punto de vista por qué los pseudomomentos sólo pueden tomar un número finito de valores distintos, podremos entender las soluciones con simetría rotacional discreta como funciones de Bloch en la variable angular y deduciremos una estructura de bandas similar a la que se obtiene en el caso lineal para sistemas con invariancia traslacional. En el tercer apartado extenderemos los resultados a un operador diferente al que se obtiene para las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger no lineal y que presenta la peculiaridad de no ser real, lo cual permite la existencia de soluciones estacionarias que denominaremos soluciones rotatorias. En el cuarto apartado estudiaremos cómo los anteriores resultados pueden ser utilizados para obtener una predicción sobre el comportamiento de la función cerca del eje de simetría rotacional. A continuación, en el quinto apartado, utilizaremos este resultado para relacionar los conceptos de singularidad de fase, carga de una singularidad y líneas nodales con el pseudomomento angular. Finalmente, en el último apartado se resumen todos los conceptos introducidos a lo largo del capítulo con el fin de ofrecer una visión compacta así como la interpretación física de la teoría del pseudomomento angular presentada.

2.2. Teoría de grupos aplicada a un operador no lineal real

Sea $L_0(\mathbf{x}) = \Delta - V(\mathbf{x})$, donde $\mathbf{x} = (x, y) \in \mathbb{R}^2$, Δ es el operador Laplaciano $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ y $V(\mathbf{x})$ es una función de $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, cuyo grupo de simetría \mathcal{G} es isomorfo al grupo de simetría rotacional $\mathcal{O}(2)$, a un grupo con simetría rotacional discreta \mathcal{C}_n de orden n o a un grupo con simetría rotacional y especular \mathcal{C}_{nv} . Denotemos como \mathcal{T}_i al elemento i -ésimo perteneciente al grupo \mathcal{G} (para un resumen de los conceptos de teoría de grupos, véase apéndice B). Sea $L_1(|\psi|^2) = F(|\psi|^2)$, donde $\psi = \psi(\mathbf{x})$ es una función de $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}$ y F es una función real cuyo grupo de simetría \mathcal{G}' es el mismo que el de la función $|\psi|^2$. Es decir, $\forall \mathcal{T}'_i \in \mathcal{G}'$ se cumple que si $\mathcal{T}'_i |\psi|^2 = |\psi|^2 \mathcal{T}'_i$ entonces $\mathcal{T}'_i F(|\psi|^2) = F(|\psi|^2) \mathcal{T}'_i$. Sea $L(\mathbf{x}, |\psi|^2) = L_0 + L_1$. Bajo estas condiciones, vamos a estudiar propiedades de soluciones de la ecuación:

$$(2.2.1) \quad L(\mathbf{x}, |\psi|^2)\psi = \mu\psi.$$

NOTACIÓN 2.2.1. Denominamos *soluciones estacionarias* a las soluciones de la forma $\phi(\mathbf{x}, z) = e^{i\mu z}\psi(\mathbf{x})$ de la ecuación no lineal de Schrödinger presentada en el apéndice A. La parte espacial de estas soluciones, $\psi(\mathbf{x})$, cumple la ecuación 2.2.1.

OBSERVACIÓN 2.2.2. El operador $L(\mathbf{x}, |\psi|^2)$ es hermítico, ya que $L = L^\dagger$, y por lo tanto sus autovalores son reales, $\mu \in \mathbb{R}$. Además $L = L^*$ ya que $V(\mathbf{x})$ es una función real y $F(|\psi|^2)$ también lo es.

NOTACIÓN 2.2.3. Denominaremos \mathcal{G} al grupo de simetría de $V(\mathbf{x})$. Supondremos siempre que \mathcal{G} es isomorfo a $\mathcal{O}(2)$, \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} . Denominaremos \mathcal{G}' al grupo de simetría de $|\psi|^2$ y, por lo tanto, de $F(|\psi|^2)$.

DEFINICIÓN 2.2.4. Sea $\psi_\nu = \psi_\nu(\mathbf{x})$. Se denomina *operador generado por ψ_ν* a $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)$. Al igual que en el caso lineal, ψ es una autofunción de $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)$ con autovalor μ , si cumple que $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)\psi = \mu\psi$. El conjunto de todos los autovalores posibles es el espectro de $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)$. La función $\psi_\nu(\mathbf{x})$ es una *solución autoconsistente* si se cumple que $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)\psi_\nu = \mu\psi_\nu$, es decir, si ψ_ν es una autofunción del operador generado por ella misma. Decimos que ψ_ν es una *solución autoconsistente simétrica* si es una solución autoconsistente y además se impone que $|\psi_\nu|^2$ sea

invariante bajo el grupo \mathcal{G} de transformaciones de $V(\mathbf{x})$ o alguno de sus subgrupos, es decir, si $\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}$. Finalmente, decimos que ψ_η es una *solución no autoconsistente* si se cumple que $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)\psi_\eta = \mu\psi_\eta$ pero no se cumple que $L(\mathbf{x}, |\psi_\eta|^2)\psi_\eta = \mu\psi_\eta$.

OBSERVACIÓN 2.2.5. Sean ψ_η y ψ_σ dos soluciones autoconsistentes que comparten el mismo autovalor, es decir, que cumplen que $L(\mathbf{x}, |\psi_\eta|^2)\psi_\eta = \mu\psi_\eta$ y $L(\mathbf{x}, |\psi_\sigma|^2)\psi_\sigma = \mu\psi_\sigma$. Es fácil ver que, en general, la superposición de ambas no es solución autoconsistente con el mismo autovalor, $L(\mathbf{x}, |\alpha\psi_\eta + \beta\psi_\sigma|^2)(\alpha\psi_\eta + \beta\psi_\sigma) \neq \mu(\alpha\psi_\eta + \beta\psi_\sigma)$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Es decir, para las soluciones autoconsistentes no se cumple el principio de superposición. Sin embargo, sea ψ_ν tal que $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)\psi_\nu = \mu\psi_\nu$. Supongamos ahora que ψ_η y ψ_σ son dos autofunciones *no* autoconsistentes de $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)$ que comparten el mismo autovalor μ . Es decir, $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)\psi_\eta = \mu\psi_\eta$ y $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)\psi_\sigma = \mu\psi_\sigma$. Evidentemente, $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)(\alpha\psi_\eta + \beta\psi_\sigma) = \mu(\alpha\psi_\eta + \beta\psi_\sigma)$.

NOTA 2.2.6. Nótese que nada impide que $F(\mathbf{x}) \equiv 0$ en cuyo caso la ecuación 2.2.1 es lineal. Todos los resultados que se van a presentar son igualmente válidos en el caso lineal y algunos son bien conocidos en este caso.

LEMA 2.2.7. Si ψ_ν es una solución autoconsistente con autovalor μ , ψ_ν^* también lo es del mismo operador con el mismo autovalor.

DEMOSTRACIÓN. Se cumple que $L_0\psi_\nu + L_1(|\psi_\nu|^2)\psi_\nu = \mu\psi_\nu$. Además se cumple que $L_1(|\psi_\nu|^2) = L_1(|\psi_\nu^*|^2)$ ya que F una función real y $|\psi_\nu|^2 = |\psi_\nu^*|^2$. Como $V(\mathbf{x})$ es una función real, si tomamos el complejo conjugado de la anterior ecuación tenemos: $L_0\psi_\nu^* + L_1(|\psi_\nu^*|^2)\psi_\nu^* = \mu^*\psi_\nu^*$. Luego ψ_ν^* es también autofunción con autovalor μ^* del mismo operador y del operador generado por ella misma. Finalmente, se cumple que $\mu = \mu^*$ debido a que, como hemos visto más arriba, $L = L^\dagger$ y por tanto $\mu \in \mathbb{R}$. \square

LEMA 2.2.8. Si ψ_σ es una solución autoconsistente con autovalor μ y se cumple que $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)\psi_\sigma = \mu\psi_\sigma$, es decir ψ_σ es una autofunción del operador generado por ψ_ν con el mismo autovalor, entonces: i) $\psi_\nu = k\psi_\sigma$ o bien, ii) $\psi_\nu = k\psi_\sigma^*$, con $k \in \mathbb{C}$ y $|k|^2 = 1$.

DEMOSTRACIÓN. Se cumple que $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)\psi_\sigma = \mu\psi_\sigma$ y $L(\mathbf{x}, |\psi_\sigma|^2)\psi_\sigma = \mu\psi_\sigma$. Luego restando estas dos expresiones se tiene:

$$F(|\psi_\nu|^2)\psi_\sigma - F(|\psi_\sigma|^2)\psi_\sigma = 0, \quad \forall \mathbf{x}.$$

Para que esta igualdad sea cierta, debe cumplirse i) o ii). \square

COROLARIO 2.2.9. Bajo las condiciones del lema 2.2.8, las funciones ψ_ν y ψ_ν^* son también soluciones autoconsistentes.

DEMOSTRACIÓN. Si se cumple que $\psi_\nu = k\psi_\sigma$ se obtiene que $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)\psi_\nu = \mu\psi_\nu$ y por lo tanto ψ_ν es solución autoconsistente. Por otra parte, si se cumple que $\psi_\nu = k\psi_\sigma^*$ se obtiene que $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)\psi_\nu^* = \mu\psi_\nu^*$ y como $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2) = L(\mathbf{x}, |\psi_\nu^*|^2)$ la función ψ_ν^* es solución autoconsistente. Teniendo en cuenta el lema 2.2.7 los correspondientes complejos conjugados también lo son. \square

Podemos reescribir el lema 2.2.8 del siguiente modo:

LEMA 2.2.10. Si ψ_σ es una función que cumple que $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)\psi_\sigma = \mu\psi_\sigma$, donde ψ_ν es una solución autoconsistente con el mismo autovalor, entonces ψ_σ es solución autoconsistente si y sólo si i) $\psi_\sigma = k\psi_\nu$ o bien, ii) $\psi_\sigma = k\psi_\nu^*$, con $k \in \mathbb{C}$ y $|k|^2 = 1$.

DEMOSTRACIÓN. Si i) $\psi_\sigma = k\psi_\nu$ o bien, ii) $\psi_\sigma = k\psi_\nu^*$, despejando ψ_ν y sustituyendo se obtiene que ψ_σ es solución autoconsistente. Si suponemos que ψ_σ es solución autoconsistente se obtiene el resultado procediendo como en la prueba del lema 2.2.8. \square

PROPOSICIÓN 2.2.11. *Sea $\psi_\nu = \psi_\nu(\mathbf{x})$ una solución autoconsistente simétrica de $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)$. Entonces, si $\mathcal{T}'_i \in \mathcal{G}'$, la función transformada $\mathcal{T}'_i \psi_\nu$ es una solución autoconsistente simétrica si y sólo si es proporcional a ψ_ν o a ψ_ν^* .*

DEMOSTRACIÓN. Nótese en primer lugar que por definición de solución autoconsistente simétrica se cumple que $\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}$, donde \mathcal{G} es el grupo de simetría de $V(\mathbf{x})$ y \mathcal{G}' el de $|\psi_\nu|^2$. Sea \mathcal{T}'_i un elemento cualquiera de \mathcal{G}' . Se cumple que

$$\mathcal{T}'_i L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2) \psi_\nu(\mathbf{x}) = \mathcal{T}'_i \mu \psi_\nu(\mathbf{x}),$$

o bien,

$$\mathcal{T}'_i L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2) \mathcal{T}'_i{}^{-1} \mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x}) = \mu \mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x}).$$

Veamos que $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)$ conmuta con todos los elementos del grupo \mathcal{G}' . Es sabido que el operador Δ es invariante bajo todos los elementos del grupo $\mathcal{O}(2)$. Luego lo es bajo los elementos del resto de grupos considerados, pues son subgrupos de éste. Por otra parte las funciones $V(\mathbf{x})$ y $F(|\psi_\nu|^2)$ son invariantes bajo los elementos del grupo por hipótesis y se cumple que $\mathcal{T}'_i F(|\psi_\nu|^2) \mathcal{T}'_i{}^{-1} = F(|\psi_\nu|^2)$. Luego $\mathcal{T}'_i L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2) \mathcal{T}'_i{}^{-1} = L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)$ y por lo tanto:

$$L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2) \mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x}) = \mu \mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x}).$$

Es decir, $\mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x})$ es también autofunción con el mismo autovalor. Si μ es un autovalor no degenerado se cumple que $\mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x})$ es un múltiplo de $\psi_\nu(\mathbf{x})$:

$$\mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x}) = D_{\nu i}(\mathcal{T}'_i) \psi_\nu(\mathbf{x}),$$

donde hemos escrito la constante como $D_{\nu i}(\mathcal{T}'_i)$ para enfatizar que el valor de la constante depende del elemento i -ésimo del grupo considerado y de la autofunción ν . Si μ es un autovalor con multiplicidad $\rho > 1$, se debe cumplir que:

$$(2.2.2) \quad \mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha=1}^{\rho} D_{\alpha i}(\mathcal{T}'_i) \psi^{(\alpha)}(\mathbf{x}),$$

donde, nuevamente, $D_{\alpha i}(\mathcal{T}'_i)$ son coeficientes que dependen del elemento i considerado y de la autofunción α correspondiente. Veamos que estas funciones no son cualquier función debido a la no linealidad del operador. Si $\mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x})$ es también una solución autoconsistente con el mismo autovalor, se cumplen las condiciones del lema 2.2.8 para $\psi_\sigma = \mathcal{T}'_i \psi_\nu$, a saber, $\mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x})$ es simultáneamente autofunción de $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)$ y de $L(\mathbf{x}, |\mathcal{T}'_i \psi_\nu|^2)$, con el mismo autovalor. Luego se cumple que i) $\mathcal{T}'_i \psi_\nu = k\psi_\nu$, o bien, ii) $\mathcal{T}'_i \psi_\nu = k\psi_\nu^*$, con $k \in \mathbb{C}$ y $|k|^2 = 1$. Nótese que para los grupos considerados la dimensión de los subespacios asociados a cada autovalor es a lo sumo dos [218]. Por lo tanto, debemos tomar $\rho = 2$ funciones en la ec. 2.2.2 como $\psi^1 = \psi_\nu$ y $\psi^2 = \psi_\nu^*$. En el primer caso la ecuación 2.2.2 se reduce a $\mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x}) = D_{1i}(\mathcal{T}'_i) \psi_\nu(\mathbf{x})$. En el segundo caso se reduce a $\mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x}) = D_{2i}(\mathcal{T}'_i) \psi_\nu^*(\mathbf{x})$. Consecuentemente, en todo caso se expresa en función ψ_ν o de ψ_ν^* . Además ψ_ν^* es también solución autoconsistente con el mismo autovalor debido al lema 2.2.7. Según

el lema 2.2.10 éstas son las únicas ecuaciones posibles para que ψ_σ sea autoconsistente y presente el mismo autovalor μ . \square

OBSERVACIÓN 2.2.12. De la proposición anterior se deduce que si ψ_ν es una solución autoconsistente, su transformada por $\mathcal{T}_i \in \mathcal{G}$ pertenece al subespacio generado por ella misma o por su compleja conjugada y se expresa en función de soluciones autoconsistentes.

TEOREMA 2.2.13. *Sea $\psi_\nu = \psi_\nu(\mathbf{x})$ una solución autoconsistente simétrica y supongamos que $\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}$. Entonces ψ_ν pertenece a alguna de las representaciones irreducibles de \mathcal{G}' .*

DEMOSTRACIÓN. Tal y como se demostró en le prop. 2.2.11, si $\mathcal{T}'_i \in \mathcal{G}'$, la función transformada $\mathcal{T}'_i \psi_\nu$ es autoconsistente con el mismo autovalor μ si y sólo si es proporcional a ψ_ν o a ψ_ν^* . En particular, si μ es no degenerado, necesariamente $\mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x})$ será un múltiplo de $\psi_\nu(\mathbf{x})$:

$$\mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x}) = D_{\nu i}(\mathcal{T}'_i) \psi_\nu(\mathbf{x}).$$

Y si μ es un autovalor con multiplicidad $\rho > 1$, se cumple que

$$(2.2.3) \quad \mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha=1}^{\rho} D_{\alpha i}(\mathcal{T}'_i) \psi^{(\alpha)}(\mathbf{x}).$$

Y en particular,

$$(2.2.4) \quad \mathcal{T}'_i \psi_\nu(\mathbf{x}) = D_{\alpha i}(\mathcal{T}'_i) \psi^\alpha(\mathbf{x}),$$

donde ψ_α , $\alpha = 1, 2$ coincide con ψ_ν y con ψ_ν^* , respectivamente. Por lo tanto, podemos obtener a partir de estas expresiones una *representación irreducible* del grupo en cada uno de los subespacios de multiplicidad $1 \leq \rho \leq 2$ (para una definición de representación irreducible, véase apéndice B). A cada una de las representaciones irreducibles del grupo \mathcal{G}' le asignamos el índice $j \in \mathbb{N}$. En el caso lineal, para obtener la j -ésima representación irreducible se pueden utilizar las autofunciones pertenecientes al j -ésimo subespacio. En el caso no lineal, si obtenemos las autofunciones del operador $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)$, la autofunción ψ_ν (que es una solución autoconsistente) debe aparecer en uno de los subespacios, por ejemplo en el j -ésimo. Como la función ψ_ν se puede expresar en términos de las funciones en este subespacio, y en particular, como es proporcional a sí misma o a su conjugada, siendo ambas soluciones autoconsistentes simétricas, (tal y como hemos visto en esta demostración más arriba y en los lemas anteriores) decimos que ψ_ν pertenece a la j -ésima representación irreducible. \square

OBSERVACIÓN 2.2.14. Nótese que en los grupos con simetría \mathcal{C}_n todas las representaciones son unidimensionales y por lo tanto todos los autovalores son no degenerados. Sin embargo, en los grupos con simetría \mathcal{C}_{nv} hay representaciones bidimensionales. En este caso, bajo los elementos de rotación \mathcal{C}_n^p siempre se cumple que $\mathcal{C}_n^p \psi = k_p \psi$ donde $k_p \in \mathbb{C}$ es una constante de módulo unidad. Pero bajo los elementos de reflexiones Π_ν se cumple que $\Pi_\nu \psi = k_\nu \psi^*$ o bien $\Pi_\nu \psi = k_\nu \psi$, donde $k_\nu \in \mathbb{C}$ es una constante de módulo unidad. Es decir, que el sumatorio 2.2.2 de la demostración de la proposición 2.2.11 sólo implica a la autofunción o a su complejo conjugado, siendo ambas soluciones autoconsistentes simétricas. Por lo tanto la

ecuación 2.2.2 sólo puede implicar a la misma función o a su conjugado, lo cual es consistente con la proposición 2.2.11.

NOTA 2.2.15. Nótese que si $\mathcal{G}' \subset \mathcal{G}$ las soluciones autoconsistentes simétricas ψ_ν pueden pertenecer a subgrupos del grupo de simetría de $V(\mathbf{x})$, ya que deben pertenecer a alguna de las representaciones irreducibles de \mathcal{G}' .

NOTACIÓN 2.2.16. En adelante, denotaremos por j al índice de la representación irreducible asociado a las rotaciones. El grupo de rotaciones discretas de orden n (\mathcal{C}_n) cuenta con $\frac{n}{2} + 1$ representaciones irreducibles si n es par y $\frac{n-1}{2} + 1$ representaciones irreducibles si n es impar (véase apéndice B). Cuando se consideran adicionalmente las reflexiones (\mathcal{C}_{nv}) algunas de estas representaciones se desdoblan, y para éstas consideramos el mismo índice j .

2.2.1. Condiciones sobre las soluciones autoconsistentes simétricas.

El teorema 2.2.13 implica que una condición necesaria que deben cumplir las soluciones de la ecuación 2.2.1 para ser soluciones simétricas es que deben pertenecer a alguna de las representaciones irreducibles del grupo al que pertenece $V(\mathbf{x})$, o a alguno de sus subgrupos. Esto permite imponer condiciones sobre las posibles soluciones simétricas de la ecuación. De hecho, se puede obtener una predicción sobre la forma funcional que deben tener las soluciones autoconsistentes simétricas, teniendo en cuenta que pertenecen a alguna de las representaciones irreducibles del grupo y, por tanto, deben transformarse bajo la acción de los elementos de las *clases* del grupo considerado según la *tabla de caracteres* correspondiente (para una definición de los conceptos de clase y de tabla de caracteres, véase apéndice B).

CASO 1. Si $V(\mathbf{x})$ y $|\psi_\nu|^2$ son invariantes bajo los elementos del grupo $\mathcal{O}(2)$, la forma funcional de las soluciones es $\psi(r, \theta) = e^{i\theta l} g(r)$, donde (r, θ) son las coordenadas polares, $g(r)$ es una función cualquiera de $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ y $l \in \mathbb{Z}$.

LEMA 2.2.17. *El módulo de la variable $|l|$ nos sirve para clasificar las soluciones y cumple que $j = |l| + 1$, donde j es el índice de la representación, $j = 1, 2, \dots$*

DEMOSTRACIÓN. El grupo $\mathcal{O}(2)$ es de orden infinito. Se observa que cada valor de $|l|$ se corresponde con la representación irreducible $j = (|l| + 1)$ -ésima, ya que las funciones con $|l|$ se transforman según los caracteres correspondientes a la representación irreducible j -ésima. \square

NOTACIÓN 2.2.18. Denotaremos $\bar{l} = |l|$. Denotaremos también $s = \text{sg}(l)$, donde $\text{sg}(\cdot)$ denota la función signo. Por lo tanto, $l = s\bar{l}$.

NOTA 2.2.19. La variable l es también autovalor del operador momento angular $\mathcal{R}_\alpha = e^{-i\alpha(\frac{\partial}{\partial \theta})}$, donde α es un ángulo de giro, ya que si aplicamos el operador momento angular a la función, obtenemos $e^{-i\alpha(\frac{\partial}{\partial \theta})} e^{i\theta l} g(r) = l e^{i\theta l} g(r)$. Consecuentemente, se denomina a la variable l *momento angular*.

CASO 2. Si $\mathcal{G} \equiv \mathcal{C}_n$ o \mathcal{C}_{nv} , $\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}$, es decir, si $V(\mathbf{x})$ y $|\psi_\nu|^2$ son invariantes bajo los elementos del grupo \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} , o bien $\mathcal{G} \equiv \mathcal{O}(2)$, $\mathcal{G}' \equiv \mathcal{C}_n$ o \mathcal{C}_{nv} , $\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}$, es decir si sólo $|\psi_\nu|^2$ es invariante bajo los elementos del grupo \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} , cuando $V(\mathbf{x})$ es invariante $\mathcal{O}(2)$, tomaremos como base las funciones $\psi(r, \theta) = e^{i\theta m} u(r, \theta)$, donde $u(r, \theta)$ es una función cualquiera de $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ periódica en θ con periodo $\frac{2\pi}{n}$, es decir, cumple que $u(r, \theta) = u(r, \theta + \frac{2\pi}{n})$ y $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{n}{2}$ si n es par o $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{n-1}{2}$ si n es impar.

Las funciones definidas de esta forma cumplen con todas las transformaciones de la tabla de caracteres del grupo correspondiente. Para $m' \in \mathbb{Z}$ distintos de los considerados no se obtienen las transformaciones adecuadas bajo la acción de los elementos del grupo, a no ser que la función $u(r, \theta)$ contenga un término adecuado de la forma $e^{\pm im''\theta}$ de modo que $m = m' \pm m''$ tome valores en el intervalo permitido.

LEMA 2.2.20. *El módulo de m sirve para clasificar las soluciones y cumple que $j = |m| + 1$, donde j es el índice de representación¹ y, por tanto, $j = 1, 2, \dots, \frac{n}{2} + 1$ si n par o $j = 1, 2, \dots, \frac{n-1}{2} + 1$ si n impar.*

DEMOSTRACIÓN. Los grupos C_n y C_{nv} son de orden finito. Se comprueba que cada solución con $|m|$ diferente se transforma según los caracteres de una representación irreducible y por lo tanto este valor nos permite indiciar las soluciones pertenecientes a distintas representaciones. Además, se observa que, con la ordenación convencional de las representaciones irreducibles, este valor difiere del índice de representación j en una unidad. Nótese que, como los grupos considerados son de orden finito, al realizar la identificación de $|m|$ con j se obtiene de forma inmediata los valores permitidos para m . \square

NOTACIÓN 2.2.21. Denotaremos $\bar{m} = |m|$. Denotaremos también $s = sg(m)$. Por lo tanto, $m = s\bar{m}$. Denominaremos a la variable m *pseudomomento angular*.

Nótese que las funciones en ambos casos cumplen con las proposiciones expuestas más arriba y que se transforman bajo rotaciones y reflexiones de acuerdo a las tablas de caracteres de cada uno de los grupos considerados. De acuerdo con todo lo anterior, \bar{m} presenta una cota máxima, tal y cómo se enuncia en el siguiente teorema.

TEOREMA 2.2.22. *(de valor máximo para \bar{m}). El módulo del pseudomomento angular \bar{m} (caso 2) presenta un máximo, en particular, $\bar{m} \leq \frac{n}{2}$ si n es par y $\bar{m} \leq \frac{n-1}{2}$ si n es impar. El módulo del momento angular \bar{l} (caso 1) no está acotado.*

DEMOSTRACIÓN. Según 2.2.20 \bar{m} cumple que $\bar{m} = j - 1$. Por lo tanto, deberá presentar un valor máximo ya que el número de representaciones irreducibles de un grupo de orden finito es, igualmente, finito. Consecuentemente, $\bar{m} \leq \frac{n}{2}$ si n es par y $\bar{m} \leq \frac{n-1}{2}$ si n es impar, ya que éste es el número de representaciones irreducibles en ambos casos. Por otra parte, según 2.2.17 \bar{l} cumple que $\bar{l} = j - 1$. Como $\mathcal{O}(2)$ es un grupo de orden infinito y por lo tanto con infinitas representaciones, \bar{l} no está acotado. \square

Además, si tenemos en cuenta también que el operador L es real, tal y como hemos visto en 2.2.2, aún podemos obtener nuevas conclusiones sobre la forma funcional de las soluciones autoconsistentes simétricas.

NOTACIÓN 2.2.23. En adelante denotaremos como ρ_ν a la multiplicidad del autovalor μ_ν asociado a la autofunción ψ_ν del operador L .

LEMA 2.2.24. *Supongamos que $\mathcal{G}' \equiv C_n$ y $\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}$. Entonces $\rho_\nu \leq 2$, para cualquier autofunción ψ_ν de L .*

¹Como hemos visto más arriba (véase nota 2.2.16), este índice está asociado a las rotaciones.

DEMOSTRACIÓN. Todas las representaciones irreducibles de \mathcal{C}_n son unidimensionales. Sin embargo, algunos pares de representaciones unidimensionales son mutuamente complejo conjugados, es decir, si una función pertenece a una de estas representaciones irreducibles, su compleja conjugada necesariamente pertenece a la representación irreducible cuyos caracteres son complejos conjugados de la primera. Debido al lema 2.2.7 ambas soluciones comparten el mismo autovalor y por lo tanto su multiplicidad es dos. \square

NOTA 2.2.25. En lo que sigue, consideraremos al par de representaciones irreducibles unidimensionales cuyos caracteres son mutuamente conjugados como una única representación bidimensional.

LEMA 2.2.26. *Supongamos que $\mathcal{G}' \equiv \mathcal{C}_{nv}$ y $\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}$ o bien que $\mathcal{G}' \equiv \mathcal{O}(2)$ y $\mathcal{G}' \equiv \mathcal{G}$. Entonces $\rho_\nu \leq 2$ para cualquier autofunción ψ_ν de L .*

DEMOSTRACIÓN. Se debe a que las representaciones irreducibles de \mathcal{C}_{nv} y de $\mathcal{O}(2)$ son, a lo sumo, bidimensionales. \square

LEMA 2.2.27. *Una solución autoconsistente simétrica pertenece a una representación irreducible unidimensional si y sólo si es real, salvo una fase global $\zeta = e^{i\varsigma}$, $\varsigma \in \mathbb{R}$.*

DEMOSTRACIÓN. Nótese que consideramos aquellos pares de representaciones irreducibles en \mathcal{C}_n que son mutuamente conjugadas como una única representación. Vamos a demostrar que una solución autoconsistente simétrica que pertenece a una representación irreducible unidimensional es real por reducción al absurdo. Supongamos que una solución ψ cuyo autovalor tiene multiplicidad $\rho = 1$, no es real. Según el lema 2.2.7, su complejo conjugado ψ^* también será solución autoconsistente simétrica con el mismo autovalor. Luego es degenerada, lo cual contradice que pertenezca a una representación irreducible unidimensional. Por lo tanto debe cumplirse que $\psi = \psi^*$. Es fácil ver que si ψ es una solución autoconsistente simétrica, $e^{i\varsigma}\psi$ también lo es, con el mismo autovalor. Luego hay una fase global que puede multiplicar a la autofunción.

Probemos que una solución ψ autoconsistente simétrica real debe pertenecer a una representación irreducible unidimensional. Supongamos que ψ_ν es una solución autoconsistente simétrica real que debe pertenecer por el teorema 2.2.13 a alguna de las representaciones irreducibles del grupo. Las soluciones pertenecientes a representaciones irreducibles bidimensionales se deben transformar, bajo la acción de rotaciones \mathcal{C}_n^p en un número complejo ϵ^p con $\epsilon = e^{i\frac{2\pi}{n}}$, es decir, se cumple que $\mathcal{C}_n^p \psi_\nu = \epsilon^p \psi_\nu$ con $p \in \mathbb{Z}$. En cambio, las soluciones pertenecientes a representaciones irreducibles unidimensionales se transforman bajo todos los elementos $\mathcal{C}_n^p \in \mathcal{G}$ sólo por un cambio de signo, es decir, $\mathcal{C}_n^p \psi_\nu = \pm \psi_\nu$. Esto se puede observar de las tablas de caracteres de cada uno de los grupos considerados (véase apéndice B). La primera condición no puede cumplirse con funciones reales, mientras que la segunda sí. Por ello, toda solución autoconsistente real debe pertenecer a una representación irreducible unidimensional. Nótese que una fase global $e^{i\varsigma}$ no implica ningún cambio del comportamiento de la función frente a la acción de los elementos de grupo, luego si la función ψ no es real, pero $e^{i\varsigma}\psi \in \mathbb{R}$ para algún $\varsigma \in \mathbb{R}$, la conclusión anterior es igualmente válida. \square

LEMA 2.2.28. *Una solución autoconsistente simétrica pertenece a una representación irreducible bidimensional si y sólo si no es real y tampoco lo es tras multiplicarla por alguna fase global $\zeta = e^{i\varsigma}$, $\varsigma \in \mathbb{R}$.*

DEMOSTRACIÓN. Es consecuencia inmediata del lema 2.2.27. \square

LEMA 2.2.29. *Sea ψ_ν una solución autoconsistente simétrica y μ_ν el autovalor correspondiente. Supongamos que $\mathcal{G} \equiv \mathcal{O}(2)$, \mathcal{C}_n , o \mathcal{C}_{nv} . Supongamos que μ_ν es degenerado (y por tanto su multiplicidad es dos). La base adecuada para expresar la representación irreducible del operador en el subespacio de ψ_ν es el par (ψ_ν, ψ_ν^*) .*

DEMOSTRACIÓN. Debido al lema 2.2.7 si una solución ψ_ν pertenece a una representación bidimensional, ψ_ν^* es también solución con el mismo autovalor. Se deduce de los lemas anteriores o bien directamente de la forma del operador. \square

2.2.2. Tipos de soluciones autoconsistentes simétricas.

PROPOSICIÓN 2.2.30. *Sea ψ_ν una solución con $l = 0$ en sistemas con simetría $\mathcal{O}(2)$ o con $m = 0, \pm \frac{n}{2}$ si n es par o $m = 0$ si n es impar en sistemas invariantes bajo los elementos de los grupos \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} . Supongamos que $\rho_\nu = 1$. Entonces ψ_ν es una función real salvo una fase global $\zeta = e^{i\varsigma}$, $\varsigma \in \mathbb{R}$.*

DEMOSTRACIÓN. En el caso de sistemas con simetría $\mathcal{O}(2)$ la única representación irreducible unidimensional es la correspondiente a $j - 1 = l = 0$. Debido al lema 2.2.27 la solución debe ser real, salvo una fase global. También se observa que la función presentada en el caso 1 debe ser real si $l = 0$ por lo que teniendo en cuenta 2.2.27 debe pertenecer, a su vez, a representaciones irreducibles unidimensionales.

En el caso de sistemas con simetría \mathcal{C}_{nv} o \mathcal{C}_n las soluciones con $m = 0$ pertenecen a la primera representación irreducible, que es también unidimensional. Si n es par, las soluciones con $m = \pm \frac{n}{2}$ corresponden a soluciones con $j - 1 = \frac{n}{2}$. De la inspección de las tablas de caracteres se deduce que la representación irreducible a la que pertenecen estas soluciones es unidimensional. De nuevo, debido al lema 2.2.27 la solución correspondiente debe ser real, salvo una fase global. \square

DEFINICIÓN 2.2.31. Denominaremos a las soluciones autoconsistentes simétricas con $l = 0$ o $m = 0$ *soluciones tipo solitón fundamental* del grupo correspondiente ($\mathcal{O}(2)$, \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv}).

DEFINICIÓN 2.2.32. Se denomina a las soluciones autoconsistentes simétricas de grupo de orden par con $|m| = \frac{n}{2}$ *soluciones tipo solitón nodal*.

En capítulos posteriores veremos que las soluciones de este tipo deben su nombre a que presentan líneas nodales donde la amplitud de ψ se anula y su fase no está definida.

PROPOSICIÓN 2.2.33. *Sea ψ_ν una solución con $l \neq 0$ en sistemas con simetría $\mathcal{O}(2)$ o con $\bar{m} = 1, \dots, \frac{n}{2} - 1$ si n es par o $\bar{m} = 1, \dots, \frac{n-1}{2}$ si n es impar en sistemas invariantes bajo los elementos del grupo \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} . Entonces ψ_ν no puede ser real y tampoco lo es tras multiplicarla por cualquier fase global $\zeta = e^{i\varsigma}$, $\varsigma \in \mathbb{R}$.*

DEMOSTRACIÓN. En el caso de sistemas con simetría $\mathcal{O}(2)$, $\rho_\nu = 1$ si y sólo si ψ_ν es una solución con $j - 1 = l = 0$, mientras que en otro caso $\rho_\nu = 2$. Debido al lema 2.2.28 deben presentar estructura de fase no real (incluso tras multiplicarlas

por una fase global). También se obtiene que estas funciones no pueden ser reales por inspección de la forma de las funciones del caso 1.

En el caso de sistemas con simetría \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} las soluciones consideradas se corresponden con índices de la representación del grupo correspondiente $j - 1 = 1, \dots, \frac{n}{2} - 1$ si n es par o $j - 1 = 1, \dots, \frac{n-1}{2}$ si n es impar. En las tablas de caracteres se observa que estas soluciones pertenecen a representaciones irreducibles bidimensionales (teniendo en cuenta la nota 2.2.25 en el caso de \mathcal{C}_n) y que, por tanto, comparten el mismo autovalor. De nuevo, debido al lema 2.2.28, la solución correspondiente no puede ser real. \square

DEFINICIÓN 2.2.34. Se denomina *soluciones tipo vórtice* a las soluciones autoconsistentes simétricas con $l \neq 0$ en sistemas con simetría $\mathcal{O}(2)$ e invariancia rotacional completa o con $\bar{m} = 1, \dots, \frac{n}{2} - 1$ si n es par o $\bar{m} = 1, \dots, \frac{n-1}{2}$ si n es impar en sistemas invariantes bajo los elementos del grupo \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} .

En el último apartado del presente capítulo veremos que los solitones bidimensionales simétricos obtenidos en la literatura, tanto en medios homogéneos como periódicos, pueden ser clasificados en uno de los tres tipos considerados, es decir, fundamental, nodal o vórtice, siempre que el sistema en el que se han obtenido pueda modelizarse mediante una ecuación de Schrödinger no lineal con no linealidad dependiente de la intensidad $|\psi|^2$.

OBSERVACIÓN 2.2.35. Las formas funcionales obtenidas para los casos 1 y 2 son determinadas únicamente por las propiedades ante rotaciones de cada uno de los grupos considerados. Si tenemos en cuenta también las propiedades ante reflexiones en el caso del grupo \mathcal{C}_{nv} podemos obtener nuevas propiedades de las funciones. En particular, si bien tanto en $\mathcal{O}(2)$ como en \mathcal{C}_n sólo existe una única representación con $l = 0$ y $m = 0$, y en \mathcal{C}_n una única representación con $m = \frac{n}{2}$ si n es par, en \mathcal{C}_{nv} existen varias representaciones con $m = 0$ o $m = \frac{n}{2}$ si n es par. Esto se debe a que en este caso las soluciones pueden transformarse de distinta forma respecto a los distintos ejes de simetría especular del grupo, por lo que habrá tantas representaciones con $m = 0$ o $m = \frac{n}{2}$ si n es par, como ejes de simetría especular no equivalentes presente el grupo. Por tanto, además de la forma funcional presentada en 2 hay que añadir restricciones derivadas de las transformaciones frente a reflexiones. Veremos ejemplos de funciones con comportamientos diferentes frente a las reflexiones y el mismo pseudomomento angular en el capítulo 3.

2.3. Teoría de Bloch aplicada a un operador no lineal real

Los resultados anteriores pueden obtenerse desde una perspectiva diferente a partir de la Teoría de las funciones de Bloch. Tal y como se observa en la ref. [215] la forma funcional del caso 2 es la de una función de Bloch (los conceptos básicos de la teoría de Bloch se pueden consultar en el apéndice C) en la variable angular compacta θ . A partir de esta observación se pueden obtener algunos de los resultados anteriores, lo cual nos permitirá no sólo entender más profundamente lo presentado hasta ahora sino también extraer algunas conclusiones nuevas, por ejemplo, sobre la naturaleza física del pseudomomento angular m .

DEFINICIÓN 2.3.1. Definamos una transformación entre una variable lineal $s \in \mathbb{R}$ y una angular $\theta \in [0, 2\pi]$, de modo que a cada θ le corresponde un s dado por $s = \frac{\theta d}{2\pi}$, con $d \in \mathbb{R}$. Sin pérdida de generalidad, tomaremos $d = 1$.

TEOREMA 2.3.2. (Teorema angular no lineal de Bloch). Sea un operador de la forma $L(\mathbf{x}, |\psi|^2)$ como el introducido en la ecuación 2.2.1. Supongamos que $\mathcal{G}' \equiv \mathcal{O}(2)$, $\mathcal{C}_n \circ \mathcal{C}_{nv}$. Entonces las autofunciones autoconsistentes simétricas de dicho operador cuando $\mathcal{G}' \equiv \mathcal{O}(2)$ tienen la forma

$$\psi(r, \theta) = e^{il\theta} g(r),$$

donde $l \in \mathbb{Z}$, o bien, cuando $\mathcal{G}' \equiv \mathcal{C}_n \circ \mathcal{C}_{nv}$ son

$$\psi(r, \theta) = e^{im\theta} u(r, \theta),$$

donde $m \in \mathbb{Z}$ y $u(r, \theta) = u(r, \theta + \epsilon)$ con $\epsilon = \frac{2\pi}{n}$ y n igual al orden del grupo.

DEMOSTRACIÓN. Si el grupo de simetría considerado es $\mathcal{O}(2)$, basta con tener en cuenta que L conmuta con el operador de rotaciones infinitesimales $\mathcal{R}_\alpha = e^{i\alpha(\frac{\partial}{\partial \theta})}$ y por tanto las soluciones autoconsistentes simétricas deben ser simultáneamente autofunciones de este operador, por lo que deben tener momento angular l bien definido y consecuentemente la forma funcional descrita.

Demostremoslo para el caso en que la simetría rotacional sea discreta. Supongamos que $\tilde{\psi}(r, \theta)$ es una solución autoconsistente simétrica expresada en coordenadas polares (r, θ) , sea $\tilde{L}((r, \theta), |\tilde{\psi}(r, \theta)|^2)$ el operador L y $\tilde{V}(r, \theta)$ la función V escritos en coordenadas polares. Tanto el potencial lineal $\tilde{V}(r, \theta)$ como la parte no lineal $F(|\tilde{\psi}(r, \theta)|^2)$ cumplen que $\tilde{V}(r, \theta) = \tilde{V}(r, \theta + \epsilon)$ y $F(|\tilde{\psi}(r, \theta)|^2) = F(|\tilde{\psi}(r, \theta + \epsilon)|^2)$, luego son periódicos en θ con periodo $\epsilon = \frac{2\pi}{n}$ (nótese que $\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}$, por lo que \tilde{V} siempre tiene la simetría de $|\tilde{\psi}|^2$). Si realizamos la transformación definida en 2.3.1 obtenemos la solución $\bar{\psi}(r, s)$ y el operador $\bar{L}((r, s), |\bar{\psi}(r, s)|^2)$ en las nuevas coordenadas. Tanto $\bar{V}(r, s)$ como $F(|\bar{\psi}(r, s)|^2)$ son periódicos en la variable s , es decir, $\bar{V}(r, s) = \bar{V}(r, s + a)$ y $F(|\bar{\psi}(r, s)|^2) = F(|\bar{\psi}(r, s + a)|^2)$, con periodo $a = \frac{\epsilon}{n} = \frac{1}{n}$.

Podemos definir una red de Bravais (para una definición, véase apéndice C) a lo largo de la variable lineal s . Cada punto de la red vendrá determinado por un escalar $S_j = j \cdot a$, con $j \in \mathbb{Z}$ ya que el periodo de la red lineal es a y dicho escalar juega el papel del vector primitivo de la red.

Definamos la transformación de traslación \mathcal{P}_{S_j} del modo convencional, es decir, de modo que se cumpla que $\mathcal{P}_{S_j} f(r, s) = f(r, s + S_j)$ ². El operador $\bar{L}((r, s), |\bar{\psi}(r, s)|^2)$ es invariante bajo esta transformación, es decir, $\bar{L}((r, s + S_j), |\bar{\psi}(r, s + S_j)|^2) = \bar{L}((r, s), |\bar{\psi}(r, s)|^2)$ ya que \bar{V} y $|\bar{\psi}|^2$ lo son, y por lo tanto:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{S_j} \bar{L}((r, s), |\bar{\psi}(r, s)|^2) \bar{\psi}(r, s) &= \bar{L}((r, s + S_j), |\bar{\psi}(r, s + S_j)|^2) \bar{\psi}(r, s + S_j) = \\ &= \bar{L}((r, s), |\bar{\psi}(r, s)|^2) \bar{\psi}(r, s + S_j) = \bar{L}((r, s), |\bar{\psi}(r, s)|^2) \mathcal{P}_{S_j} \bar{\psi}(r, s). \end{aligned}$$

Como la anterior expresión es válida para cualquier $\bar{\psi}$ simétrica, se cumple necesariamente que:

$$\mathcal{P}_{S_j} \bar{L}((r, s), |\bar{\psi}(r, s)|^2) = \bar{L}((r, s), |\bar{\psi}(r, s)|^2) \mathcal{P}_{S_j}.$$

Además, el efecto de aplicar dos traslaciones distintas S_j y $S_{j'}$ no depende del orden en que se realice la operación, ya que $\mathcal{P}_{S_j} \mathcal{P}_{S_{j'}} \bar{\psi}(r, s) = \bar{\psi}(r, s + S_j + S_{j'}) =$

²Nótese que si se deshace la transformación de coordenadas, el operador \mathcal{P}_R es equivalente a una rotación \mathcal{C}_n^R .

$\mathcal{P}_{S_{j'}+S_j}\bar{\psi}(r, s) = \mathcal{P}_{S_{j'}}\mathcal{P}_{S_j}\bar{\psi}(r, s)$. Por lo tanto³, $\mathcal{P}_{S_{j'}}\mathcal{P}_{S_j} = \mathcal{P}_{S_{j'}+S_j}$. En definitiva, como cualquier \mathcal{P}_{S_j} conmuta con el operador \bar{L} y los distintos operadores \mathcal{P}_{S_j} conmutan entre sí, decimos que el conjunto de los \mathcal{P}_{S_j} y el operador \bar{L} forman un conjunto de operadores conmutativo. Por lo tanto, como $\mathcal{P}_{S_j}\bar{L}\psi = \mathcal{P}_{S_j}\mu\psi$ y por tanto, debido a la conmutatividad, $\bar{L}\hat{\psi} = \mu\hat{\psi}$ con $\hat{\psi} = \mathcal{P}_{S_j}\psi$, los autovectores de \bar{L} pueden ser elegidos de modo que sean simultáneamente autoestados de todos los \mathcal{P}_{S_j} , es decir,

$$\bar{L}\bar{\psi} = \mu\bar{\psi},$$

$$\mathcal{P}_{S_j}\bar{\psi} = c(S_j)\bar{\psi} \quad \forall S_j.$$

Debido a la conmutatividad se cumple que $\mathcal{P}_{S_j}\mathcal{P}_{S_{j'}}\bar{\psi} = c(S_j)c(S_{j'})\bar{\psi} = \mathcal{P}_{S_j+S_{j'}}\bar{\psi} = c(S_j+S_{j'})\bar{\psi}$. Por lo tanto, los autovalores también cumplen que $c(S_j)c(S_{j'}) = c(S_j+S_{j'})$.

Como $S_j = ja$, si aplicamos la conmutatividad de los autovalores obtenida anteriormente obtenemos que $c(S_j) = c(a)^j$. Supongamos que escribimos el coeficiente correspondiente al vector primitivo de la red como $c(a) = e^{i2\pi k}$, eligiendo $k \in \mathbb{C}$ de forma que se cumpla dicha expresión. Entonces podemos escribir $c(S_j) = e^{i2\pi j k}$. Si ahora definimos $p_k = kb$ y $b = \frac{2\pi}{a}$ y sustituimos en la anterior expresión obtenemos $c(S_j) = e^{i(ab)jk} = e^{iS_j p_k}$. Por lo tanto,

$$(2.3.1) \quad \mathcal{P}_{S_j}\bar{\psi}(r, s) = \bar{\psi}(r, s + S_j) = e^{iS_j p_k}\bar{\psi}(r, s).$$

La anterior condición es equivalente a:

$$(2.3.2) \quad \bar{\psi}(r, s) = e^{i s p_k}\bar{u}(r, s), \quad \text{con } \bar{u}(r, s + S_j) = \bar{u}(r, s).$$

En general, k puede tomar cualquier valor y, por lo tanto, los p_k no tienen por qué ser reales y estar discretizados. A partir de las condiciones de periodicidad de las funciones $\bar{\psi}$ se puede deducir que p_k debe ser real y se puede obtener una condición sobre los valores permitidos para este escalar. Nótese que, dado que la variable angular θ es una variable compacta, $\bar{V}(r, \theta) = \bar{V}(r, \theta + 2\pi)$ y $\bar{\psi}(r, \theta) = \bar{\psi}(r, \theta + 2\pi)$, tanto \bar{V} como $\bar{\psi}$ son periódicas en la variable lineal s , $\bar{V}(r, s) = \bar{V}(r, s+1)$ y $\bar{\psi}(r, s) = \bar{\psi}(r, s+1)$, con periodo 1, dado que hemos tomado $d = 1$ en la transformación 2.3.1. Luego la condición de contorno sobre $\bar{\psi}$ impone que $\bar{\psi}(r, s + na) = \bar{\psi}(r, s)$, ya que $na = 1$. Por lo tanto, aplicando la ec. 2.3.1 a la condición de contorno, se obtiene:

$$\bar{\psi}(r, s + na) = e^{i n a p_k}\bar{\psi}(r, s),$$

lo cual requiere que $e^{i n a p_k} = 1$. Sustituyendo la expresión $p_k = kb$, se obtiene $e^{i n a k b} = 1$ y como $ab = 2\pi$, se obtiene $e^{i 2\pi n k} = 1$. Luego $nk = m$ con $m \in \mathbb{Z}$. Por lo tanto $p_k = \frac{m}{n}b$, de donde se deduce que $p_k \in \mathbb{R}$. Además los p_k permitidos (para distintos m) se hallan separados un $\Delta p_k = \frac{b}{n} = \frac{2\pi}{an}$.

Si ahora deshacemos la transformación, la ecuación 2.3.2 da lugar a:

³Esta propiedad es evidente si consideramos que los distintos \mathcal{P}_{S_j} son los elementos del subgrupo de traslaciones. Sin embargo, en la presente demostración no vamos a utilizar estos conceptos, sino que vamos a considerar los \mathcal{P}_{S_j} únicamente como operadores.

$$(2.3.3) \quad \tilde{\psi}(r, \theta) = e^{ip_k \frac{\theta}{2\pi}} u(r, \theta).$$

Como $b = \frac{2\pi}{a}$ y $a = \frac{\epsilon}{2\pi} = \frac{1}{n}$, se puede expresar $b = 2\pi n$. Por lo tanto, $p_k = \frac{m}{n} b = \frac{m}{n} 2\pi n = 2\pi m$ y substituyendo en la ecuación 2.3.3, obtenemos:

$$(2.3.4) \quad \tilde{\psi}(r, \theta) = e^{im\theta} u(r, \theta),$$

con $u(r, \theta) = u(r, \theta + \epsilon)$ y $m \in \mathbb{Z}$. \square

Veamos una forma alternativa de demostrar el anterior teorema:

DEMOSTRACIÓN. Definamos una red de Bravais *angular* unidimensional en la variable θ . Cada punto de la red vendrá determinado por una variable discreta $\Theta_j = j\epsilon$ con $j \in \mathbb{Z}$ y $\epsilon = \frac{2\pi}{n}$.

Definamos la transformación de rotación \mathcal{C}_{Θ_j} del modo convencional, es decir, de modo que se cumpla que $\mathcal{C}_{\Theta_j} f(r, \theta) = f(r, \theta + \Theta_j)$. El operador $\tilde{L}((r, \theta), |\tilde{\psi}(r, \theta)|^2)$ es invariante bajo esta transformación, es decir, $\tilde{L}((r, \theta + \Theta_j), |\tilde{\psi}(r, \theta + \Theta_j)|^2) = \tilde{L}((r, \theta), |\tilde{\psi}(r, \theta)|^2)$, ya que $\tilde{V}(r, \theta)$ y $|\psi|^2$ lo son. Razonando del mismo modo que anteriormente en el caso de las traslaciones \mathcal{P}_{S_j} , para esta transformación angular \mathcal{C}_{Θ_j} , se obtiene que

$$\mathcal{C}_{\Theta_j} \tilde{\psi} = c(\Theta_j) \tilde{\psi} \quad \forall \Theta_j,$$

donde los $c(\Theta_j)$ cumplen que $c(\Theta_j)c(\Theta_{j'}) = c(\Theta_j + \Theta_{j'})$.

Teniendo en cuenta esta propiedad podemos escribir $C(\Theta_j) = c(\epsilon)^j$, ya que $\Theta_j = j\epsilon$. Si escribimos el autovalor correspondiente a \mathcal{C}_ϵ como $c(\epsilon) = e^{i2\pi k}$, para algún $k \in \mathbb{C}$ se cumplirá que $C(\Theta_j) = e^{i2\pi j k}$. Definamos $m_k = k\kappa$ con $\epsilon\kappa = 2\pi$. Nótese que dado que $\epsilon = \frac{2\pi}{n}$, necesariamente, $\kappa = n$. Entonces se puede escribir el coeficiente $C(\Theta_j)$ como $C(\Theta_j) = e^{i(\epsilon\kappa)j k} = e^{im_k \Theta_j}$. Por lo tanto,

$$(2.3.5) \quad \mathcal{C}_{\Theta_j} \tilde{\psi}(r, \theta) = \tilde{\psi}(r, \theta + \Theta_j) = e^{i\Theta_j m_k} \tilde{\psi}(r, \theta),$$

lo cual es equivalente a:

$$(2.3.6) \quad \tilde{\psi}(r, \theta) = e^{i\theta m_k} u(r, \theta), \quad \text{con } u(r, \theta + \epsilon) = u(r, \theta).$$

Hasta aquí, sin embargo, los m_k no tienen por qué estar discretizados ni ser reales. Veamos que esto se deduce de la compacidad de la variable angular, $\tilde{\psi}(r, \theta + 2\pi) = \tilde{\psi}(r, \theta + n\epsilon) = \tilde{\psi}(r, \theta)$, que se traduce en una condición de contorno periódica en esta variable. Utilizando la ecuación 2.3.5 en la condición de contorno se obtiene:

$$\mathcal{C}_{\Theta_j=n\epsilon} \tilde{\psi}(r, \theta) = \tilde{\psi}(r, \theta + n\epsilon) = e^{in\epsilon m_k} \tilde{\psi}(r, \theta).$$

Como $n\epsilon = n\frac{2\pi}{n}$, se debe cumplir que $\tilde{\psi}(r, \theta + n\epsilon) = e^{i2\pi m_k} \tilde{\psi}(r, \theta)$. Por lo tanto, debido a las condiciones periódicas $e^{i2\pi m_k} = 1$ lo cual implica que $m_k \in \mathbb{Z}$. \square

OBSERVACIÓN 2.3.3. (Red recíproca). En la primera demostración, el escalar b juega el papel de vector primitivo de la red recíproca cuyos nodos P_k se obtienen para $k \in \mathbb{Z}$ ya que entonces se cumple que $e^{iS_j P_k} = 1$, lo cual es la condición que sirve para definir red recíproca (véase apéndice C). Por lo tanto, los nodos de la red recíproca vienen definidos por $P_k = kb$ (con $k \in \mathbb{Z}$) y se cumple que $p_{k'} = p_k + P_{k''}$ ya que $e^{ip_{k'} S_j} = e^{ip_k S_j} e^{iS_j P_{k''}} = e^{ip_k S_j}$. Del mismo modo, en la

segunda demostración, si $k \in \mathbb{Z}$ los nodos $M_k = k\kappa$ donde el escalar $\kappa = n$, son los de la red recíproca, ya que en este caso, se cumple que $e^{i\Theta_j M_k} = 1$. El papel de vector primitivo lo juega ahora el escalar κ . Ahora se cumple que $m_{k'} = m_k + M_{k''}$, $\forall m_{k'}$ ya que $e^{im_{k'}\Theta_j} = e^{im_k\Theta_j} e^{iM_{k''}\Theta_j} = e^{im_k\Theta_j}$. En adelante denotaremos los m_k simplemente como m .

NOTACIÓN 2.3.4. Previamente a deshacer el cambio de variable en la primera demostración, p_k se conoce en la teoría de Bloch convencional como pseudomomento lineal, tal y como hemos visto más arriba. Esta es la razón por la que denominamos *pseudomomento angular* a la variable m .

Veamos que el teorema 2.2.22 aparece ahora como un corolario del anterior resultado.

COROLARIO 2.3.5. (de valor máximo para m) *El módulo del pseudomomento angular $\bar{m} = |m|$ presenta un valor máximo, en particular, $\bar{m} \leq \frac{n}{2}$ si n es par y $\bar{m} \leq \frac{n-1}{2}$ si n es impar. El módulo del momento angular $\bar{l} = |l|$ no está acotado.*

DEMOSTRACIÓN. Como hemos visto, la red recíproca viene definida por los escalares $M_k = k\kappa$ con $k \in \mathbb{Z}$ y $\kappa = n$, y por lo tanto cualquier punto m' se puede expresar como $m' = m + M_k$, donde m pertenece a la celda de Wigner-Seitz o primera zona de Brillouin (véase apéndice B), ya que $e^{iM_k\Theta_j} = 1$. Por lo tanto, la primera zona de Brillouin se puede definir en el intervalo $[-\frac{n}{2}, \frac{n}{2}]$ ya que si m está fuera de este intervalo se puede expresar como un punto del intervalo mencionado. Por lo tanto, $\bar{m} \leq \frac{n}{2}$ si n es par y $\bar{m} \leq \frac{n-1}{2}$ si n es impar. En consecuencia, podemos tomar sólo valores de la variable m en cualquier intervalo de longitud n . Los definiremos, por tanto, entre $[-\frac{n}{2}, \frac{n}{2}]$.

En el caso de $\mathcal{O}(2)$ los l están discretizados pero no están acotados, pues no se puede definir una red de Bravais ya que no existe periodicidad en $V(\mathbf{x})$.

Veamos adicionalmente que las funciones con m' fuera de este intervalo son las mismas que aquellas con m definido dentro del mismo ya que cumplen la misma ecuación. Sea $\tilde{\psi}_{m'}(r, \theta) = e^{im'\theta} u_{m'}(r, \theta)$. Como $m' = m + M_k$ (con $M_k = kn$ y $k \in \mathbb{Z}$) se cumple que $\tilde{\psi}_{m'}(r, \theta) = e^{im\theta} e^{iM_k\theta} u_{m'}(r, \theta) = e^{im\theta} \hat{u}_{m'}(r, \theta)$ donde $\hat{u}_{m'}(r, \theta) = e^{iM_k\theta} u_{m'}(r, \theta)$. La función $\tilde{\psi}_{m'}$ cumple que $\tilde{L}((r, \theta), |\tilde{\psi}_{m'}|^2) \tilde{\psi}_{m'} = \mu_{m'} \tilde{\psi}_{m'}$, luego $\hat{u}_{m'}(r, \theta)$ cumple la ecuación:

$$\left[\tilde{L}((r, \theta), |\hat{u}_{m'}|^2) - \frac{m^2}{r^2} + \frac{2im}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \hat{u}_{m'}(r, \theta) = \mu_m \hat{u}_{m'}(r, \theta).$$

Sea $\tilde{\psi}_m(r, \theta) = e^{im\theta} u_m(r, \theta)$. De nuevo, se cumple que $\tilde{L}((r, \theta), |\tilde{\psi}_m|^2) \tilde{\psi}_m = \mu_m \tilde{\psi}_m$ y por lo tanto,

$$\left[\tilde{L}((r, \theta), |u_m|^2) - \frac{m^2}{r^2} + \frac{2im}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \right] u_m(r, \theta) = \mu_m u_m(r, \theta).$$

Luego cumple la misma ecuación con las mismas condiciones de contorno. Por lo tanto, necesariamente $u_m(r, \theta) = \hat{u}_{m'}(r, \theta)$ y cualquier función con $m' = m + M_k$ se puede reducir a la misma función con m . Consecuentemente, los m distintos están acotados. \square

OBSERVACIÓN 2.3.6. En adelante, vamos a considerar siempre la primera zona de Brillouin para m en $[-\frac{n}{2}, \frac{n}{2}]$.

COROLARIO 2.3.7. *Para cada valor de m en la primera zona de Brillouin y $\forall l$ hay un número infinito de soluciones con autovalores distintos separados entre sí un cierto valor discreto.*

DEMOSTRACIÓN. Sea $\tilde{\psi}(r, \theta) = e^{im\theta} u_m(r, \theta)$ una solución de Bloch expresada en coordenadas polares de la ecuación 2.2.1. Entonces $u_m(r, \theta)$ cumple la ecuación:

$$[\tilde{L}((r, \theta), |u_m|^2) - \frac{m^2}{r^2} + \frac{2im}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta}] u_m(r, \theta) = \mu_m u_m(r, \theta),$$

con la condición de contorno $u_m(r, \theta) = u_m(r, \theta + \epsilon)$ y $\epsilon = \frac{2\pi}{n}$. Este problema tiene una familia infinita de soluciones $u_{m,\alpha}(r, \theta)$ con autovalores distintos $\mu_{m,\alpha}$, donde el subíndice α sirve para ordenar las soluciones $\tilde{\psi}_{m,\alpha}$ con distintos autovalores $\mu_{m,\alpha}$.

Sea $\tilde{\psi}(r, \theta) = e^{il\theta} g_l(r)$ una solución de Bloch expresada en coordenadas polares de la ecuación 2.2.1 en el caso de simetría rotacional completa. Entonces $g_l(r)$ cumple la ecuación:

$$[\tilde{L}'(r, |g_l|^2) - \frac{l^2}{r^2}] g_l(r) = \mu_l g_l(r),$$

donde ahora \tilde{L}' solo incluye derivadas respecto a r . Igual que antes, este problema tiene una familia infinita de soluciones $g_{l,\alpha}(r)$ con autovalores distintos $\mu_{l,\alpha}$. Nuevamente, el subíndice α se utiliza para diferenciar las soluciones con el mismo momento angular l y distinto autovalor $\mu_{l,\alpha}$. \square

OBSERVACIÓN 2.3.8. Los anteriores corolarios significan que las soluciones autoconsistentes con simetría rotacional discreta de la ecuación 2.2.1 se ordenan según una estructura de bandas dentro de la primera zona de Brillouin. En el caso lineal, podemos escribir el operador $\tilde{L}_q = [\tilde{L}_0((r, \theta)) - \frac{q^2}{r^2} + \frac{2iq}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta}]$, donde \tilde{L}_0 es el operador L_0 expresado en coordenadas polares, y calcular los autovalores variando de modo continuo el valor del pseudomomento q . De este modo, podemos obtener la relación entre q y μ_q , lo cual permite obtener los intervalos de μ_q para los que no se obtiene solución, conocidos como *bandas prohibidas*⁴. Por otra parte, en el caso no lineal, puede variar no sólo m sino también $|\psi|^2$, lo cual da lugar a una relación adicional entre $\mu_{m,\alpha}$ y la potencia, definida como

$$(2.3.7) \quad P = \int |\psi|^2 d\mathbf{x}^2.$$

En el capítulo 3 veremos que se pueden calcular numéricamente este tipo de curvas y que las soluciones no lineales aparecen en las bandas prohibidas que se obtienen en el caso lineal.

2.4. Aplicación a un operador no lineal no real

Los resultados anteriores se modifican si el operador considerado no es real, como vamos a ver a continuación. Sea $\tilde{L}_2 = i\omega \frac{\partial}{\partial \theta}$ y denotemos como \tilde{L}_0, \tilde{L}_1 los operadores L_0, L_1 expresados en coordenadas polares. Vamos a estudiar las propiedades de simetría de las soluciones autoconsistentes de la ecuación:

⁴Nótese que sólo los valores que cumplen que $q = m$ pueden ser solución de la ecuación con condiciones periódicas.

$$(2.4.1) \quad \tilde{L}_\omega((r, \theta), |\tilde{\psi}|^2)\tilde{\psi} = \mu\tilde{\psi},$$

donde $\tilde{L}_\omega = \tilde{L}_0 + \tilde{L}_1 + \tilde{L}_2$. Al igual que anteriormente suponemos que $\mathcal{G} \equiv \mathcal{O}(2)$, \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} y que, $\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}$.

Podemos definir una solución autoconsistente simétrica del mismo modo en que se hizo en el apartado anterior. Para este tipo de soluciones es fácil ver que el teorema 2.2.13 y sus corolarios siguen siendo válidos. Basta con observar que el operador \tilde{L}_2 también es invariante bajo los elementos de los grupos de rotación y reflexión considerados. Por lo tanto, la forma funcional de estas soluciones seguirá siendo la presentada en los casos 1 y 2 para los grupos $\mathcal{O}(2)$ y \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} , respectivamente. Por consiguiente, seguimos denominando a las variables l y m momento angular y pseudomomento angular. Además, debido a que un grupo de orden finito tiene un número finito de representaciones irreducibles, el teorema 2.2.22 de valor máximo de \tilde{m} es también válido.

Sin embargo, ya no se cumple el lema 2.2.7. En su lugar podemos obtener el siguiente resultado:

LEMA 2.4.1. *Si $\tilde{\psi}_\nu$ es una solución autoconsistente con autovalor μ de operador \tilde{L}_ω , $\tilde{\psi}_\nu^*$ es solución autoconsistente del operador $\tilde{L}_{-\omega}$ con el mismo autovalor.*

DEMOSTRACIÓN. Se cumple que $\tilde{L}_0\tilde{\psi}_\nu + \tilde{L}_1(\mathbf{x}, |\tilde{\psi}_\nu|^2)\tilde{\psi}_\nu + i\omega\frac{\partial}{\partial\theta}\tilde{\psi}_\nu = \mu\tilde{\psi}_\nu$. Como anteriormente, $\tilde{L}_1(\mathbf{x}, |\tilde{\psi}_\nu|^2) = \tilde{L}_1(\mathbf{x}, |\tilde{\psi}_\nu^*|^2)$ ya que F es una función real y $|\tilde{\psi}_\nu|^2 = |\tilde{\psi}_\nu^*|^2$. Como $V(\mathbf{x})$ es una función real, si tomamos el complejo conjugado de la anterior ecuación tenemos: $\tilde{L}_0\tilde{\psi}_\nu^* + \tilde{L}_1(\mathbf{x}, |\tilde{\psi}_\nu^*|^2)\tilde{\psi}_\nu^* - i\omega\frac{\partial}{\partial\theta}\tilde{\psi}_\nu^* = \mu^*\tilde{\psi}_\nu^*$. Luego $\tilde{\psi}_\nu^*$ es autofunción con autovalor μ^* del operador $\tilde{L}_{-\omega} = \tilde{L}_0 + \tilde{L}_1(\mathbf{x}, |\tilde{\psi}_\nu^*|^2) - i\omega\frac{\partial}{\partial\theta}$. Finalmente, se sigue cumpliendo que todos los autovalores son reales, debido a que $\tilde{L} = \tilde{L}^\dagger$. \square

LEMA 2.4.2. *Si el grupo de simetría de $|\psi_\nu|^2$ es \mathcal{C}_n , necesariamente la multiplicidad de todos los autovalores es $\rho = 1$.*

DEMOSTRACIÓN. Todas las representaciones irreducibles de \mathcal{C}_n son unidimensionales. Aunque algunos pares de representaciones unidimensionales son complejo conjugados, ya no se cumple que ψ_ν y ψ_ν^* sean soluciones del mismo operador con el mismo autovalor. Por lo tanto esta degeneración ya no existe, y las funciones de distintas representaciones irreducibles pertenecen a subespacios distintos y tienen, por tanto, distintos autovalores. \square

LEMA 2.4.3. *Si el grupo de simetría de $|\psi_\nu|^2$ es \mathcal{C}_{nv} , la multiplicidad de los autovalores es $\rho \leq 2$.*

DEMOSTRACIÓN. Se debe a que las representaciones irreducibles de \mathcal{C}_{nv} son a lo sumo bidimensionales. \square

LEMA 2.4.4. *Si el grupo de simetría de $|\psi_\nu|^2$ es $\mathcal{O}(2)$, entonces sus autofunciones son unidimensionales o bidimensionales.*

DEMOSTRACIÓN. Se debe a que las representaciones irreducibles de $\mathcal{O}(2)$ son a lo sumo bidimensionales. \square

Además, en este caso deja de ser cierto el lema 2.2.27 debido a que ya no se cumple el lema 2.2.7. Sin embargo, sí que se cumple la siguiente versión del lema 2.2.28:

PROPOSICIÓN 2.4.5. *Las soluciones autoconsistentes simétricas pertenecientes a representaciones irreducibles bidimensionales son no reales.*

DEMOSTRACIÓN. Demostremos que una solución autoconsistente simétrica que pertenece a una representación irreducible bidimensional debe ser no real. Basta con observar que, las soluciones pertenecientes a representaciones irreducibles bidimensionales se deben transformar, bajo la acción de rotaciones \mathcal{C}_n , en un número no real $\epsilon^p = e^{\frac{2\pi}{n}p}$ con $p \in \mathbb{Z}$, es decir, si \mathcal{T}_j es una rotación del grupo considerado, se cumple que $\mathcal{T}_j\psi_\nu = \epsilon^p\psi_\nu$. En cambio, las soluciones pertenecientes a representaciones irreducibles unidimensionales se transforman bajo todos los elementos $\mathcal{T}_i \in \mathcal{G}$ sólo por un cambio de signo, es decir, $\mathcal{T}_i\psi_\nu = \pm\psi_\nu$. Esto se puede observar en las tablas de caracteres de cada uno de los grupos considerados. La primera condición sólo puede cumplirse con funciones no reales. \square

También deja de ser cierto que las soluciones con $l = 0$ en sistemas con simetría $\mathcal{O}(2)$ e invariancia rotacional completa o con $m = 0, \pm\frac{n}{2}$ si n es par o $m = 0$ si n es impar en sistemas invariantes bajo los elementos de los grupos \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} sean reales. Sin embargo se sigue cumpliendo la proposición 2.2.33, aunque sólo para las soluciones con simetrías $\mathcal{O}(2)$ o \mathcal{C}_{nv} , ya que sólo éstas presentan representaciones bidimensionales (en este caso ya no se puede considerar los pares de representaciones irreducibles \mathcal{C}_n cuyos caracteres son mutuamente conjugados como una única representación bidimensional).

Dado que el operador \tilde{L}_ω conmuta con el operador de rotación \mathcal{C}_Θ , se puede demostrar siguiendo los mismos pasos el teorema de Bloch angular y sus corolarios. Sin embargo, las ecuaciones que cumplen las funciones $u(r, \theta)$ son ligeramente distintas. Repetamos pues el razonamiento final del corolario 2.3.5.

Veamos ahora que las funciones con m' fuera de este intervalo son las mismas que aquellas con m definido dentro del mismo, salvo en el caso de $\mathcal{O}(2)$. Sea $\tilde{\psi}_{m'}(r, \theta) = e^{im'\theta}u_{m'}(r, \theta)$. Como sigue siendo cierto que $m' = m + M$, con $M = \theta_m n$ y $\theta_m \in \mathbb{Z}$, se cumple que $\tilde{\psi}_{m'}(r, \theta) = e^{im\theta}e^{i\theta_m n\theta}u_{m'}(r, \theta) = e^{im\theta}\hat{u}_{m'}(r, \theta)$ donde $\hat{u}_{m'}(r, \theta) = e^{i\theta_m n\theta}u_{m'}(r, \theta)$. La función $\tilde{\psi}_{m'}$ cumple que $\tilde{L}((r, \theta), |\tilde{\psi}_{m'}|^2)\tilde{\psi}_{m'} = \mu_{m'}\tilde{\psi}_{m'}$, luego $\hat{u}_{m'}(r, \theta)$ cumple la ecuación:

$$\left[\tilde{L}_0 + \tilde{L}_1((r, \theta), |\hat{u}_{m'}|^2) - \left(\frac{m^2}{r^2} + \omega m \right) + i \left(\frac{2m}{r^2} + i\omega \right) \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \hat{u}_{m'} = \mu_{m'}\hat{u}_{m'}.$$

Sea $\tilde{\psi}_m(r, \theta) = e^{im\theta}u_m(r, \theta)$. De nuevo, se cumple que $\tilde{L}((r, \theta), |\tilde{\psi}_m|^2)\tilde{\psi}_m = \mu_m\tilde{\psi}_m$ y por lo tanto,

$$\left[\tilde{L}_0 + \tilde{L}_1((r, \theta), |u_m|^2) - \left(\frac{m^2}{r^2} + \omega m \right) + i \left(\frac{2m}{r^2} + i\omega \right) \frac{\partial}{\partial \theta} \right] u_m = \mu_m u_m.$$

Luego cumple la misma ecuación con las mismas condiciones de contorno. Por lo tanto, necesariamente $u_m(r, \theta) = \hat{u}_{m'}(r, \theta)$ y cualquier función con $m' = m + M$

se puede reducir a la misma función con m . Consecuentemente, los m distintos están acotados.

Para las funciones con simetría $\mathcal{O}(2)$, el razonamiento es idéntico y, por lo tanto, los valores de l no tienen cota máxima.

COROLARIO 2.4.6. *Para cada valor de m o l en la primera zona de Brillouin hay un número infinito de soluciones con autovalores distintos separados entre sí un cierto valor discreto.*

DEMOSTRACIÓN. Sea $\tilde{\psi}(r, \theta) = e^{im\theta} u_m(r, \theta)$ una solución de Bloch de la ecuación 2.2.1. Entonces $u_m(r, \theta)$ cumple la ecuación:

$$\begin{aligned} \left[\tilde{L}_0 + \tilde{L}_1((r, \theta), |u_m|^2) - \left(\frac{m^2}{r^2} + \omega m \right) + i \left(\frac{2m}{r^2} + i\omega \right) \frac{\partial}{\partial \theta} \right] u_m = \\ = \mu_m u_m(r, \theta), \end{aligned}$$

con la condición de contorno $u_m(r, \theta) = u_m(r, \theta + \epsilon)$. Este problema tiene una familia infinita de soluciones $u_{m,\alpha}(r, \theta)$ con autovalores distintos $\mu_{m,\alpha}$. \square

OBSERVACIÓN. Sea el operador $\tilde{L}_{q,\omega} = [\tilde{L}_0((r, \theta)) - \left(\frac{q^2}{r^2} + \omega m \right) + i \left(\frac{2q}{r^2} + i\omega \right) \frac{\partial}{\partial \theta}]$ con $q \in \mathbb{R}$. Si fijamos ω y variamos de modo continuo el valor del pseudomomento q , podemos calcular los autovalores de cada operador $\tilde{L}_{q,\omega}$ que reproduce la obtenida en el apartado anterior para $\omega = 0$. Nuevamente, para cada ω podemos obtener la relación entre q y μ_q , lo cual permite obtener los intervalos de $\mu_{q,\omega}$ para los que no se obtiene solución que darán lugar a las *bandas prohibidas*⁵. Sin embargo, podemos variar la estructura de bandas variando ω , que tiene el efecto neto de una variación en q , con lo que hay una relación adicional entre ω y $\mu_{q,\alpha,\omega}$.

En el caso no lineal puede variar no sólo m y ω , sino también $|\psi|^2$, lo cual da lugar a otra relación entre $\mu_{m,\alpha,\omega}$ y la potencia.

2.5. Propiedades cerca del eje de simetría rotacional

Veamos que se pueden obtener predicciones sobre la forma funcional de las soluciones autoconsistentes simétricas cerca del eje de simetría rotacional.

NOTACIÓN 2.5.1. Denotamos por $\mathbf{x}_s \in \Omega$ a la intersección entre el eje de simetría rotacional y el plano $\mathbf{x} = (x, y)$. En adelante denotaremos la función en coordenadas polares sin tilde, $\psi(r, \theta)$, para no recargar excesivamente la notación.

PROPOSICIÓN 2.5.2. *Sea $\psi(r, \theta)$ una solución de la ecuación 2.2.1 o de 2.4.1 con simetría rotacional discreta o continua perteneciente a la j -ésima representación con momento angular l o pseudomomento angular m , con $m \neq \frac{n}{2}$ y $m \neq 0$. Supongamos que (i) $|\psi(r, \theta)| \stackrel{r \rightarrow 0}{\approx} |\psi_0| + \delta\psi$, donde $\psi_0 \in \mathbb{R}$ y $\delta\psi \ll \psi_0$, (ii) $L_{NL}(|\psi|) \stackrel{r \rightarrow 0}{\approx} L_{NL}(|\psi_0|) + \delta L_{NL}$, donde $F(|\psi_0|) \in \mathbb{R}$ y $\delta L_{NL} \ll F(|\psi_0|)$, y (iii) $V(r, \theta) \stackrel{r \rightarrow 0}{\approx} V_0 + \delta V$, donde $V_0 \in \mathbb{R}$ y $\delta V \ll V_0$. Entonces se cumple que $\exists \epsilon > 0$, $\epsilon \in \mathbb{R}$, tal que $\forall r < \epsilon$, $\psi(r, \theta)$ es proporcional a $r^l e^{il\theta} + \mathcal{O}(r^{l+1})$ en el caso $\mathcal{O}(2)$ o a $r^m e^{im\theta} + \mathcal{O}(r^{m+1})$ en los casos \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} .*

⁵Al igual que en el apartado anterior, sólo los valores que cumplen que $q = m$ pueden ser solución de la ecuación con condiciones periódicas.

DEMOSTRACIÓN. Vamos a estudiar primero el caso con simetría rotacional discreta. Sea $\psi(r, \theta)$ una solución autoconsistente simétrica de la ecuación 2.2.1 o de 2.4.1 con simetría rotacional discreta que pertenece a la representación j -ésima del grupo correspondiente, es decir, \mathcal{C}_n ó \mathcal{C}_{nv} . En este caso la función presenta pseudomomento angular m bien definido.

Estudiemos en primer lugar las soluciones simétricas de la ecuación 2.2.1. Si la función presenta invariancia rotacional discreta, debe tener la forma $\psi_{m,\alpha}(r, \theta) = e^{im\theta} u_{m,\alpha}(r, \theta)$, donde $u_{m,\alpha}(r, \theta) = u_{m,\alpha}(r, \theta + t\frac{2\pi}{n})$, $t \in \mathbb{N}$, m es el pseudomomento angular y α es el índice de la banda. Tal y como se vió en 2.3.5 las funciones $u_{m,\alpha}$ cumplen:

$$(2.5.1) \quad \left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{m^2}{r^2} - i \frac{2m}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + V(r, \theta) \right. \\ \left. + F(|\psi|^2) \right] u_{m,\alpha}(r, \theta) = \mu_{m,\alpha} u_{m,\alpha}(r, \theta).$$

Como las funciones $u_{m,\alpha}(r, \theta)$ son periódicas en θ podemos desarrollarlas en serie de Fourier:

$$(2.5.2) \quad u_{m,\alpha}(r, \theta) = \sum_k e^{ikn\theta} u_{m,\alpha}^k(r).$$

Podemos hacer lo propio con la función $V(r, \theta)$:

$$(2.5.3) \quad V(r, \theta) = \sum_{k'} e^{ik'n\theta} V^{k'}(r).$$

Nótese que $u_{m,\alpha}$ puede pertenecer a un subgrupo $\mathcal{G}' \subset \mathcal{G}$, si \mathcal{G} es el grupo de invariancia de $V(r, \theta)$. En este caso, el índice n hace referencia al orden de simetría del subgrupo \mathcal{G}' y desarrollamos ambas funciones según la periodicidad correspondiente al grupo de simetría \mathcal{G}' . Introduciendo los desarrollos 2.5.2 y 2.5.3 en la ecuación 2.5.1 se obtiene:

$$\begin{aligned} & - \sum_k e^{ikn\theta} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u_{m,\alpha}^k(r) - \sum_k e^{ikn\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} u_{m,\alpha}^k(r) + \sum_k e^{ikn\theta} \frac{m^2}{r^2} u_{m,\alpha}^k(r) \\ & + \frac{2m}{r^2} \sum_k kn e^{ikn\theta} u_{m,\alpha}^k(r) + \frac{1}{r^2} \sum_k k^2 n^2 e^{ikn\theta} u_{m,\alpha}^k(r) + \sum_k e^{ikn\theta} F(|\psi|^2) u_{m,\alpha}^k(r) \\ & + \sum_{k''} \sum_k e^{ik''n\theta} V_{k''-k}(r) u_{m,\alpha}^k(r) = \mu_{m,\alpha} \sum_k e^{ikn\theta} u_{m,\alpha}^k(r), \end{aligned}$$

donde $k'' = k' + k$. Podemos obtener una ecuación para cada momento \bar{k} si multiplicamos la anterior ecuación por $e^{-i\bar{k}n\theta}$ e integramos la coordenada angular θ entre 0 y 2π :

$$\begin{aligned}
& - \sum_k \int d\theta e^{i(k-\bar{k})n\theta} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u_{m,\alpha}^k(r) - \sum_k \int d\theta e^{i(k-\bar{k})n\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} u_{m,\alpha}^k(r) \\
& + \sum_k \int d\theta e^{i(k-\bar{k})n\theta} \frac{m^2}{r^2} u_{m,\alpha}^k(r) + \frac{2m}{r^2} \sum_k kn \int d\theta e^{i(k-\bar{k})n\theta} u_{m,\alpha}^k(r) \\
& + \frac{1}{r^2} \sum_k k^2 n^2 \int d\theta e^{i(k-\bar{k})n\theta} u_{m,\alpha}^k(r) + \sum_{k''} \int d\theta \sum_k e^{i(k''-\bar{k})n\theta} V_{k''-k}(r) u_{m,\alpha}^k(r) \\
& + \sum_k \int d\theta e^{i(k-\bar{k})n\theta} F(|\psi|) u_{m,\alpha}^k(r) = \mu_{m,\alpha} \sum_k \int d\theta e^{i(k-\bar{k})n\theta} u_{m,\alpha}^k(r).
\end{aligned}$$

Resolviendo las integrales se obtiene:

$$\begin{aligned}
& - \frac{d^2}{dr^2} u_{m,\alpha}^{\bar{k}}(r) - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} u_{m,\alpha}^{\bar{k}}(r) + \frac{m^2}{r^2} u_{m,\alpha}^{\bar{k}}(r) + \frac{2m}{r^2} \bar{k}n u_{m,\alpha}^{\bar{k}}(r) \\
& + \frac{1}{r^2} \bar{k}^2 n^2 u_{m,\alpha}^{\bar{k}}(r) + \sum_k V_{\bar{k}-k}(r) u_{m,\alpha}^k(r) + \sum_k F^{k-\bar{k}}(|\psi|^2) u_{m,\alpha}^k(r) = \mu_{m,\alpha} u_{m,\alpha}^{\bar{k}}(r),
\end{aligned}$$

donde se ha definido

$$F^{k-\bar{k}}(|\psi|^2) \equiv \langle \bar{k} | F(|\psi|^2) | k \rangle = \int_0^{2\pi} d\theta e^{i(k-\bar{k})n\theta} F(|\psi(r,\theta)|^2).$$

Reagrupando términos se obtiene el conjunto de ecuaciones acopladas:

$$\begin{aligned}
(2.5.4) \quad & \left[-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{(m + \bar{k}n)^2}{r^2} \right] u_{m,\alpha}^{\bar{k}}(r) + \sum_k V_{\bar{k}-k}(r) u_{m,\alpha}^k(r) \\
& + \sum_k F^{k-\bar{k}}(|\psi|^2) u_{m,\alpha}^k(r) = \mu_{m,\alpha} u_{m,\alpha}^{\bar{k}}(r).
\end{aligned}$$

Utilizando los supuestos (i), (ii) y (iii) cuando r es suficientemente pequeño se puede escribir $V(r, \theta) \approx V_0$, $|\psi(r, \theta)| \approx \psi_0$ y $F(|\psi|^2) \approx F(|\psi_0|^2)$, donde V_0 , ψ_0 , and $F(|\psi_0|^2) \in \mathbb{R}$. Esto permite resolver $V_{\bar{k}-k}(r)$ y $F^{k-\bar{k}}(|\psi|^2)$ cerca de $r = 0$:

$$V_{\bar{k}-k}(r) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i(\bar{k}-k)n\theta} V(r, \theta) \stackrel{r \rightarrow 0}{\approx} \delta_{\bar{k},k} V_0 + \delta V_{\bar{k}-k}(r),$$

y

$$F^{k-\bar{k}}(|\psi|) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{-i(\bar{k}-k)n\theta} F(|\psi|^2) \stackrel{r \rightarrow 0}{\approx} \delta_{\bar{k},k} F(|\psi_0|^2) + \delta L_{NL}^{k-\bar{k}}.$$

Con lo que el conjunto de ecuaciones 2.5.4 se comporta cerca de $r = 0$ como:

$$\begin{aligned}
& \left[-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{(m + \bar{k}n)^2}{r^2} \right] u_{m,\alpha}^{\bar{k}}(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\approx} (\mu_{m,\alpha} - V_0 - L_{NL}(|\psi_0|)) u_{m,\alpha}^{\bar{k}}(r) \\
& = O(r^{|m+\bar{k}n|}) = K u_{m,\alpha}^{\bar{k}}(r),
\end{aligned}$$

cuya solución es:

$$u_{m,\alpha}^{\bar{k}}(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\approx} ar^{|m+\bar{k}n|} + O(r^{|m+\bar{k}n|+1}).$$

Tenemos que analizar el comportamiento de $\eta(k) = |m + kn|$ para diferentes m y k , con el fin de determinar la contribución dominante cuando $r \rightarrow 0$. Para ello,

vamos a tener en cuenta el teorema 2.2.22, según el cual $-\frac{n}{2} \leq m \leq \frac{n}{2}$. Utilizando esta propiedad podemos obtener las siguientes condiciones:

i) $m \geq 0$. Para $k = 1, 2, 3, \dots$, $\eta(k) = |m + kn| = kn + m$ dado que $kn > 0$ y $m > 0$. Adicionalmente, $\eta(-k) = |m - kn| = kn - m$, ya que $kn \geq \frac{n}{2} \geq m$. Por lo tanto $\eta(-k) \leq \eta(k)$, $k = 0, 1, 2, 3, \dots$, (nótese que $\eta(k) = \eta(-k)$ si $m = 0$).

Por otra parte, para $k = 0, 1, \dots$, $\eta(-(k+1)) = |m - (k+1)n| = (k+1)n - m$ ya que $(k+1)n > \frac{n}{2} \geq m$. Además, $kn + m \leq kn + (n - m) = (k+1)n - m$ ya que para $m \leq \frac{n}{2}$, $2m \leq n \rightarrow m \leq n - m$. Por lo tanto $\eta(k) = kn + m \leq (k+1)n - m = \eta(-(k+1))$. La igualdad se obtiene si $m = \frac{n}{2}$. Combinando ambas condiciones:

$$(2.5.5) \quad \eta(-k) \leq \eta(k) \leq \eta(-(k+1)); \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots$$

ii) $m \leq 0$. Para $k = 1, 2, \dots$, $\eta(k) = |m + kn| = kn + m$ ya que $kn > \frac{n}{2} \geq -m \geq 0$. Además, como $-kn < 0$ y $m < 0$ se cumple que $m - kn < 0$ y $\eta(-k) = |m - kn| = kn - m$. Entonces, dado que $kn > 0$, $\eta(k) \leq \eta(-k)$, $k = 0, 1, 2, 3, \dots$ (Nótese de nuevo que para $k = 0$, $\eta(k) = \eta(-k)$).

Por otra parte, para $k = 0, 1, \dots$, $\eta(k+1) = |m + (k+1)n| = (k+1)n + m$, porque $(k+1)n > \frac{n}{2} \geq -m$. Teniendo en cuenta que $0 \leq -m \leq \frac{n}{2}$, $0 \leq -2m \leq n \rightarrow -m \leq n + m$ se obtiene que $kn - m \leq kn + (n + m) = (k+1)n + m$ (La igualdad se produce si $m = \frac{n}{2}$) y finalmente $\eta(-k) \leq \eta(k+1)$, $k = 0, 1, 2, 3, \dots$. En definitiva,

$$(2.5.6) \quad \eta(k) \leq \eta(-k) \leq \eta(k+1); \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Analizaremos los casos con $m = 0$ y $m = \pm \frac{n}{2}$ en resultados posteriores. Si $m \neq \frac{n}{2}$ y $m \neq 0$ el signo de igualdad nunca se obtiene en las desigualdades 2.5.5 o 2.5.6 (salvo, evidentemente, si $k = 0$), y por tanto, la contribución dominante se obtiene si $k = 0$.

Luego si $m \neq \frac{n}{2}$ y $m \neq 0$, la contribución dominante a ψ se produce para $k = 0$. Por lo tanto, la función se comporta como

$$\psi(r, \theta) \propto e^{im\theta} r^{|m|},$$

en el límite $r \rightarrow 0$.

En el caso de que $\psi(r, \theta)$ sea una solución autoconsistente simétrica de la ecuación 2.2.1 o de 2.4.1 con simetría rotacional $\mathcal{O}(2)$, se obtiene el resultado repitiendo el razonamiento y teniendo en cuenta que $V(r, \theta)$ y $F(|\psi|^2)$ son periódicos en θ con periodo 2π .

En el caso de soluciones simétricas de la ecuación 2.4.1 se puede razonar de modo análogo pues el término \tilde{L}_2 en el operador no modifica la línea de razonamiento. \square

COROLARIO 2.5.3. *Bajo las mismas condiciones que el teorema anterior, si $m = \frac{n}{2}$, n par, la función cumple que $\exists \varepsilon > 0$, $\varepsilon \in \mathbb{R}$, tal que $\forall r < \varepsilon$, $\psi(r, \theta)$ es proporcional a $2r^{|\frac{n}{2}|} \cos(\pm \frac{n}{2}\theta) + \mathcal{O}(r^{\frac{n}{2}+1})$.*

DEMOSTRACIÓN. Si $m = \pm \frac{n}{2}$, se cumple que $\eta(\pm k) = kn \pm m = kn \pm \frac{n}{2}$ y $\eta(\mp(k+1)) = (k+1)n \mp m = kn \pm \frac{n}{2}$. Por lo tanto, el signo de igualdad se obtiene entre $\pm k$ y $\mp(k+1)$, es decir, $\eta(\pm k) = \eta(\mp(k+1))$ mientras que $\eta(\mp k) < \eta(\pm k)$. Es

decir, $\eta(0) = \eta(\mp 1) < \eta(\pm 1) = \eta(\mp 2) < \dots$. Por lo tanto, las contribuciones dominantes se obtienen para $k = 0$ y $k = \mp 1$, si $m = \pm \frac{n}{2}$. Consecuentemente, para $k = 0$ y $k = \mp 1$ se obtiene que $\psi(r, \theta) \propto e^{\pm i \frac{n}{2} \theta} r^{|\frac{n}{2}|} + e^{\mp i \frac{n}{2} \theta} r^{|\frac{n}{2}|} = 2r^{|\frac{n}{2}|} \left(\frac{e^{\pm i \frac{n}{2} \theta} + e^{\mp i \frac{n}{2} \theta}}{2} \right) = 2r^{|\frac{n}{2}|} \cos(\pm \frac{n}{2} \theta)$. Nótese que las soluciones con $m = \pm \frac{n}{2}$ son la misma pues esta representación es unidimensional y, por lo tanto, basta con considerar $m = \frac{n}{2}$. \square

Luego la función en el origen no se comporta como en el caso de soluciones tipo vórtice, pero sí se puede concluir que tiende a una función real. Nótese que si no se comportara como una función real en \mathbf{x}_s , habría contradicción con la proposición 2.2.27, ya que las soluciones con $m = \frac{n}{2}$ son soluciones tipo solitón nodal y pertenecen a representaciones irreducibles unidimensionales.

COROLARIO 2.5.4. *Bajo las mismas condiciones que el teorema anterior, si $m = 0$, la función cumple que $\exists \varepsilon > 0$, $\varepsilon \in \mathbb{R}$, tal que $\forall r < \varepsilon$, $\psi(r, \theta)$ es proporcional a $cte + \mathcal{O}(r)$, $cte \in \mathbb{R}$.*

DEMOSTRACIÓN. Si $m = 0$, se cumple que $\eta(\pm k) = kn \pm m = kn$ y $\eta(\mp k) = kn$. Por lo tanto, el signo de igualdad se obtiene entre $\pm k$ y $\mp k$, es decir, $\eta(\pm k) = \eta(\mp k)$ mientras que $\eta(\pm k) < \eta(\mp(k+1))$. Es decir, $\eta(0) < \eta(\mp 1) = \eta(\pm 1) < \eta(\mp 2) \dots$. Por lo tanto, la contribución dominante se obtiene para $k = 0$, si $m = 0$. Consecuentemente, $\psi(r, \theta) \propto r^{|0|} = 1$. \square

Luego la función en el origen también tiende a una función real, en particular a una constante. Nótese que si no se comportara como una función real en \mathbf{x}_s , habría contradicción con la proposición 2.2.27, ya que las soluciones con $m = 0$ son soluciones tipo solitón fundamental y pertenecen a representaciones irreducibles unidimensionales.

OBSERVACIÓN 2.5.5. Nótese que cuando $m = \frac{n}{2}$ nada impide que el coeficiente de proporcionalidad que acompaña al término $2r^{|\frac{n}{2}|} \left(\frac{e^{\pm i \frac{n}{2} \theta} + e^{\mp i \frac{n}{2} \theta}}{2} \right)$ se anule. En ese caso, los siguientes términos dominantes son para $k = \pm 1$ y $k = \mp 2$ y entonces $\psi(r, \theta) \propto e^{\pm i 3 \frac{n}{2} \theta} r^{|3 \frac{n}{2}|} + e^{\mp i 3 \frac{n}{2} \theta} r^{|3 \frac{n}{2}|} = 2r^{|3 \frac{n}{2}|} \left(\frac{e^{\pm i 3 \frac{n}{2} \theta} + e^{\mp i 3 \frac{n}{2} \theta}}{2} \right) = 2r^{|3 \frac{n}{2}|} \cos(\pm 3 \frac{n}{2} \theta)$. En general esto puede suceder para todas las parejas de coeficientes que dan lugar a términos de la forma $2r^{|p \frac{n}{2}|} \left(\frac{e^{\pm i p \frac{n}{2} \theta} + e^{\mp i p \frac{n}{2} \theta}}{2} \right)$, $p \in \mathbb{N}$ e impar. Como la solución es simétrica siempre se deben anular los coeficientes que dan lugar a este tipo de términos. Por lo tanto, en general $\psi(r, \theta)$ es proporcional $2r^{|p \frac{n}{2}|} \cos(\pm p \frac{n}{2} \theta) + \mathcal{O}(r^{p \frac{n}{2} + 1})$, $p \in \mathbb{N}$ e impar.

Si $m = 0$ y el coeficiente de la constante se anula, los términos con $k = \pm 1$ dan lugar a contribuciones de mismo orden y en consecuencia $\psi(r, \theta) \propto e^{in\theta} r^{|n|} + e^{-in\theta} r^{|n|} = 2r^{|n|} \left(\frac{e^{in\theta} + e^{-in\theta}}{2} \right) = 2r^{|n|} \cos(n\theta)$. Del mismo modo, en general podemos escribir que $\psi(r, \theta)$ es proporcional $2r^{|p \frac{n}{2}|} \cos(\pm p \frac{n}{2} \theta) + \mathcal{O}(r^{p \frac{n}{2} + 1})$, $p \in \mathbb{N}$ y, en este caso, par.

Estas conclusiones tienen gran relevancia al estudiar el comportamiento de la solución frente a reflexiones especulares. Veremos en el capítulo 3 ejemplos de soluciones tipo solitón fundamental donde el primer término se anula y los términos dominantes se obtienen si $k = \pm 1$.

2.6. Singularidades de fase, carga, vorticidad y líneas nodales

Supongamos que $\psi(\mathbf{x})$, con $\mathbf{x} \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ es una función compleja que es solución de las ecuaciones 2.2.1 o 2.4.1. Se dice que dicha función presenta una *singularidad de fase* en \mathbf{x}_0 , si en dicho punto $Re(\psi(\mathbf{x}_0)) = Im(\psi(\mathbf{x}_0)) = 0$ [51, 52]. Si la singularidad de fase aparece a lo largo de una línea continua $\gamma \in \Omega$, es decir, $\forall \mathbf{x} \in \gamma$ se cumple que $Re(\psi(\mathbf{x})) = Im(\psi(\mathbf{x})) = 0$, entonces decimos que γ es una *línea nodal*. Denotaremos por \mathbf{x}_j con $j = 1, \dots, V$ y por $\gamma_{j'}$ con $j' = 1, \dots, V'$ a las singularidades y líneas nodales, respectivamente, que presenta la función ψ .

A cada singularidad se le puede asignar la siguiente cantidad:

DEFINICIÓN 2.6.1. Llamamos *vorticidad o carga topológica de la singularidad j -ésima* a $v_j = \frac{1}{2\pi} \oint_{\zeta_j} \nabla \varphi ds$, donde $\varphi = \arctan\left(\frac{Im(\psi)}{Re(\psi)}\right)$ es la fase de ψ y s recorre un circuito cerrado $\zeta_j \in \mathbb{R}^2$ suficientemente cercano a \mathbf{x}_j , de modo que encierra únicamente esta singularidad.

Por otra parte, la *vorticidad*, denotada por v , se define como $v = \frac{1}{2\pi} \oint \nabla \varphi ds$, donde s recorre un circuito cerrado ζ cualquiera. Nótese que, dado que φ es una variable compacta, $v_j \in \mathbb{Z}$ y $v \in \mathbb{Z}$. Veamos que el valor de la vorticidad v está en relación con el número de singularidades \mathbf{x}_j que encierra el circuito ζ y la vorticidad o carga v_j de cada una.

LEMA 2.6.2. *Sea ζ un circuito cerrado que encierra en su interior V singularidades de carga v_j , $j = 1, \dots, V$ y que no corta líneas nodales. Si calculamos la vorticidad v a lo largo de dicho circuito se cumple que $v = \sum_{j=1}^V v_j$.*

DEMOSTRACIÓN. Denominemos el área encerrada por ζ como Ω_η . Dividamos Ω_η en V áreas Ω_{ζ_j} , cada una de las cuales contiene una única de las singularidades \mathbf{x}_j , $j = 1, \dots, V$. Sea ζ_j la frontera de Ω_{ζ_j} . Evidentemente, los ζ_j son circuitos cerrados que encierran una única singularidad, y por tanto la carga calculada a lo largo de estos circuitos es v_j , $\forall j$. Por tanto, podemos escribir $v = \frac{1}{2\pi} \oint_{\zeta} \nabla \varphi ds = \sum_{j=1}^V \frac{1}{2\pi} \oint_{\zeta_j} \nabla \varphi ds = \sum_{j=1}^V v_j$. \square

Vamos a analizar únicamente líneas nodales que sean curvas cerradas o bien que comiencen y terminen en algún punto de la frontera Ω . Por lo tanto, en adelante denotaremos como Ω_1 y Ω_2 las dos regiones en las que las líneas nodales consideradas dividen el dominio Ω . Sea ζ una curva que corta a la línea nodal en \mathbf{x}_ζ . La fase φ evaluada a lo largo ζ presenta una discontinuidad tipo escalón en \mathbf{x}_ζ cuyo valor denotamos por $d(\zeta)$. Vamos a ocuparnos únicamente de líneas nodales que cumplan que $d(\zeta_i) = d$ con d constante $\forall \zeta_i$ que corte a la línea nodal desde Ω_1 hacia Ω_2 y $-d$ si la corta en sentido contrario. En general, nos ocuparemos de líneas nodales para las que $d = \pm\pi$.

2.6.1. Singularidades de fase en el eje de simetría rotacional.

PROPOSICIÓN 2.6.3. *Bajo las mismas condiciones que la proposición 2.5.2, existe siempre una curva cerrada ζ en torno a \mathbf{x}_s para la que la vorticidad es igual al momento angular l o al pseudomomento angular m , siempre que $m \neq \frac{n}{2}$ y $m \neq 0$.*

Es decir, para algún ζ suficientemente cercano a \mathbf{x}_s se cumple que

$$(2.6.1) \quad v_{\mathbf{x}_s} = \oint_{\zeta} \nabla \varphi \cdot d\mathbf{l} = m \text{ o } l,$$

donde φ es la fase de una solución simétrica con simetría rotacional continua o discreta.

DEMOSTRACIÓN. Tal y como se demostró en 2.5.2 se cumple que:

$$\psi(r, \theta) \stackrel{r \rightarrow 0}{\simeq} ar^{|m|} e^{im\theta} + \delta\psi$$

donde

$$\delta\psi = \mathcal{O}(r^{|m|+1}).$$

Podemos escribir

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta) &= |\psi| e^{i\varphi} \\ &= ar^{|m|} (\cos m\theta + i \sin m\theta) + \delta u + i\delta v, \end{aligned}$$

donde $\delta u, \delta v = \mathcal{O}(r^{|m|+1})$ y

$$|\psi| e^{i\varphi} = |\psi| (\cos \varphi + i \sin \varphi).$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \tan \varphi &= \frac{ar^{|m|} \sin m\theta + \delta v}{ar^{|m|} \cos m\theta + \delta u} \\ &= \tan m\theta + \frac{\delta v}{ar^{|m|} \cos m\theta} - \frac{\delta u}{ar^{|m|} \cos m\theta} \tan m\theta - \frac{\delta u \delta v}{(ar^{|m|} \cos m\theta)^2} \\ &\equiv \tan m\theta + \delta t \quad \delta t = \mathcal{O}(r) \\ \varphi &= \tan^{-1} [\tan m\theta + \delta t] \end{aligned}$$

Si se realiza la expansión en serie de Taylor de la anterior función en torno a $\tan m\theta$ se obtiene

$$\varphi = m\theta + \delta\varphi \quad \mathcal{O}(\delta\varphi) = \mathcal{O}(\delta t) = \mathcal{O}(r).$$

Sin pérdida de generalidad, evaluamos la integral tomando como circuito ζ una circunferencia de radio ϵ (C_ϵ):

$$v_{\mathbf{x}_s} = m + \frac{1}{2\pi} \oint_{C_\epsilon} (\nabla \delta\varphi) \cdot d\mathbf{l} = m + \mathcal{O}(\epsilon).$$

Con lo que se obtiene, cuando $\epsilon \rightarrow 0$:

$$v_{\mathbf{x}_s} = m.$$

De un modo análogo se puede razonar en el caso que la solución presente simetría rotacional continua y, por tanto, momento angular l . \square

OBSERVACIÓN 2.6.4. La anterior proposición equivale a afirmar que siempre existe una singularidad de carga l o m situada en el eje de simetría.

COROLARIO 2.6.5. *Las soluciones simétricas de la ecuación 2.2.1 o de 2.4.1 con simetría rotacional discreta o continua de tipo vórtice presentan una singularidad de carga $v_s = l$ ó $v_s = m$ en \mathbf{x}_s y, además, $\psi_0 = |\psi(r=0, \theta)| = 0$.*

DEMOSTRACIÓN. Según la definición de soluciones tipo vórtice 2.2.34, $l \neq 0$ o bien $\bar{m} = 1, \dots, \frac{n}{2} - 1$ si n es par y $\bar{m} = 1, \dots, \frac{n-1}{2}$ si n es impar. Por lo tanto, según 2.6.3 deben presentar una singularidad de fase con carga $l \neq 0$ o $m \neq 0$ en \mathbf{x}_s . Dado que hay una singularidad en \mathbf{x}_s la amplitud debe anularse. \square

2.6.2. Líneas nodales en el eje de simetría rotacional.

PROPOSICIÓN 2.6.6. *Supongamos que $m = \frac{n}{2}$ con n par. Entonces, bajo las mismas condiciones que en la proposición 2.5.2 existe siempre una curva cerrada ζ en torno a \mathbf{x}_s para la que la vorticidad se anula.*

DEMOSTRACIÓN. Como vimos en el corolario 2.5.3, si $m = \pm\frac{n}{2}$ la función cumple que para algún circuito suficientemente cercano a \mathbf{x}_s se comporta como $\psi(r, \theta) \propto 2r^{|\frac{n}{2}|} \cos(\pm\frac{n}{2}\theta)$ (o bien $\psi(r, \theta) \propto 2r^{|\frac{n}{2}|} \cos(\pm p\frac{n}{2}\theta)$, $p \in \mathbb{N}$ e impar). Como ésta es una función real y periódica en θ con periodo $\frac{n}{2}$, al calcular la integral de línea que define $v_{\mathbf{x}_s}$ se obtendrá $v_{\mathbf{x}_s} = 0 + O(\epsilon)$. \square

COROLARIO 2.6.7. *Las soluciones simétricas de la ecuación 2.2.1 o de 2.4.1 con simetría rotacional discreta de tipo solitón nodal presentan al menos n nodos a lo largo de circuitos ζ que encierran a \mathbf{x}_s y, además, $\psi_0 = |\psi(r=0, \theta)| = 0$.*

DEMOSTRACIÓN. En este caso $m = \frac{n}{2}$ con n par, según la definición 2.2.32. Según la proposición 2.5.2, en una región en torno a \mathbf{x}_s la función es proporcional a $\cos(\frac{n}{2}\theta)$ y según la proposición 2.6.6 la vorticidad en torno a este eje se anula. Sin embargo, debido al comportamiento cosenoidal, se debe cumplir que $\psi_0 = |\psi(r=0, \theta)| = 0$, ya que en este límite, la fase no puede estar definida. Por otra parte, como el periodo del coseno es $\frac{n}{2}$, la función en un circuito en torno a \mathbf{x}_s debe anularse en n puntos. Si la solución es proporcional a $\cos(p\frac{n}{2}\theta)$, $p \in \mathbb{N}$ e impar, entonces presentará $p\frac{n}{2}$ nodos. \square

OBSERVACIÓN 2.6.8. En los ejemplos numéricos presentados en el capítulo 3 observaremos que estos n nodos dan lugar a $\frac{n}{2}$ líneas nodales que se cortan en el origen.

PROPOSICIÓN 2.6.9. *Supongamos que $m = 0$. Entonces, bajo las mismas condiciones que en la proposición 2.5.2 existe siempre una curva cerrada ζ en torno a \mathbf{x}_s para la que la vorticidad se anula.*

DEMOSTRACIÓN. Como vimos en el corolario 2.5.4, si $m = 0$ la función cumple que para algún circuito suficientemente cercano a \mathbf{x}_s se comporta como $\psi(r, \theta) \propto cte \in \mathbb{R}$ (o bien $\psi(r, \theta) \propto 2r^{|\frac{n}{2}|} \cos(\pm p\frac{n}{2}\theta)$, $p \in \mathbb{N}$ y par). Como ésta es una función real y periódica en θ , al calcular la integral de línea que define $v_{\mathbf{x}_s}$ se obtendrá $v_{\mathbf{x}_s} = 0 + O(\epsilon)$. \square

COROLARIO 2.6.10. *Las soluciones simétricas de la ecuación 2.2.1 o de 2.4.1 con simetría rotacional discreta o continua de tipo solitón fundamental no presentan vórtices en el origen en \mathbf{x}_s y, además, $\psi_0 = |\psi(r=0, \theta)|$ puede tomar cualquier valor real, si la solución no presenta líneas nodales que se corten en el eje de simetría.*

DEMOSTRACIÓN. La no existencia de vórtices en el eje de simetría es consecuencia inmediata de la proposición 2.6.9. Si $\psi(r, \theta) \propto cte \in \mathbb{R}$ la solución no presenta líneas nodales que se corten en \mathbf{x}_s y, evidentemente, $\psi_0 = |\psi(r=0, \theta)|$ puede tomar cualquier valor. En cambio en el caso en que $\psi(r, \theta) \propto 2r^{|\frac{n}{2}|} \cos(\pm p\frac{n}{2}\theta)$, con $p \in \mathbb{N}$, $p \neq 0$ y par la función en un circuito en torno a \mathbf{x}_s , debe anularse en pn puntos. \square

OBSERVACIÓN 2.6.11. En los ejemplos numéricos presentados en el capítulo 3 observaremos que ejemplos de soluciones tipo fundamental con y sin líneas nodales.

2.7. Interpretación de la teoría de pseudomomento angular

Vamos a resumir e interpretar físicamente los resultados obtenidos anteriormente para soluciones con simetría rotacional discreta de 2.2.1. Hemos definido estas soluciones como aquellas para las que la amplitud $|\psi|^2$ es invariante bajo la acción de los elementos del grupo de rotaciones discretas. Esto significa que si \mathcal{C}_n^t es una rotación de ángulo $t\frac{2\pi}{n}$, $t \in \mathbb{Z}$, se cumple que $\mathcal{C}_n^t|\psi(r, \theta)|^2 = |\psi(r, \theta + t\frac{2\pi}{n})|^2 = |\psi(r, \theta)|^2$. En el siguiente capítulo analizaremos diferentes casos en los que se cumple esta condición. Por ejemplo, en las figuras 3.2.2, 3.2.3, 3.2.4 y 3.2.5 se observa que la amplitud cumple esta propiedad bajo los elementos de rotaciones de los grupos \mathcal{C}_{2v} , \mathcal{C}_{4v} , \mathcal{C}_{5v} y \mathcal{C}_{6v} . En las figuras 3.2.6, 3.3.2 o 3.4.1 se muestran estructuras más complicadas de la amplitud que también cumplen esta propiedad.

Hemos deducido que, en este caso, la solución presenta una cantidad, el pseudomomento angular m , que cumple que $\psi(r, \theta) = e^{im\theta}u(r, \theta)$ donde se cumple que $u(r, \theta) = u(r, \theta + t\frac{2\pi}{n})$ para que sea cierta la restricción anterior sobre la amplitud. Una función con esta forma funcional cumple que $\mathcal{C}_n^t\psi = \epsilon^m\psi$ con $\epsilon = e^{i\frac{2\pi}{n}}$.

Esto significa que si $m = 0$, frente a cualquier rotación \mathcal{C}_n^t la función cumple que $\mathcal{C}_n^t\psi = \psi$. Por lo tanto si en un punto cualquiera de coordenadas $\mathbf{x}_0 = (r_0, \theta_0)$ escribimos la fase como $\varphi(\mathbf{x}_0) = \arg(\psi(\mathbf{x}_0))$, se cumple que en los puntos de coordenadas $\mathbf{x}_t = (r_0, \theta_0 + t\frac{2\pi}{n})$, $t = 1, \dots, n-1$ la fase es $\varphi(\mathbf{x}_t) = \varphi(\mathbf{x}_0)$. En las figuras 3.2.2(b), 3.2.3(b), 3.2.4(b) y 3.2.5(b) se puede comprobar esta propiedad y que además, dado que la fase en un cuadrante completo es nula, también lo es en el resto de cuadrantes. Por otra parte, dado que si $m = 0$ las funciones pertenecen a representaciones unidimensionales, todos estos ejemplos son funciones reales, tal y como se deduce en 2.2.27.

Por otra parte, cuando el orden de simetría del grupo n es par y $m = \pm\frac{n}{2}$ se cumple que $\mathcal{C}_n^t\psi = \epsilon^{\pm\frac{n}{2}t}\psi = e^{\pm i\pi t}\psi$ ya que $\epsilon = e^{i\frac{2\pi}{n}}$. Obsérvese que el mismo resultado se obtiene para $m = \frac{n}{2}$ y para $m = -\frac{n}{2}$, por lo que consideraremos sólo $m = \frac{n}{2}$. En este caso, por tanto $\mathcal{C}_n^t\psi = \pm\psi$ y de hecho se cumple que $\mathcal{C}_n^1\psi = -\psi$, $\mathcal{C}_n^2\psi = \psi$, $\mathcal{C}_n^3\psi = -\psi, \dots$. Esto se traduce en que para las fases de puntos \mathbf{x}_t , $t = 0, 1, \dots$ se cumple que $\varphi(\mathbf{x}_t) = \varphi(\mathbf{x}_0) + t\pi$ o en definitiva que la fase cambia en π cada vez que se realiza una rotación en las coordenadas de $\frac{2\pi}{n}$. En las figuras 3.2.2, 3.2.3 y 3.2.5 para las soluciones con $m = \pm\frac{n}{2}$ se observa que si elegimos un punto cualquiera \mathbf{x}_0 y observamos la fase en puntos \mathbf{x}_t definidos como anteriormente, la fase cambia de signo alternativamente para cada punto \mathbf{x}_t . De hecho, si la fase en una región definida por el eje las abscisas y una recta que pase por el origen con ángulo $\frac{2\pi}{n}$ es nula, hay $n-1$ regiones semejantes con fases alternadas. Estas soluciones cumplen con 2.2.27, ya que todas son reales.

Sin embargo, cuando $m = \pm 1$ y $m \neq \frac{n}{2}$ (es decir, grupos distintos de \mathcal{C}_{2v}) la representación es bidimensional y las soluciones son complejas (véase lema 2.2.28). En este caso, $\mathcal{C}_n^t\psi = \epsilon^{\pm t}\psi$ y por tanto $\varphi(\mathbf{x}_t) = \varphi(\mathbf{x}_0) \pm t\frac{2\pi}{n}$. Consecuentemente no se obtiene el mismo resultado para $m = +1$ que para $m = -1$, tal y como corresponde a una representación bidimensional. En las figuras 3.2.3, 3.2.4 y 3.2.5 se muestran casos con $m = 1$, en los que se puede comprobar que la fase experimenta variaciones de $\frac{2\pi}{n}$ cuando se parte de un punto cualquiera \mathbf{x}_0 y se realizan rotaciones a puntos \mathbf{x}_t , $t = 1, \dots$.

Finalmente, si en general $m \neq \frac{n}{2}$ y $m \neq 0$, la representación es bidimensional y las soluciones son complejas (2.2.28). En este caso, $\mathcal{C}_n^t\psi = \epsilon^{mt}\psi$ y por tanto

$\varphi(\mathbf{x}_t) = \varphi(\mathbf{x}_0) \pm m \frac{2\pi}{n}$. Por ejemplo, si $m = 2$ se cumple que $\varphi(\mathbf{x}_t) = \varphi(\mathbf{x}_0) + 2 \frac{2\pi}{n}$ lo cual se puede comprobar en las figuras 3.2.4 y 3.2.5 para este tipo de soluciones.

Además, por el teorema 2.2.22 hemos deducido que los valores de m que una solución simétrica puede presentar en cada grupo están acotados lo que significa que, si bien pueden existir infinitas soluciones, todas ellas deben cumplir con ciertas restricciones en su fase si son simétricas. Por otra parte, si consideramos las reflexiones podemos observar que las soluciones con $m = 0$ o $m = \frac{n}{2}$ en las figuras 3.2.2, 3.2.3, 3.2.4 y 3.2.5 se comportan de acuerdo con la tabla de caracteres correspondientes. Para el resto de valores de m las reflexiones mezclan las funciones dentro del subespacio bidimensional. Por lo tanto es necesario representar las funciones con valores del pseudomomento negativos $-m$ pues si Π_{σ_v} es el elemento de reflexión respecto al eje v se cumple que $\Pi_{\sigma_v} \psi^m = \pm 1 \psi^{-m}$, donde ψ^m y ψ^{-m} son dos funciones de la misma representación idénticas pero con distinto signo en el pseudomomento, es decir, $\psi^m = e^{im\theta} u(r, \theta)$ y $\psi^{-m} = e^{-im\theta} u(r, \theta)$. En las figuras citadas no se han representado las soluciones con pseudomomento $-m$, aunque basta con conjugar las soluciones representadas para obtenerlas.

Las proposiciones 2.6.3 y 2.6.6 junto con sus corolarios 2.6.5, 2.6.10 y 2.6.7 permiten deducir cómo se comporta la fase cerca del eje de simetría rotacional (que se encuentra situado en el origen de coordenadas). Por ejemplo, en las figuras 3.2.2, 3.2.3, 3.2.4 y 3.2.5 se puede observar que para $m = 0$ no existe ninguna singularidad en el eje de simetría rotacional, para $m = \frac{n}{2}$ existen $\frac{n}{2}$ líneas nodales que se cruzan en el origen y para $m \neq \frac{n}{2}$ y $m \neq 0$ existe una singularidad de fase de carga m en el eje de simetría rotacional.

Como hemos visto en la introducción, la modelización de solitones espaciales en medios homogéneos autoenfocantes, saturables o fotorrefractivos da lugar a una ecuación de Schrödinger no lineal cuya no linealidad es una función de la intensidad del campo $|\psi|^2$ (véase apéndice A). Los solitones espaciales con simetría rotacional $\mathcal{O}(2)$ obtenidos en la literatura se pueden caracterizar como soluciones tipo fundamental sin momento angular, es decir, con $l = 0$. Asimismo las excitaciones con simetría rotacional continua e intensidad en el eje de simetría [68, 72] también se pueden clasificar como soluciones tipo fundamental sin momento angular ($l = 0$). En medios desenfocantes homogéneos, donde el sistema también se puede modelizar mediante una ecuación de Schrödinger no lineal cuya no linealidad es una función de la intensidad del campo $|\psi|^2$, los solitones oscuros con dependencias de la fase en la coordenada θ del tipo $e^{i\theta}$, se pueden clasificar como soluciones tipo vórtice con momento angular $l \neq 0$.

Analicemos algunos solitones presentados en la literatura en sistemas periódicos a la luz de la teoría del pseudomomento angular. Los solitones espaciales obtenidos en las refs. [135, 136, 137] y predichos numéricamente y teóricamente en [146, 141] son soluciones tipo solitón fundamental con pseudomomento $m = 0$. Los vórtices discretos obtenidos en [155, 156, 157] y modelizados en [141, 153, 143, 144, 145, 154] se pueden clasificar como soluciones tipo vórtice con pseudomomento $m = \pm 1$. Finalmente, los dipolos o solitones nodales presentados en [143, 162, 163, 164] son soluciones tipo solitón nodal. En este caso, aunque la simetría del sistema era \mathcal{C}_{4v} en las refs. [143, 163] y \mathcal{C}_{6v} en la ref. [164], los solitones obtenidos presentaban amplitudes con simetría \mathcal{C}_{2v} . Es, por tanto, un ejemplo de soluciones cuyo grupo de simetría es un subgrupo del grupo de simetría del medio, es decir, $\mathcal{G}' \subset \mathcal{G}$. En todas las referencias el pseudomomento de los dipolos es $m = \pm 1$, que se corresponde

con un solitón nodal en \mathcal{C}_{2v} . En la ref. [162] se obtuvieron, además, cuadrupolos en redes cuadradas. Luego en este caso, se trata de soluciones para las que \mathcal{G}' y \mathcal{G} coinciden. En particular, son soluciones tipo solitón nodal con pseudomomento $m = 2$ en \mathcal{C}_{4v} . Por otra parte, en redes de Bessel también se obtuvieron solitones discretos tipo vórtice y nodal [178, 179, 180], que en nuestro caso se corresponden con soluciones tipo vórtice con $m \neq 0$ y $m \neq \frac{n}{2}$, donde n es el orden de simetría de la amplitud del solitón o bien con solitones con $m = \frac{n}{2}$ cuando la diferencia de fase entre solitones vecinos es de π . Las excitaciones obtenidas en [183, 182] se pueden clasificar como soluciones tipo vórtice con $m = \pm 1$.

Finalmente, solitones rotantes como los azimutones [110] han sido modelizados con ecuaciones cuyas soluciones estacionarias son solución de 2.4.1. Los azimutones, los *soliton necklace beams* y los *soliton clusters* son idénticos desde el punto de vista de la simetría, y cuando los sistemas en los que se presentan pueden modelizarse con ecuaciones como ésta, se pueden clasificar también de acuerdo a la teoría de pseudomomento angular⁶. En particular, los *necklace beams* presentados en las refs. [103, 104] o los *soliton clusters* obtenidos en [107] son solitones con simetría rotacional discreta con $m = 0$ o $m = \frac{n}{2}$, donde n es el orden de simetría bajo cuyos elementos es invariante la intensidad de la solución. El valor del pseudomomento es $m = 0$ cuando los solitones vecinos tienen la misma fase y $m = \frac{n}{2}$ si están en oposición de fase. Igualmente, los *necklace beams* y los *soliton clusters* con momento angular distinto de cero presentados en las refs. [107, 108, 109, 105] y los azimutones presentados en la ref. [110] son solitones con simetría rotacional discreta con $m \neq 0$ y $m \neq \frac{n}{2}$, donde n es el orden de simetría bajo cuyos elementos es invariante la intensidad de la solución. Finalmente, los solitones obtenidos en redes de Bessel con simetría rotacional $\mathcal{O}(2)$ cuya amplitud es similar a los *necklace beams*, como los presentados en [174, 175, 176, 180], son solitones discretos con $m = 0$ (si los vecinos tienen la misma fase) o $m = \frac{n}{2}$ (si tienen fases opuestas), donde n es el orden de la simetría discreta de la amplitud. Solitones discretos tipo vórtice con $m \neq 0$ y $m \neq \frac{n}{2}$ en estos sistemas se obtuvieron en [177].

En el siguiente capítulo vamos a mostrar ejemplos de soluciones obtenidas teniendo en cuenta, por un lado, que las soluciones simétricas pueden presentar singularidades fuera del origen y, por otro, que tal y como se ha obtenido anteriormente, existe una estructura de bandas. Esto nos permite suponer que existen soluciones en bandas superiores de las que, en todo caso, sabemos cómo se comportan en el eje de simetría rotacional y podemos extraer conclusiones *a priori* sobre el aspecto de su fase.

⁶Veremos en el capítulo 4 que soluciones no estacionarias simétricas también presentan pseudomomento angular, y por lo tanto, la teoría será aplicable a este tipo de solitones no estacionarios.

Singularidades, líneas nodales, carga y vorticidad: soluciones simples y compuestas

3.1. Introducción

Vamos a utilizar los resultados presentados en el capítulo 2 para calcular numéricamente soluciones simétricas de la ecuación 2.2.1. Distinguiremos entre soluciones simples y compuestas o *clusters*, donde las primeras presentan, a lo sumo, una única singularidad de fase mientras que las últimas presentan más de una. Además estudiaremos soluciones con líneas nodales radiales y angulares, así como la relación entre este tipo de soluciones y la existencia de una estructura de bandas asociada a la presencia de una estructura periódica y/o con simetría rotacional discreta.

El capítulo comienza con un apartado dedicado a las soluciones simples, donde se define este tipo de solución y se ofrecen ejemplos numéricos en sistemas con diferentes simetrías rotacionales discretas para todos los pseudomomentos distintos posibles en cada caso. Veremos en este caso que la cota sobre el pseudomomento m se traduce en una cota sobre la vorticidad que pueden presentar estas soluciones. En el segundo apartado se ofrecen ejemplos numéricos de soluciones con líneas nodales radiales y angulares con todos los pseudomomentos posibles en sistemas con simetría C_{4v} . Veremos la relación de estas soluciones con la existencia de bandas superiores y obtendremos un ejemplo de una solución no lineal que pertenece a la segunda banda y existe en la segunda banda prohibida. Finalmente, en el último apartado se presentan ejemplos de solitones compuestos o *clusters* de vórtices, es decir, soluciones que presentan singularidades en puntos \mathbf{x} diferentes del eje de simetría rotacional. Estas soluciones se obtienen en sistemas con simetría C_{4v} y para pseudomomento $m = -1$. Se obtiene además la relación que existe entre todas las singularidades situadas fuera del eje de simetría rotacional y se interpreta detenidamente la estructura de fase de estas soluciones en el contexto de la teoría del pseudomomento angular.

3.2. Soluciones simples

Algunos de los resultados del presente apartado fueron publicados en [216].

DEFINICIÓN 3.2.1. Llamaremos *soluciones simples* a las funciones $\psi(\mathbf{x})$ que verifican las siguientes condiciones:

1. Son soluciones simétricas de la ecuación 2.2.1 o de 2.4.1 con simetría rotacional discreta o continua (que presentan, por tanto, momento angular l o pseudomomento angular m bien definido).
2. Presentan a lo sumo una única singularidad de fase en \mathbf{x}_s o, si existen líneas nodales, todas ellas pasan por \mathbf{x}_s y no se cruzan en ningún otro punto.

Teniendo en cuenta la definición 3.2.1 y la clasificación de las soluciones introducida en las definiciones 2.2.31, 2.2.32 y 2.2.34, podemos diferenciar los siguientes tipos de soluciones simples:

1. *Soluciones simples tipo solitón fundamental (solitones fundamentales)*. Según 2.2.31, este tipo de soluciones presentan momento angular $l = 0$ o pseudomomento angular $m = 0$, es decir, pertenecen a la primera representación irreducible del grupo correspondiente. Según el corolario 2.6.10 estas soluciones no presentan ninguna singularidad en el origen. Luego, según la definición 3.2.1 no presentan ninguna singularidad y si presentan líneas nodales, éstas se cortan en \mathbf{x}_s .
2. *Soluciones simples tipo vórtice (vórtices)*. Según 2.2.34, para este tipo de soluciones $l \neq 0$ o bien $m \neq 0$ y $m \neq \frac{n}{2}$ si n es par. Según el corolario 2.6.5, estas soluciones presentan una singularidad en \mathbf{x}_s de vorticidad l en el caso de simetría rotacional continua o m en el caso de simetría rotacional discreta. Según la definición 3.2.1, ésta es la única singularidad de fase que presentan.
3. *Soluciones simples tipo solitón nodal (solitones nodales)*. Según la definición 2.2.32, en este caso $m = \frac{n}{2}$ con n par. Según 2.6.7 y la observación 2.6.8, estas soluciones presentan líneas nodales que se cortan en \mathbf{x}_s . Según la proposición 2.6.6 en este caso la vorticidad calculada en torno a \mathbf{x}_s se anula, luego no puede haber singularidades de fase en el origen. Por lo tanto no hay más singularidades ni líneas nodales, salvo las líneas nodales que se cortan en \mathbf{x}_s .

NOTA 3.2.2. Los solitones fundamentales presentados en las refs. [135, 136, 137, 146, 141] son soluciones simples tipo solitón fundamental. Los vórtices introducidos en las refs. [141, 154, 155, 156, 157] son soluciones simples tipo vórtice. Finalmente, los solitones nodales o dipolos introducidos en las refs. [143, 163, 164, 162] son soluciones simples tipo solitón nodal.

Para las soluciones simples se cumple la siguiente proposición:

LEMA 3.2.3. *Sea $\psi(\mathbf{x})$ una solución simple simétrica de la ecuación 2.2.1 o de 2.4.1 con simetría rotacional discreta o continua con momento angular $l \in \mathbb{N}$ o pseudomomento angular $m = 0, \pm 1, \dots, \frac{n}{2}$ si n par o $m = 0, \dots, \pm \frac{n-1}{2}$ si n impar. Calculemos v en circuitos η que encierren a \mathbf{x}_s . Entonces se cumple que $v = v_j = l$ en el caso de simetría rotacional o bien que $v = v_j = m$ en el caso de simetría rotacional discreta, siempre que $m \neq \frac{n}{2}$ y $m \neq 0$. Si $m = \frac{n}{2}$ o $m = 0$, entonces $v = 0$ para cualquier circuito que encierre a \mathbf{x}_s .*

DEMOSTRACIÓN. Como los tipos de soluciones 1 y 2 no presentan más singularidades de fase que la que puede haber en el origen si $m \neq 0$ o $l \neq 0$, cualquier integral en un circuito cerrado que encierre a \mathbf{x}_s da como resultado $v = m$ o bien $v = l$, ya que la carga de la singularidad en \mathbf{x}_s es $v_j = m$ o bien $v_j = l$ según 2.6.3. Si la solución es de tipo 3, según 2.6.6, la vorticidad calculada en un circuito en torno a \mathbf{x}_s es nula. Lo mismo sucede si es de tipo fundamental debido a la proposición 2.6.9. Luego por la definición de solución simple, sigue siendo nula cuando se calcula a lo largo de cualquier circuito que encierre a \mathbf{x}_s . \square

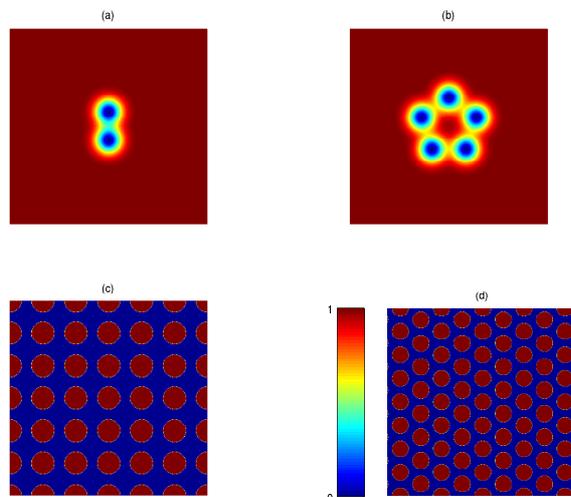


FIGURA 3.2.1. Potencial con invariancia rotacional discreta $\bar{V}(\mathbf{x})$ con simetría (a) \mathcal{C}_{2v} , (b) \mathcal{C}_{5v} , (c) \mathcal{C}_{4v} y (d) \mathcal{C}_{6v} . Los casos (c) y (d) son, además, periódicos.

OBSERVACIÓN 3.2.4. Los resultados presentados en [216, 217] se referían a soluciones simétricas para las que se cumple que $v = v_j \forall j$ que incluya a \mathbf{x}_s , lo cual es en definitiva un modo alternativo de definir las soluciones simples tipo vórtice.

PROPOSICIÓN 3.2.5. (de vorticidad máxima). Sea $\psi(\mathbf{x})$ una solución simple simétrica de la ecuación 2.2.1 o de 2.4.1 con simetría rotacional discreta con pseudomomento angular m . Entonces el valor máximo de la vorticidad es $\frac{n}{2} - 1$ si n es par o $\frac{n-1}{2}$ si n es impar y el valor mínimo es $-\frac{n}{2} + 1$ si n es par o $-\frac{n-1}{2}$ si n es impar. Es decir, se cumple que $|v| < \frac{n}{2}$ si n es par o $|v| \leq \frac{n-1}{2}$ si n es impar.

DEMOSTRACIÓN. Para dichos grupos se cumple que (véase teorema 2.2.22) $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{n}{2}$ si n es par o $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{n-1}{2}$ si n es impar. Luego $|m| \leq \frac{n}{2}$ si n es par o $|m| \leq \frac{n-1}{2}$ si n es impar. Como por el lema 3.2.3 se cumple que $v = m$, la vorticidad está acotada por los mismos valores, siempre que $m \neq \pm \frac{n}{2}$ (si $m = 0$, en todo caso $v = m = 0$). Por último, según el mismo lema 3.2.3, en el caso de soluciones simples tipo solitón nodal con pseudomomento $m = \pm \frac{n}{2}$, la vorticidad es nula. Por lo tanto, los valores distintos de cero que puede tomar la vorticidad son $v = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{n}{2} \mp 1$ si n es par o $v = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{n-1}{2}$ si n es impar. \square

COROLARIO 3.2.6. Supongamos que $V(\mathbf{x})$ es invariante bajo traslaciones de periodo $a > 0$. Entonces $v \leq 2$.

DEMOSTRACIÓN. Los únicos grupos de simetría rotacional compatibles con alguna simetría traslacional en el plano de cierto periodo son $\mathcal{C}_2, \mathcal{C}_3, \mathcal{C}_4$ o \mathcal{C}_6 [218]. Por lo tanto, el orden máximo de un grupo con simetría rotacional con esta característica es $n = 6$. Debido al teorema 3.2.5 se cumple que $v \leq 2$. \square

Obtengamos las soluciones simples para los casos $\mathcal{C}_{2v}, \mathcal{C}_{4v}, \mathcal{C}_{5v}$ y \mathcal{C}_{6v} cuando el potencial periódico es $V(\mathbf{x}) = V_0 \cdot \bar{V}(\mathbf{x})$, $V_0 > 0$ y $\bar{V}(\mathbf{x})$ es una función $\mathbb{R}^2 \rightarrow$

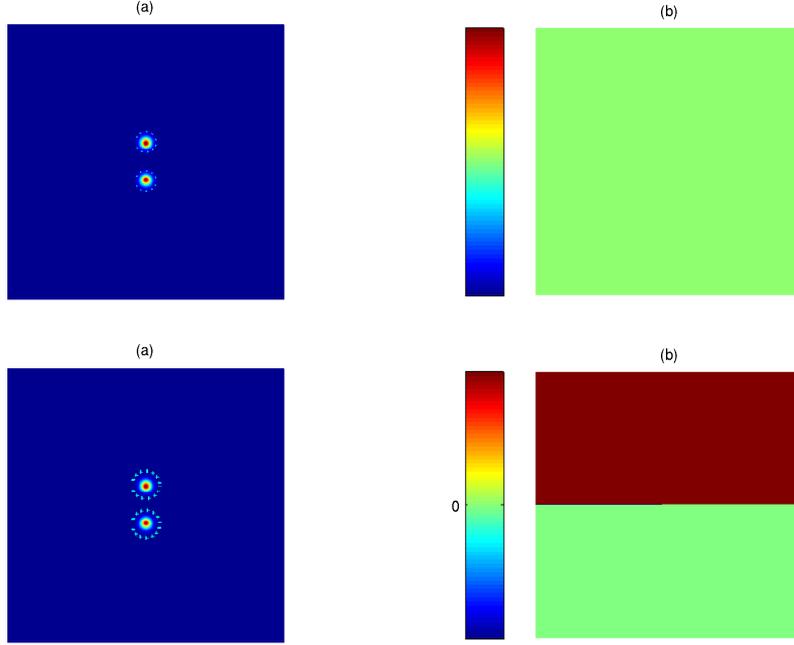


FIGURA 3.2.2. Soluciones simples con simetría \mathcal{C}_{2v} cuando $\mu = 0,06$. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, 1$ se representan en (a) y (c), respectivamente. Los mínimos del potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representan mediante círculos intermitentes de color cyan. En (b) y (d) se representan las fases correspondientes.

$[0, 1]$ que tiene alguna de las formas funcionales presentadas en la figura 3.2.1. Las funciones \bar{V} presentadas en fig. 3.2.1 (a) y (b) son de la forma $\bar{V}(\mathbf{x}) = 1 - \sum_{i=0}^{n-1} \exp\left(\frac{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2}{2\omega^2}\right)$ donde $(x_i, y_i) = d\left(\cos\frac{2\pi i}{n}, \sin\frac{2\pi i}{n}\right)$ con $n = 2$, $\omega = 8$, y $d = 4\pi$ en (a) y $n = 5$, $\omega = 10$, y $d = 10\pi$ en (b). Las funciones \bar{V} presentadas en fig. 3.2.1 (c) y (d) son iguales a 1 en círculos de radio $R = \frac{\bar{R}}{\lambda}$, con $\bar{R} = 8000$ y $\lambda = 1064$, y se anulan fuera de ellos. Los centros de los círculos están situados en una red cuadrada o hexagonal, es decir, en posiciones $\mathbf{r} = a(k_x + \cos(\alpha))\mathbf{i} + ak_y \sin(\alpha)\mathbf{j}$, donde \mathbf{i}, \mathbf{j} son dos versores perpendiculares, $k_x, k_y \in \mathbb{Z}$ y $\alpha = \frac{\pi}{2}$ o $\frac{\pi}{3}$ en cada caso. El parámetro a toma el valor $a = \frac{\Lambda}{\lambda}$, donde $\Lambda = 23000$. Este tipo de potenciales pueden modelizar las *fibras de cristal fotónico*, definidas al final del apéndice A.

Las soluciones simétricas de la ecuación 2.2.1 que se van a presentar en lo que sigue han sido obtenidas con el método numérico descrito en el apéndice D.

- **Simetría \mathcal{C}_{2v} .** Si la solución ψ es tal que $|\psi|^2$ es invariante bajo \mathcal{C}_{2v} y el potencial lineal $V(\mathbf{x})$ es como en 3.2.1 (a), se cumple que $n = 2$ y por lo tanto los valores permitidos para el pseudomomento angular son $m = 0, 1$. En la figura 3.2.2 se representan la amplitud y fase de las soluciones simples con pseudomomentos $m = 0, 1$. Se puede observar que las soluciones pertenecen a las representaciones $j = 1, 2$ en cada caso y

por lo tanto cumplen con los elementos del grupo correspondientes. La solución con $m = 0$ cumple que $\Pi_{\sigma_{h,v}}\psi = \psi$, donde $\Pi_{\sigma_{h,v}}$ representa las reflexiones especulares respecto a los ejes de simetría especular horizontal (σ_h) y vertical (σ_v). De acuerdo con esto, se cumple necesariamente que cerca del origen $\psi(r, \theta) \propto cte \in \mathbb{R}$. La solución con $m = 1$ cumple que $\Pi_{\sigma_h}\psi = -\psi$ y $\Pi_{\sigma_v}\psi = \psi$. Por lo tanto, $\psi(r, \theta) \propto 2r^{|\frac{m}{2}|} \cos(\frac{m}{2}\theta) = 2r \cos(\theta)$ cerca de \mathbf{x}_s y presenta una línea nodal horizontal que pasa por el eje de simetría \mathbf{x}_s . En el primer caso es una solución tipo fundamental y en el segundo es un solitón nodal y, por lo tanto, $\psi \in \mathbb{R}$ en ambos casos, tal y como se dedujo en 2.2.27.

- **Simetría \mathcal{C}_{4v} .** Si la solución ψ cumple que $|\psi|^2$ es invariante bajo \mathcal{C}_{4v} , y el potencial lineal $V(\mathbf{x})$ es como en 3.2.1 (c), entonces $n = 4$ y por lo tanto los valores permitidos para el pseudomomento angular son $m = 0, \pm 1, 2$. En la figura 3.2.3 se representan la amplitud y fase de las soluciones simples con pseudomomentos $m = 0, -1, -2$. Se puede observar que las soluciones pertenecen a las representaciones $j = 1, 2, 3$ en cada caso y por lo tanto cumplen con los elementos del grupo correspondientes. Al igual que en \mathcal{C}_{2v} , la solución con $m = 0$ cumple que $\Pi_{\sigma_{h,d}}\psi = \psi$, donde $\Pi_{\sigma_{h,v}}$ son las reflexiones especulares respecto a un eje horizontal e inclinado $\frac{\pi}{4}$ radianes, respectivamente, con lo que $\psi(r, \theta) \propto cte \in \mathbb{R}$ cerca de \mathbf{x}_s . La solución con $m = 2$, en cambio, cumple que $\Pi_{\sigma_h}\psi = -\psi$ y $\Pi_{\sigma_d}\psi = \psi$. Consecuentemente $\psi(r, \theta) \propto 2r^{|\frac{m}{2}|} \cos(\frac{m}{2}\theta) = 2r^{|2|} \cos(2\theta)$ cerca de \mathbf{x}_s y presenta dos líneas nodales perpendiculares que pasan por el eje de simetría \mathbf{x}_s . Las soluciones con $m = 0, 2$ son tipo solitón fundamental y nodal, respectivamente, y son funciones reales, tal y como se dedujo en 2.2.27. La solución con pseudomomento $m = -1$ es un vórtice y presenta una singularidad de fase de carga $v_{\mathbf{x}_s} = -1$ en \mathbf{x}_s . La vorticidad calculada a lo largo de cualquier circuito que incluya a \mathbf{x}_s es $v = v_{\mathbf{x}_s} = -1$. En este caso pertenece a una representación bidimensional, por tanto $\psi \in \mathbb{C}$, de acuerdo con 2.2.28. Además, la compleja conjugada es también solución con $m = 1$ y las reflexiones especulares involucran a ambas funciones.
- **Simetría \mathcal{C}_{5v} .** En este caso la solución simple ψ cumple que $|\psi|^2$ es invariante bajo \mathcal{C}_{5v} y el potencial lineal $V(\mathbf{x})$ es como en 3.2.1 (b). Por lo que los valores de pseudomomento permitidos son $m = 0, \pm 1, \pm 2$. En la figura 3.2.4 se representan las amplitudes y fases para las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, -2$. Se puede comprobar que las soluciones pertenecen a las representaciones correspondientes utilizando rotaciones que sean múltiplos de $\frac{2\pi}{5}$. Como siempre, si $m = 0$ la solución es de tipo fundamental y por lo tanto es real, tal y como se dedujo en 2.2.27. Como se observa $\Pi_{\sigma_v}\psi = \psi$ donde Π_{σ_v} es una reflexión especular respecto al eje vertical, con lo que $\psi(r, \theta) \propto cte \in \mathbb{R}$ cerca de \mathbf{x}_s . Por otra parte, las soluciones con pseudomomento $m = -1, -2$ son soluciones complejas tipo vórtice. Ambos casos presentan singularidades de fase en \mathbf{x}_s de carga $v_{\mathbf{x}_s} = -1, -2$, respectivamente, y la vorticidad cumple que $v = v_{\mathbf{x}_s}$ si se calcula a lo largo de circuitos que encierran a \mathbf{x}_s . Ambas soluciones son bidimensionales y por tanto complejas, de acuerdo con 2.2.28. Sus complejos conjugados son soluciones con pseudomomento $m = 1, 2$, respectivamente,

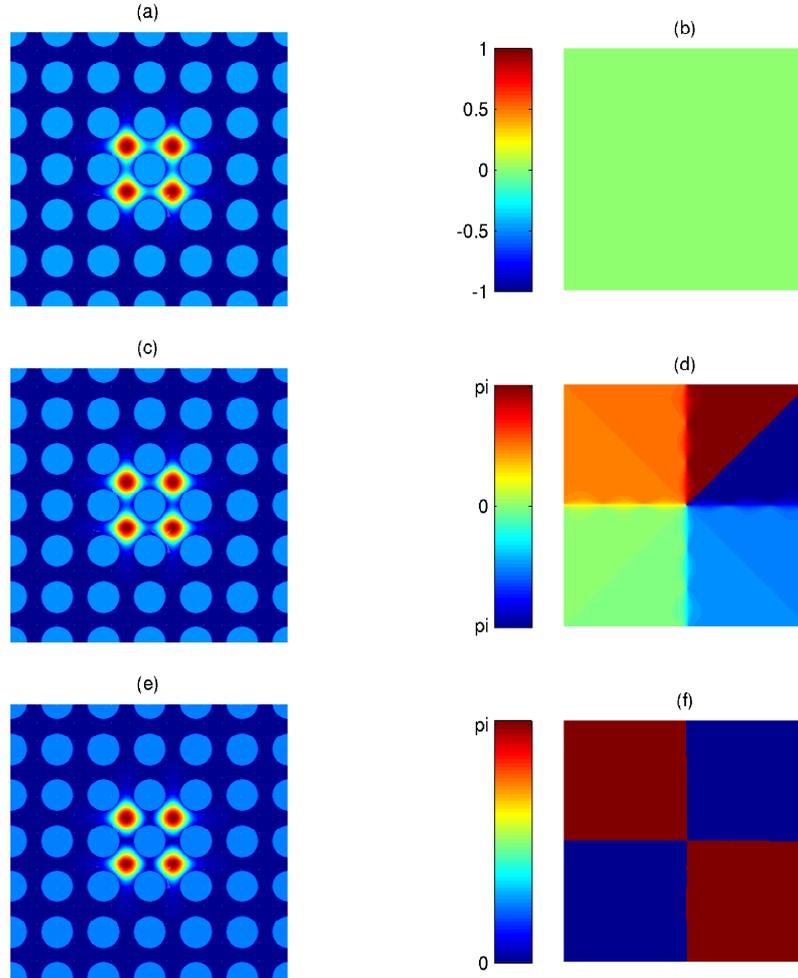


FIGURA 3.2.3. Soluciones simples con simetría \mathcal{C}_{4v} cuando $\mu = 0,04$. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, -2$ se representan en (a), (c) y (e), respectivamente. El potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos de color azul claro. En (b), (d) y (f) se representan las fases correspondientes.

y las reflexiones especulares involucran tanto a la función como a su complejo conjugado. En este caso no hay soluciones reales tipo solitón nodal ya que n es impar. Nótese que la vorticidad máxima es $v_{max} = 2 < \frac{n}{2}$.

- **Simetría \mathcal{C}_{6v} .** En este caso la solución ψ cumple que $|\psi|^2$ es invariante bajo \mathcal{C}_{6v} y el potencial lineal $V(\mathbf{x})$ es como en 3.2.1 (d). Los valores del pseudomomento permitidos son $m = 0, \pm 1, \pm 2, 3$. En la figura 3.2.5 se representan las amplitudes y fases para las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, -2, 3$. Se puede comprobar que las soluciones pertenecen a la

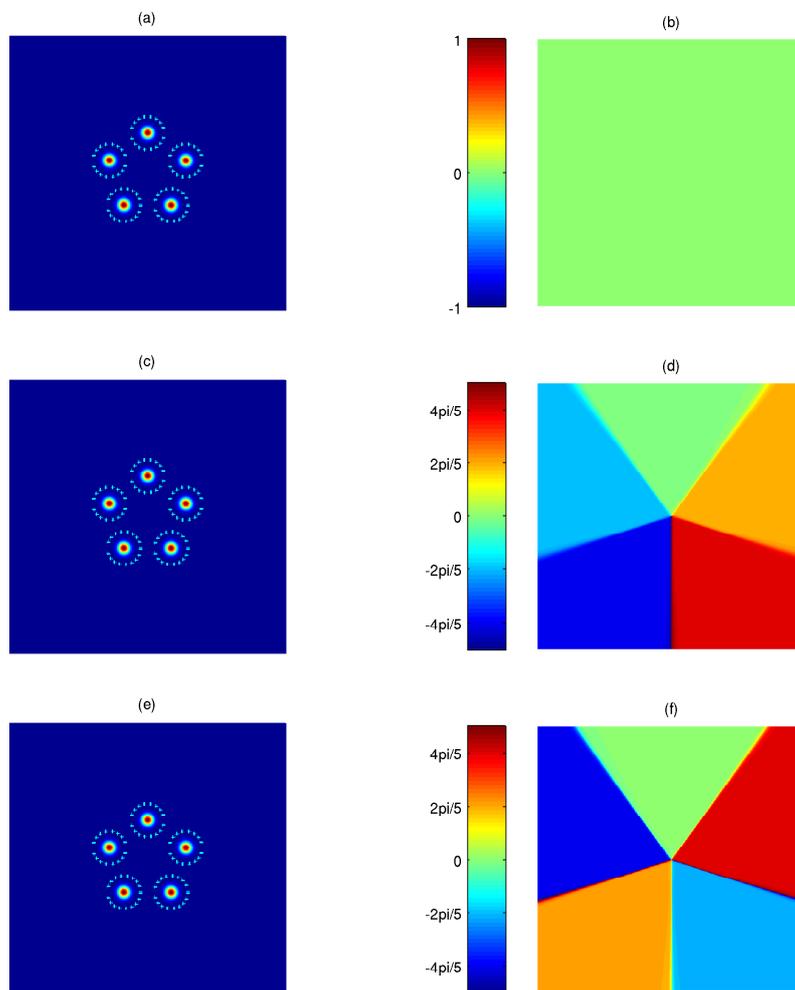


FIGURA 3.2.4. Soluciones simples con simetría C_{5v} cuando $\mu = 0,16$. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, -2$ se representan en (a), (c) y (e), respectivamente. Los mínimos del potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos intermitentes de color cyan. En (b), (d) y (f) se representan las fases correspondientes.

representación correspondiente utilizando rotaciones que sean múltiplos de $\frac{2\pi}{6}$. Cuando $m = 0$ o $m = 3$ las soluciones son tipo fundamental o nodal, respectivamente. Por lo tanto pertenecen a representaciones irreducibles unidimensionales y según 2.2.27 son reales. Además, la solución $m = 0$ cumple que $\Pi_{\sigma_{h,v}}\psi = \psi$, donde $\Pi_{\sigma_{h,v}}$ representa las reflexiones especulares respecto a los ejes de simetría especular horizontal y vertical, σ_h y σ_v , respectivamente. Por consiguiente cerca del origen $\psi(r, \theta) \propto cte \in \mathbb{R}$. La solución con $m = 3$ cumple que $\Pi_{\sigma_h}\psi = \psi$ y $\Pi_{\sigma_v}\psi = -\psi$. Por lo

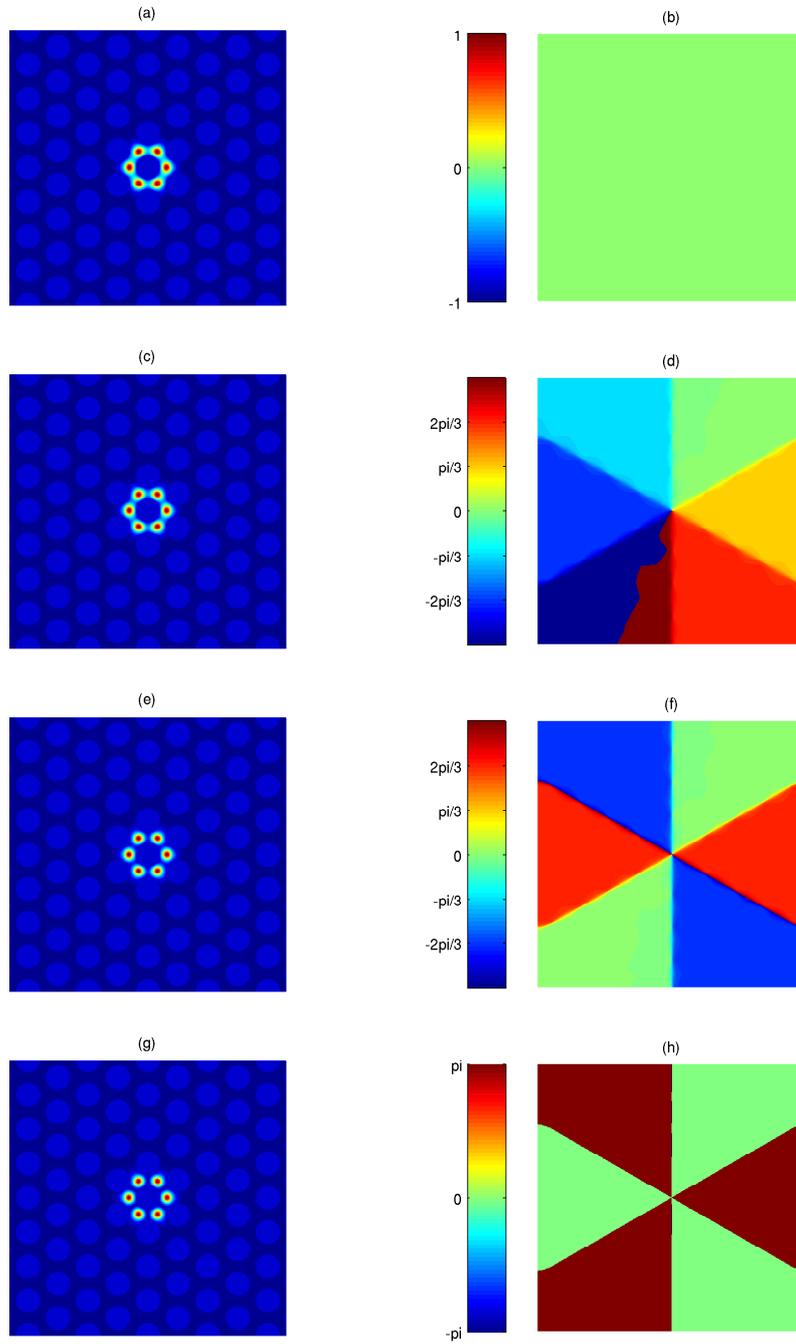


FIGURA 3.2.5. Soluciones simples con simetría C_{6v} cuando $\mu = -0,06$. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, -2, 3$ se representan en (a), (c), (e) y (g). La función $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos de color azul claro. En (b), (d), (f) y (h) se representan las fases correspondientes.

tanto, $\psi(r, \theta) \propto 2r^{|3|} \cos(3\theta) = 2r \cos(\theta)$ cerca de \mathbf{x}_s . Como se observa presenta tres líneas nodales que pasan por el eje de simetría. Por otra parte, las soluciones con pseudomomentos $m = -1, -2$ son soluciones bidimensionales tipo vórtice, que serán complejas de acuerdo con 2.2.28. Además, sus complejos conjugados son también solución y las reflexiones especulares involucran tanto a la solución como a su compleja conjugada. Ambos casos presentan una singularidad de fase de carga $v_{\mathbf{x}_s} = -1, -2$, respectivamente, y la vorticidad cumple que $v = v_{\mathbf{x}_s}$ si se calcula a lo largo de circuitos que encierren a \mathbf{x}_s . La solución con pseudomomento $m = -2$ es el vórtice con mayor vorticidad que se puede obtener en cualquier sistema que presente simetría traslacional además de la simetría rotacional, tal y como se obtuvo en 3.2.6.

Además de las soluciones previamente expuestas pueden existir otro tipo de soluciones simples para las cuales la amplitud se extiende por mínimos del potencial periódico más alejados del centro. En la figura 3.2.6 se muestra un ejemplo de este tipo de soluciones en un sistema con simetría \mathcal{C}_{4v} para los pseudomomentos $m = 0, -1, 2$. Al contrario que la solución presentada en 3.2.3 (e) y (f), la solución con $m = 2$, que es de tipo solitón nodal, cumple que $\Pi_{\sigma_h} \psi = \psi$ y $\Pi_{\sigma_d} \psi = -\psi$ donde $\Pi_{\sigma_{h,v}}$ son las reflexiones especulares respecto a un eje horizontal e inclinado $\frac{\pi}{4}$ radianes. En todo caso, $\psi(r, \theta) \propto 2r^{|2|} \cos(2\theta)$ cerca de \mathbf{x}_s y presenta dos líneas nodales perpendiculares que pasan por el eje de simetría \mathbf{x}_s .

Algunos solitones presentados en la literatura pueden entenderse como soluciones simples extendidas. Por ejemplo, algunos de los vórtices obtenidos en la ref. [173] en redes hexagonales son soluciones tipo vórtice con pseudomomento $m = 1$ donde la amplitud se extiende por diferentes mínimos del potencial. Otras soluciones presentadas en este trabajo son soluciones compuestas, de las que hablaremos más adelante. También se pueden entender como soluciones simples extendidas tipo fundamental y vórtice en \mathcal{C}_{4v} con pseudomomento $m = 0, -1$, respectivamente, las presentadas en la ref. [171].

NOTA 3.2.7. Nótese que se observa en todos los casos que, para los solitones nodales, el número de líneas nodales coincide con $\frac{n}{2}$ y se cruzan en \mathbf{x}_s , tal y como apuntamos en la observación 2.6.8.

Como vimos en 2.3.8, en el caso no lineal existe una relación entre μ y la potencia $P = \int |\psi|^2 d\mathbf{x}^2$, tal y como se definió en 2.3.7. Es decir, las soluciones no lineales existen para un rango de μ y la potencia P es distinta para diferentes valores de μ . Además, la relación $P = P(\mu)$ es distinta para cada solución no lineal con distinto pseudomomento angular m y diferente estructura de la amplitud. En la figura 3.2.7 (a) y (c) se representa esta curva para las soluciones con simetría rotacional discreta de orden $n = 2$ y $n = 5$, para todas las soluciones simples del tipo de las presentadas en las figuras 3.2.2 y 3.2.4 con todos los pseudomomentos permitidos. En estos casos las curvas para distintos pseudomomentos prácticamente se superponen. En la figura 3.2.7 (b) y (d) se representa la curva $P = P(\mu)$ para las soluciones con simetría rotacional discreta de orden $n = 4$ y $n = 6$, para todas las soluciones simples con distintos pseudomomentos del tipo de las presentadas en las figuras 3.2.3 y 3.2.5. En estos casos se observa claramente que las curvas $P = P(\mu)$ son distintas para cada pseudomometo angular representado.

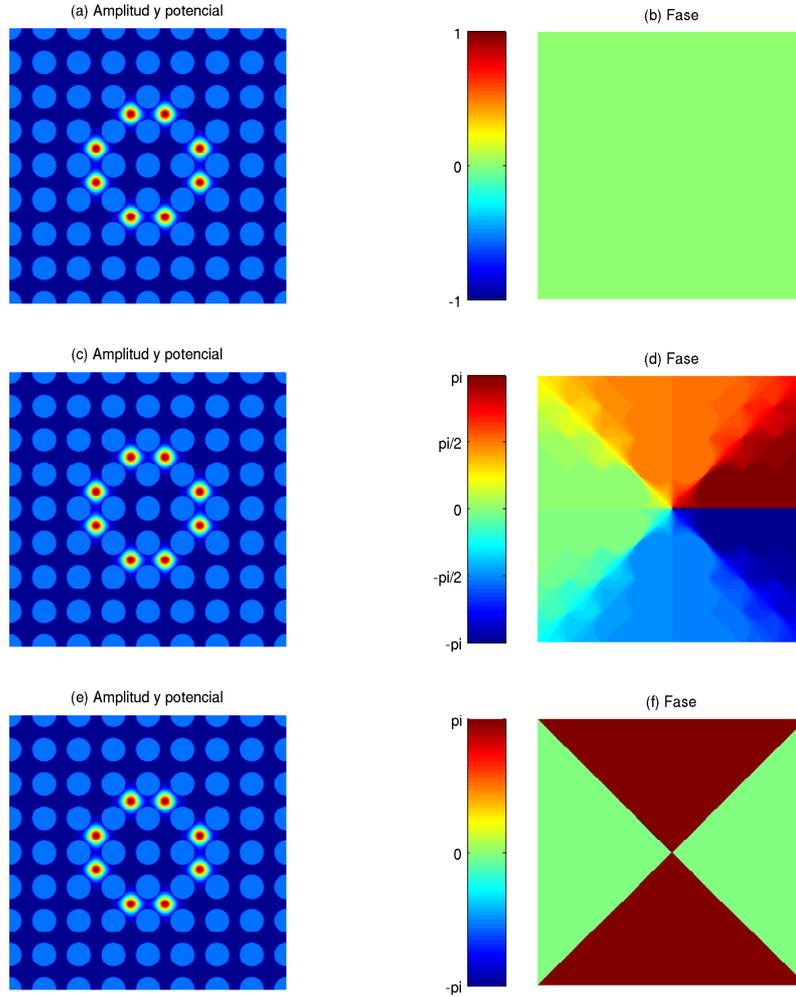


FIGURA 3.2.6. Soluciones simples extendidas con simetría C_{4v} cuando $\mu = -0,02$. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, 2$ se representan en (a), (c) y (e), respectivamente. El potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos de color azul claro. En (b), (d) y (f) se representan las fases correspondientes.

Los casos representados en la figura 3.2.7 (b) y (d) han sido calculados con los potenciales presentados en la fig. 3.2.1 (c) y (d). A diferencia de los potenciales presentados en la fig. 3.2.1 (a) y (b), estos potenciales son periódicos, es decir, no sólo presentan simetría rotacional discreta sino también invariancia traslacional discreta. En el caso lineal, las soluciones en medios periódicos se pueden caracterizar mediante combinaciones de funciones de Bloch con distintos pseudomomentos lineales y se observa que sólo para cierto rango de μ se pueden propagar soluciones (véase apéndice C). Estos rangos de μ en los que se obtienen soluciones se conocen como

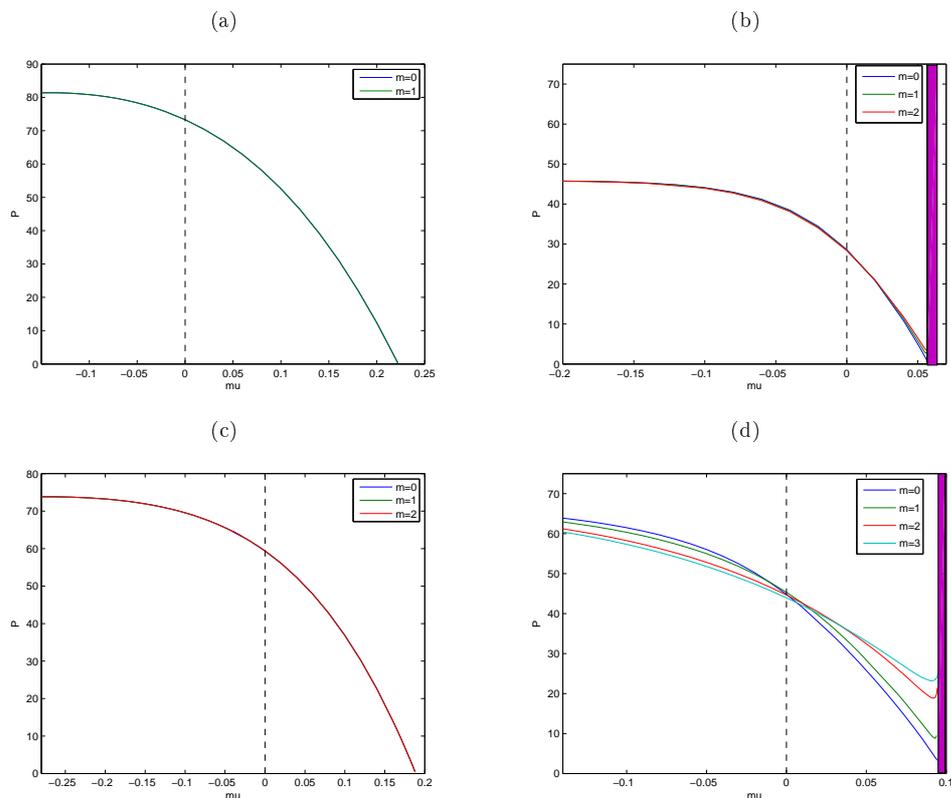


FIGURA 3.2.7. Relación entre la potencia $P = \int_{\Omega} d\mathbf{x}^2 |\psi|^2$ y el autovalor μ para soluciones como las presentadas anteriormente. En (a) se representa esta relación para soluciones como las de la figura 3.2.2, en (b) para soluciones como las de la figura 3.2.3, en (c) como las de 3.2.4 y (d) como las de 3.2.5.

bandas de conducción mientras que los rangos en los que no se propagan soluciones en el caso lineal se conocen como *bandas de prohibidas*. Este análisis en términos de funciones de Bloch es similar al presentado en [2] para el caso lineal. Tal y como se presentó en la introducción a la presente Tesis, se demostró que en medios periódicos las soluciones localizadas no lineales aparecen en las bandas prohibidas, por lo que denominaron *gap solitons* a estas soluciones localizadas [123, 124, 126, 127]. En la fig. 3.2.7 (b) y (d) se ha representado con una banda de color rosa la primera banda de conducción asociada a la periodicidad del medio mientras que en la fig. 3.2.7 (a) y (c) no se representan bandas pues el medio no es periódico. Como se observa, los solitones aparecen, efectivamente, en la banda prohibida, de acuerdo con los desarrollos teóricos presentados en la literatura.

Es importante destacar que el pseudomomento angular no está asociado a la periodicidad en las variables transversales, sino a la periodicidad en la variable angular. Por tanto, las bandas obtenidas en la teoría desarrollada en el anterior capítulo están asociadas a esta variable angular. Más adelante, en el capítulo 5,

desarrollaremos la teoría para las soluciones localizadas no lineales con invariancia traslacional.

OBSERVACIÓN 3.2.8. Nótese que los autovalores μ de las soluciones no lineales presentadas en los casos \mathcal{C}_{4v} y \mathcal{C}_{6v} tienden a los del caso lineal si $P \rightarrow 0$, es decir, para los valores de μ más a la derecha.

3.3. Soluciones simples con líneas nodales radiales y angulares

3.3.1. Soluciones simples con líneas nodales angulares. Sea $\psi(r, \theta)$ una solución de 2.2.1 con simetría rotacional discreta de orden n y pseudomomento angular m . Tal y como se mostró en el Capítulo 2, dicha solución puede expresarse como una función de Bloch en la variable angular $\psi(r, \theta) = e^{im\theta} g_m(r, \theta)$. Sea $L(r, \theta, |\psi|^2)$ el operador generado por esta solución y sean $f_{m', \alpha}(r, \theta)$ las funciones de Bloch (no lineales) asociadas a dicho operador no lineal, donde α es el índice de la banda a la que pertenece cada función de Bloch. Por la definición de solución autoconsistente, una de estas funciones coincide con ψ si $m' = m$ y α se corresponde con la banda a la que pertenece ψ . Las funciones $f_{m', \alpha}$ forman un espectro completo de autofunciones.

Dado que hemos podido expresar las soluciones con invariancia rotacional como funciones de Bloch con pseudomomento angular m , vamos a tratar de predecir la forma funcional y obtener numéricamente soluciones en bandas superiores.

NOTACIÓN 3.3.1. Denominamos potencial completo a la suma del potencial lineal y no lineal, $V(r, \theta) + F(|\psi|^2)$. Este potencial es periódico a lo largo de la variable angular, con periodo $\frac{2\pi}{n}$. Vamos a ocuparnos de soluciones con simetría rotacional discreta para las que este potencial presenta n mínimos de potencial en la variable angular. Vamos a denotar mediante el índice $\hat{i} = 1, \dots, n$ cada uno de estos mínimos.

Nótese que las funciones $f_{m', \alpha}$ son las asociadas a este potencial no lineal en la variable θ .

DEFINICIÓN 3.3.2. Denominamos Función de Wannier angular a la función definida como $W_\alpha(r, \theta - \theta_{\hat{i}}) = \sum_{m'} e^{-im'\theta_{\hat{i}}} f_{m', \alpha}(r, \theta)$, donde $f_{m', \alpha}$ son las funciones introducidas anteriormente.

LEMA 3.3.3. *Las funciones de Wannier angulares son ortogonales,*

$$\boxed{\int_{\eta} d\theta W_{\beta}^*(r, \theta - \theta_{\hat{j}}) W_{\alpha}(r, \theta - \theta_{\hat{i}}) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\hat{i}\hat{j}}}$$

donde η es un circuito cerrado en la variable angular y $\theta_{\hat{i}} = \frac{2\pi}{n} \hat{i}$.

DEMOSTRACIÓN. Se puede demostrar de modo análogo a como se hace para las funciones de Wannier bidimensionales (véase apéndice C):

$$\begin{aligned}
 \int_{\eta} d\theta W_{\beta}^*(\theta - \theta_j) W_{\alpha}(\theta - \theta_i) &= \sum_{m'm''} \int_{\eta} d\theta e^{i(m'\theta_j - m''\theta_i)} f_{m',\alpha}^*(r, \theta) f_{m'',\alpha}(r, \theta) = \\
 &= \sum_{m'm''} e^{i(m'\theta_j - m''\theta_i)} \int_{\eta} d\theta f_{m',\alpha}^*(r, \theta) f_{m'',\alpha}(r, \theta) = \\
 &= \sum_{m'm''} e^{i(m'\theta_j - m''\theta_i)} \delta_{m'm''} \delta_{\beta\alpha} = \\
 &= \delta_{\alpha\beta} \sum_{m'} e^{im'(\theta_j - \theta_i)} = \\
 &= \delta_{\alpha\beta} \sum_{m'} e^{im' \frac{2\pi}{n} (\hat{j} - \hat{i})} = \\
 &= \delta_{\alpha\beta} \delta_{\hat{j}\hat{i}},
 \end{aligned}$$

donde δ_{xy} es la delta de kronecker. \square

Se puede, por lo tanto, expresar cualquier función de Bloch angular en función de estas funciones de Wannier como:

$$f_{m',\alpha}(r, \theta) = \frac{1}{N} \sum_{\hat{i}} e^{im'\theta_i} W_{\alpha}(r, \theta - \theta_i).$$

Las soluciones en la primera banda *angular* aparecen como funciones que se pueden expresar como desarrollos de Wannier angulares en la primera banda. Las soluciones simples tipo solitón fundamental, vórtice o nodal como los presentados en las figuras 3.2.3, 3.2.4 y 3.2.5 cumplen esta propiedad. Se puede esperar que existan soluciones que se expresen en función de desarrollos de Wannier angulares en bandas superiores *angulares*. Las funciones de Wannier angulares en estas bandas presentan nodos en la variable angular, por lo que dichas soluciones también presentarán nodos en dicha variable, que se traducen en la existencia de otro tipo de líneas nodales que denominamos líneas nodales angulares. En la figura 3.3.1 se presentan soluciones de este tipo cuando las funciones de Wannier pertenecen a la segunda banda angular, es decir, presentan una única línea nodal. Se han presentado las soluciones cuando el sistema tiene simetría C_{4v} y para los pseudomomentos ($m = 0, -1, 2$). Estas soluciones cumplen con la tabla de caracteres de la representación correspondiente cuando se realizan rotaciones que sean múltiplos de $\frac{2\pi}{4}$. Las soluciones de este tipo con $m = -1$ son soluciones tipo vórtice y se han presentado en [219]. Nótese que, al contrario que las soluciones de la primera banda angular con $m = 0$ presentadas en la fig. 3.2.3 (a) y (b), la solución con $m = 0$ de la segunda banda angular cumple que $\Pi_{\sigma_h} \psi = -\psi$ y $\Pi_{\sigma_d} \psi = \psi$, donde $\Pi_{\sigma_{h,d}}$ son las reflexiones especulares respecto a un eje horizontal (σ_h) o un eje inclinado $\frac{\pi}{4}$ radianes (σ_d). Por lo tanto, en este caso no se cumple que $\psi(r, \theta) \propto cte \in \mathbb{R}$ cerca de \mathbf{x}_s , sino $\psi(r, \theta) \propto 2r^{|2\frac{m}{2}|} \cos(2\frac{m}{2}\theta) = 2r^{|4|} \cos(4\theta)$. Por consiguiente, la solución tipo solitón fundamental presenta líneas nodales en el origen. Sin embargo, la solución con $m = 2$ sigue cumpliendo que $\psi(r, \theta) \propto 2r^{|2\frac{m}{2}|} \cos(\frac{m}{2}\theta) = 2r^{|2|} \cos(2\theta)$ cerca de \mathbf{x}_s y presenta dos líneas nodales perpendiculares que pasan por el eje de simetría \mathbf{x}_s . La solución con pseudomomento $m = -1$ presenta una singularidad de fase de carga $v_{\mathbf{x}_s} = -1$ en \mathbf{x}_s . La vorticidad calculada a lo largo de cualquier circuito que incluya a \mathbf{x}_s es $v = v_{\mathbf{x}_s} = -1$, pese a la presencia de saltos de π radianes a lo largo de la

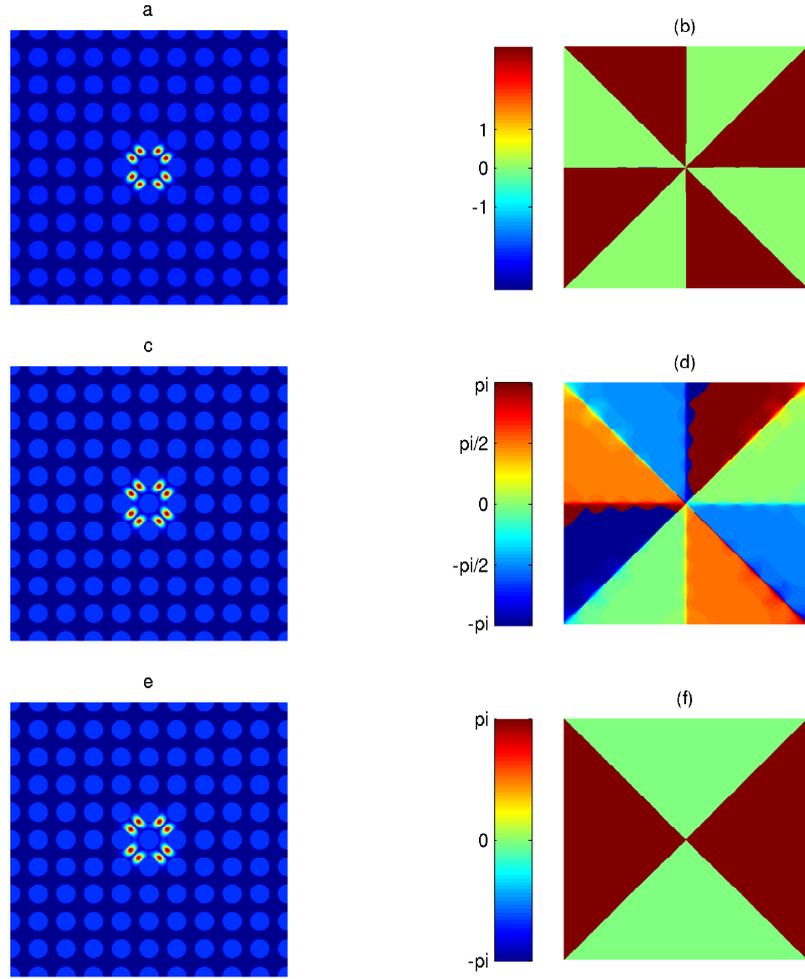


FIGURA 3.3.1. Soluciones con líneas nodales angulares con simetría C_{4v} y $\mu = -0,03$. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, 2$ se representan en (a), (c) y (e), respectivamente. El potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos de color azul claro. En (b), (d) y (f) se representan las fases correspondientes.

coordenada angular debido a las líneas nodales angulares. Como siempre, pertenece a una representación bidimensional, por tanto $\psi \in \mathbb{C}$, de acuerdo con 2.2.28 y la compleja conjugada es también solución con $m = 1$.

NOTACIÓN 3.3.4. Denominamos *solitones dipolares* a las soluciones de tipo solitón fundamental, nodal o vórtice que presentan líneas nodales angulares.

Los resultados del presente apartado se pueden extender al caso de soluciones de la ecuación 2.4.1, puesto que tal y como se ha demostrado, también estas soluciones se pueden clasificar en las diferentes representaciones irreducibles y todas tienen la forma de funciones de Bloch angulares.

3.3.2. Soluciones simples con líneas nodales radiales. En el caso lineal en un medio homogéneo, las excitaciones radiales de una solución con simetría rotacional $\mathcal{O}(2)$ son soluciones con mayor autovalor que ésta y que presentan nodos en el perfil radial, lo cual se traduce en líneas nodales radiales. Como hemos visto, en el caso lineal en un medio periódico las soluciones pueden expresarse como combinaciones de funciones de Bloch con pseudomomentos lineales distintos (véase apéndice C). Además, existen soluciones sólo para un cierto rango de μ , generándose una estructura de bandas permitidas y prohibidas. Estas funciones de Bloch pueden expresarse en términos de funciones de Wannier $W_\alpha(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$, las cuales se han definido en el apéndice C, y dependen no sólo de la posición en la red periódica, dada por \mathbf{x}_i sino también de la banda de índice α . Nótese que en este caso no son funciones de Wannier angulares. Estas funciones de Wannier pueden ser asimiladas a la solución en un único pozo de potencial, la cual, al igual que en el caso lineal, puede presentar excitaciones caracterizadas por líneas nodales radiales. Podemos construir funciones de Bloch en diferentes bandas utilizando funciones de Wannier en distintas bandas. Por ejemplo, podemos obtener funciones de Bloch en la segunda banda a partir de funciones de Wannier de la segunda banda en diferentes posiciones \mathbf{x}_i de la red. Estas soluciones presentaran, por tanto, estructuras de fase complicadas, y las funciones construidas a partir de funciones de Bloch de este tipo son las excitaciones en las redes periódicas.

El escenario anterior se ha extendido parcialmente al caso no lineal, $F(|\psi|^2) \neq 0$, utilizando aproximaciones analíticas y numéricas. Uno de los métodos utilizados para ello se basa en la teoría de bifurcación [181]. Mediante dicha teoría se intenta obtener soluciones no lineales a partir de las conocidas en el caso lineal, estudiando cómo varía la estabilidad de estas soluciones conforme la no linealidad se hace mayor. También se utiliza este método para obtener numéricamente soluciones en el caso no lineal a partir de las conocidas en el caso lineal. Es importante notar que en ningún momento se ha hecho uso de la teoría del pseudomomento angular ni de las bandas asociadas a periodicidades angulares.

En el presente apartado vamos a estudiar soluciones no lineales con simetría rotacional $O(2)$ y momento angular $l = 0$ y $l \neq 0$ y soluciones no lineales con simetría rotacional discreta con momentos $m = 0$ y $m \neq 0$. Adaptaremos los resultados conocidos en la literatura al lenguaje utilizado a lo largo de la presente Tesis, mientras que algunos de los resultados presentados serán originales.

Estudiemos en primer lugar el caso de soluciones de la ecuación 2.2.1 con simetría rotacional. En el capítulo 2 se demostró que dichas soluciones presentan momento angular l bien definido y tienen la forma $\psi(r, \theta) = e^{il\theta} g_l(r)$, donde $g_l(r)$ cumple la ecuación

$$[L'(r, |g_l|^2) - \frac{l^2}{r^2}]g_l(r) = \mu_l g_l(r),$$

donde $L'(r, |g_l|^2) = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + F(|g_l|^2)$.

- **Soluciones con líneas nodales radiales y $l = 0$.** En los años sesenta se demostró que la ecuación anterior, en el caso de $F(|g_l|^2) = |g_l|^2$, presenta múltiples soluciones para cada valor de μ_0 si se cumple que $\frac{dg_0}{dr} = 0$ si $r \rightarrow 0$ o $r \rightarrow \infty$. Cada una estas soluciones presenta n nodos en el perfil radial. Es común etiquetar estas soluciones como $\tilde{\psi}_{0,n}$ con $n = 0, 1, \dots$ el número de nodos de la solución. Dichas soluciones se han obtenido

numéricamente en [72] y su estabilidad se ha estudiado en [68] para no linealidad saturable, es decir, cuando $F(|g_l|^2) = \frac{|g_l|^2}{1+|g_l|^2}$.

- **Soluciones con líneas nodales radiales y $l \neq 0$.** En [220], en el contexto de condensados de Bose-Einstein, se obtienen numéricamente las excitaciones radiales de vórtices con simetría rotacional en el caso de no linealidad autoenfocante $F(\mathbf{x}) = |g_l|^2$ y desenfocante $F(\mathbf{x}) = -|g_l|^2$ utilizando un método de disparo [221]. En este trabajo se obtienen soluciones que cumplen que $\frac{dg_l}{dr} = 0$ si $r \rightarrow 0$ o $r \rightarrow \infty$ y soluciones que cumplen que $\frac{dg_l}{dr} = 0$ si $r \rightarrow 0$ pero $\frac{dg_l}{dr} \neq 0$ si $r \rightarrow \infty$, denominadas solitones anulares, para diferenciarlos de los vórtices, debido a su comportamiento asintótico diferente. Estas solitones muestran un comportamiento periódico en el perfil radial cuando $r \rightarrow \infty$. Nuevamente las excitaciones muestran líneas nodales radiales, mientras que la solución con menor autovalor es aquella que no presenta líneas nodales.
- **Soluciones con simetría rotacional discreta y líneas nodales radiales.** En la literatura se han obtenido soluciones con $m \neq 0$ tipo vórtice a partir de soluciones en bandas superiores en el caso lineal [182, 183] haciendo uso de la teoría de bifurcaciones [181]. También han sido obtenidas experimentalmente [183]. Dichas soluciones presentan líneas nodales radiales semejantes a las que presentan las excitaciones en el caso de soluciones con simetría rotacional continua y estructuras de fase complejas. En la figura 3.3.2 se muestran soluciones con líneas nodales radiales situadas entre dos celdas vecinas en un sistema con simetría \mathcal{C}_{4v} y con los pseudomomentos $m = 0, -1, 2$. Como se observa, la fase de ϕ cambia en π entre máximos de amplitud situados a lo largo del mismo radio. En todos los casos es fácil comprobar que las soluciones pertenecen a la representación correspondiente y que, por tanto, se cumple con la tabla de caracteres. Las soluciones tipo vórtice ($m = -1$), son las obtenidas en [182, 183].

La línea radial puede encontrarse también dentro de la misma celda. En la figura 3.3.3 se muestran este tipo de soluciones en sistema con simetría \mathcal{C}_{4v} .

OBSERVACIÓN 3.3.5. Nótese que pueden existir soluciones de este tipo con simetría rotacional continua, pero no excitaciones angulares, ya que las líneas nodales angulares rompen la simetría rotacional.

En la figura 3.3.4 se representa la curva $P = P(\mu)$ para las soluciones de los tipos presentados en las figuras 3.2.6, 3.3.1, 3.3.2 y 3.3.3. En las figuras se ha representado el límite de la primera banda de conducción asociada a la periodicidad del medio. Como se observa todas estas soluciones aparecen en la primera banda prohibida. Es importante destacar que no se han encontrado estas soluciones entre la primera banda y la segunda banda de conducción.

En la figura 3.3.5 se representa una solución obtenida en la segunda banda prohibida. Dicha solución presenta líneas nodales en todas las celdas del potencial lineal $V(\mathbf{x})$. Por lo tanto, esta solución, a diferencia de las presentadas más arriba, puede obtenerse a partir de funciones de Wannier en la segunda banda. En la fig. 3.3.6 se presenta la curva $P = P(\mu)$ de esta solución. Se han presentado como bandas de color rosa la primera y la segunda banda de conducción. Se observa que la solución existe en la segunda banda prohibida. De hecho no se ha obtenido

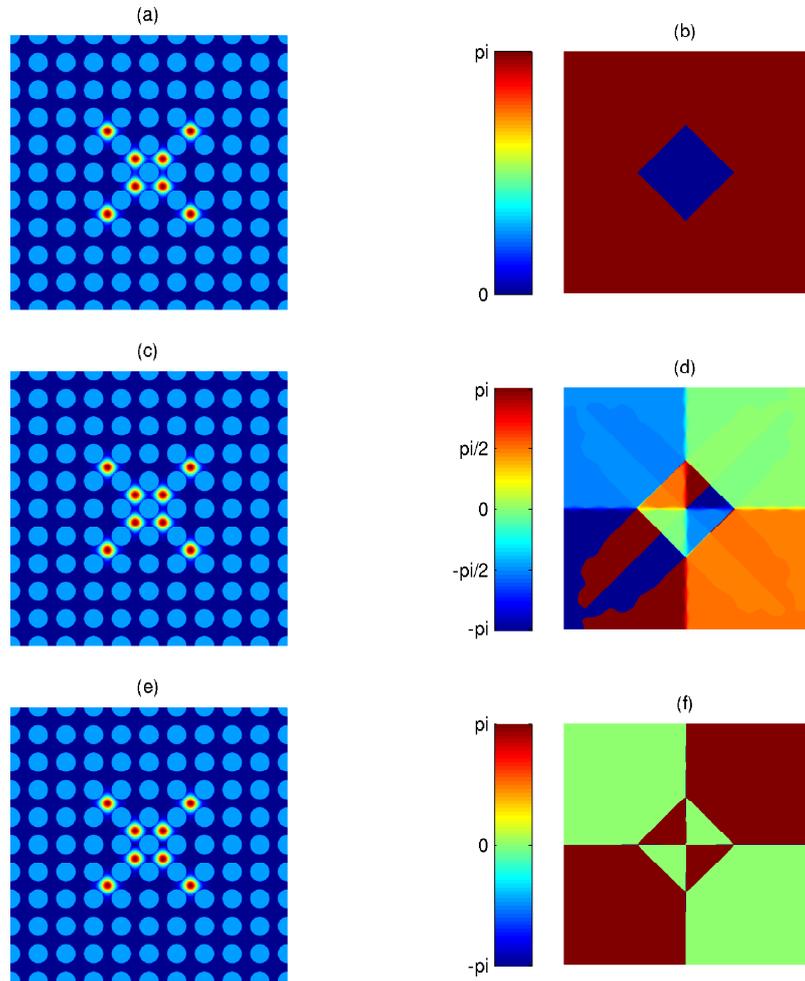


FIGURA 3.3.2. Soluciones con líneas nodales radiales con simetría C_{4v} cuando $\mu = 0$ y la línea nodal está entre celdas distintas. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, 2$ se representan en (a), (c) y (e), respectivamente. El potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos de color azul claro. En (b), (d) y (f) se representan las fases correspondientes.

numéricamente esta solución en la primera banda prohibida, sino únicamente para valores de μ entre la primera y la segunda banda permitidas.

Nótese que, en términos de la teoría desarrollada en el capítulo anterior, esta solución tienen pseudomomento $m = 0$ y como no presenta líneas nodales angulares, pertenece a la primera banda angular.

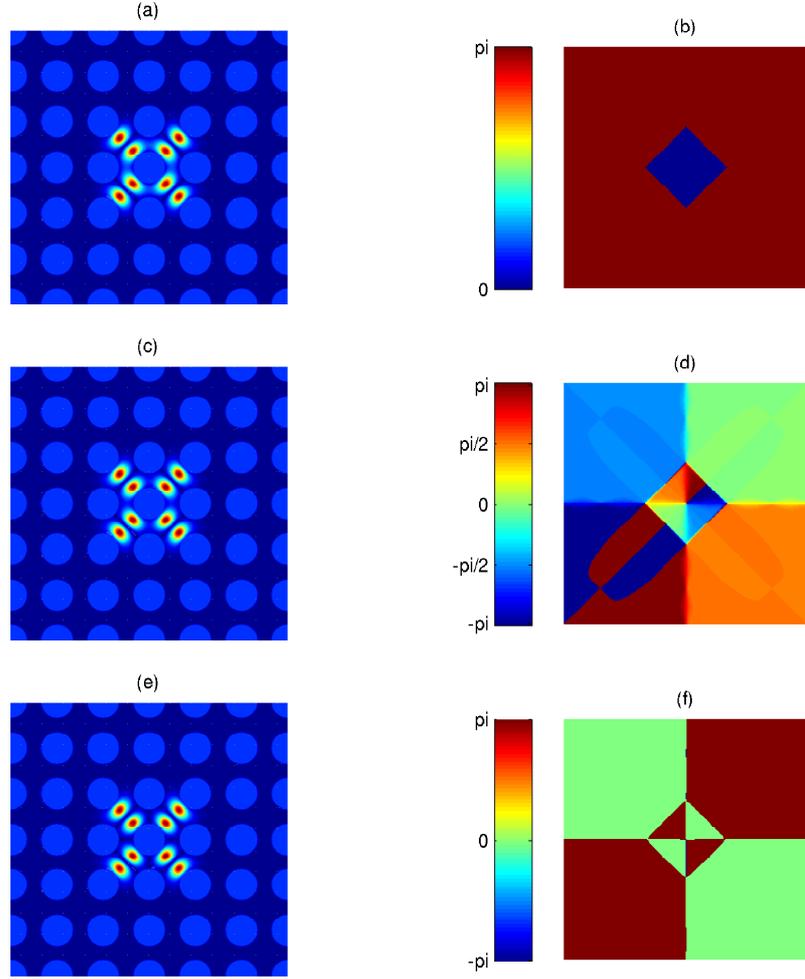


FIGURA 3.3.3. Soluciones con líneas nodales radiales, situadas dentro de la celda con simetría \mathcal{C}_{4v} y $\mu = 0$. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, 2$ se representan en (a), (c) y (e), respectivamente. El potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos de color azul claro. En (b), (d) y (f) se representan las fases correspondientes.

3.4. Soluciones compuestas

DEFINICIÓN 3.4.1. Decimos que una solución simétrica con simetría rotacional discreta es un solitón compuesto o *cluster* de vórtices si presenta vórtices en posiciones $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}_s$.

OBSERVACIÓN 3.4.2. Nótese que los *clusters* no pueden ser soluciones simples. Por otra parte, los *clusters* de vórtices que son solución de la ecuación 2.2.1 pueden ser sólo soluciones tipo vórtice ya que si presentan singularidades, la solución no puede ser real, como debe serlo en el caso de soluciones tipo solitón fundamental o

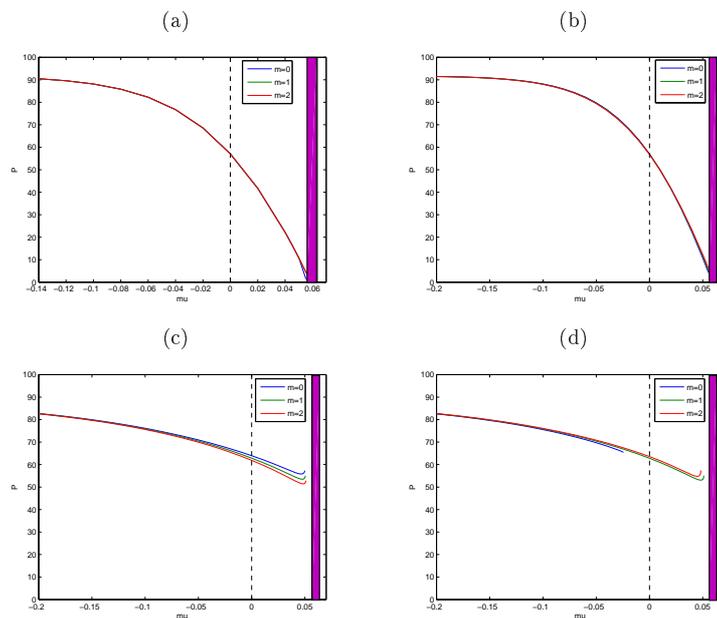


FIGURA 3.3.4. Valores de $P = \int |\psi|^2 d\mathbf{x}^2$ para cada autovalor μ para las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, 2$ (a) extendidas presentadas en la Fig. 3.2.6, (b) con líneas nodales radiales en la siguiente celda, (c) soluciones con líneas nodales radiales en la misma celda y (d) solitones dipolares.

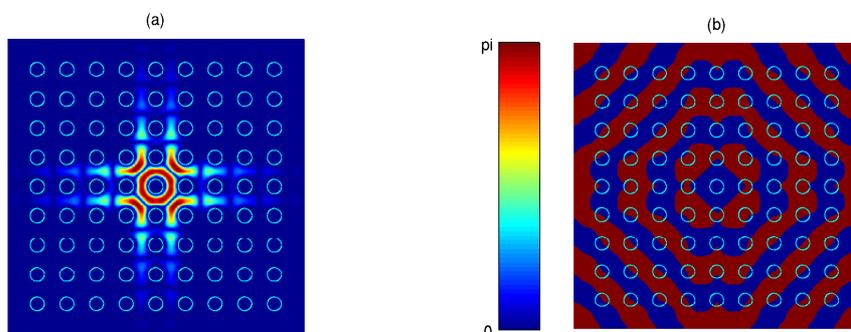


FIGURA 3.3.5. Solución con líneas nodales radiales tipo excitación con $\mu = 0,121$ y pseudomomento $m = 0$. La amplitud y la fase de la solución se representa en (a) y (b), respectivamente. Los mínimos del potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representan mediante círculos intermitentes de color azul claro.

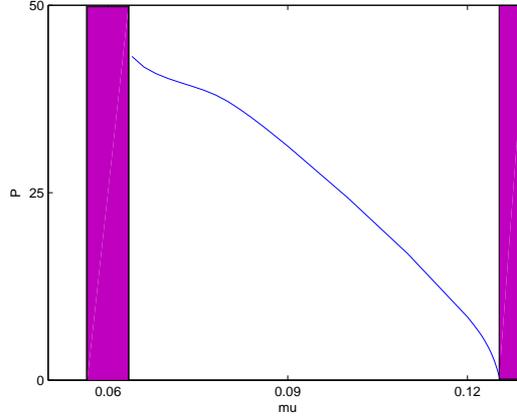


FIGURA 3.3.6. Curva $P = P(\mu)$ de la solución presentada en la Fig. 3.3.5.

nodal según la proposición 2.2.27. En el caso de soluciones simétricas de la ecuación 2.4.1 esta condición se relaja y permite la existencia *clusters* de vórtices tipo fundamental y nodal como los obtenidos en [110].

NOTACIÓN 3.4.3. Al igual que en el capítulo anterior, denotamos como \mathcal{G} al grupo bajo cuyos elementos es invariante $V(\mathbf{x})$ y como \mathcal{G}' al grupo bajo cuyos elementos es invariante $|\psi(\mathbf{x})|^2$, siendo ψ una solución de 2.2.1 o de 2.4.1. Como vimos se cumple que \mathcal{G}' es siempre un subgrupo de \mathcal{G} . A lo largo del capítulo denotaremos como $z \in \mathbb{C}$ a $z = x + iy$, donde $\mathbf{x} = (x, y)$.

NOTA 3.4.4. A lo largo del presente apartado nos vamos a ocupar de soluciones autoconsistentes simétricas para las que \mathcal{G}' es \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} . Evidentemente, en este caso puede suceder que \mathcal{G} sea $\mathcal{O}(2)$, o bien un grupo de simetría rotacional discreta del cual \mathcal{G}' sea un subgrupo, o bien coincidir con \mathcal{G}' .

LEMA 3.4.5. *Sea ψ una solución simétrica para la que se cumplen las condiciones de la nota 3.4.4. Asumamos que ψ se anula en un punto $\mathbf{x}_0 \neq \mathbf{x}_s$. Entonces $|\psi(\mathbf{x})|^2$ debe anularse en otros $n - 1$ puntos localizados en $z_t = z_0 e^{it\frac{2\pi}{n}}$, $t = 1, \dots, n - 1$ y $z = x + iy$, $\mathbf{x} = (x, y)$.*

DEMOSTRACIÓN. Supongamos que en \mathbf{x}_0 se cumple que $|\psi(\mathbf{x}_0)|^2 = 0$. Vamos a proceder por reducción al absurdo. Supongamos que en los puntos $z_t = z_0 e^{it\frac{2\pi}{n}}$, $t = 1, \dots, n - 1$ la amplitud es distinta de cero. Debido al teorema 2.2.13 ψ debe pertenecer a alguna de las representaciones irreducibles. Al aplicar los elementos del grupo de rotaciones discretas \mathcal{C}_n^t , dados por $e^{it\frac{2\pi}{n}}$ con $t = 1, \dots, n - 1$, el módulo de la solución no podría pertenecer a alguna de las representaciones irreducibles de \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} . Por lo tanto, la amplitud debe anularse en puntos $z_t = z_0 e^{it\frac{2\pi}{n}}$, $t = 1, \dots, n - 1$. \square

LEMA 3.4.6. *Sea ψ una solución simétrica para la que se cumplen las condiciones de la nota 3.4.4. Asumamos que la fase de $\psi(\mathbf{x})$ no está definida en un punto $\mathbf{x}_0 \neq \mathbf{x}_s$. Entonces deben existir otros $n - 1$ puntos localizados en $z_t = z_0 e^{it\frac{2\pi}{n}}$, $t = 1, \dots, n - 1$ donde la fase no está definida.*

DEMOSTRACIÓN. Supongamos que en \mathbf{x}_0 se cumple que la fase de ψ , $\arg \psi(\mathbf{x}_0)$, no está definida. Sean (r_0, θ_0) las coordenadas polares de dicho punto. Vamos a proceder, de nuevo, por reducción al absurdo. Supongamos que en los puntos $z_t = z_0 e^{it\frac{2\pi}{n}}$, $t = 1, \dots, n-1$ la fase estuviera determinada y tomara los valores φ_t , $t = 1, \dots, n-1$. Debido al teorema 2.2.13 ψ debe pertenecer a alguna de las representaciones irreducibles. Pero para ello al aplicar los elementos del grupo de rotaciones discretas \mathcal{C}_n^t , la fase debe transformarse entre puntos situados en el mismo radio r y ángulos $\theta = \theta' + t\frac{2\pi}{n}$, $t = 1, \dots, n-1$. Por lo tanto, si en (r_0, θ_0) la fase no está definida, en todos los puntos con radio r_0 y ángulos $\theta = \theta_0 + t\frac{2\pi}{n}$, $t = 1, \dots, n-1$ la fase no debe estar definida o se contradice que la solución pertenezca a una representación irreducible. \square

NOTA 3.4.7. Sea $\psi(\mathbf{x})$ una función compleja $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}$. Supongamos que en un punto \mathbf{x}_0 existe una singularidad de vorticidad v_0 . En ese caso, debido a la definición de vorticidad 2.6.1, para circuitos cerrados ζ suficientemente cercanos la fase debe incrementarse en $v_0 2\pi$. Es decir, para algún dominio $B \subset \mathbb{R}^2$ suficientemente pequeño que contiene a \mathbf{x}_0 , al calcular la vorticidad a lo largo de cualquier circuito cerrado η contenido en B y que encierre a \mathbf{x}_0 se obtiene v_0 (véase definición 2.6.1).

PROPOSICIÓN 3.4.8. *Sea ψ una solución simétrica para la que se cumplen las condiciones de la nota 3.4.4. Supongamos que la solución simétrica $\psi(\mathbf{x})$ pertenece a la j -ésima representación irreducible del grupo correspondiente y sea m su pseudomomento angular. Asumamos que $\psi(\mathbf{x})$ presenta una singularidad en un punto $\mathbf{x}_0 \neq \mathbf{x}_s$ de carga v_0 . Entonces deben existir otras $n-1$ singularidades localizadas en puntos $z_t = z_0 e^{it\frac{2\pi}{n}}$, $t = 1, \dots, n-1$ con la misma carga.*

DEMOSTRACIÓN. Supongamos que en \mathbf{x}_0 existe una singularidad. En este punto $|\psi(\mathbf{x}_0)|^2 = 0$, y $\varphi = \arg \psi(\mathbf{x}_0)$ no está definido. Por lo tanto según los lemas 3.4.5 y 3.4.6 en los puntos $z_t = z_0 e^{it\frac{2\pi}{n}}$, $t = 1, \dots, n-1$ la amplitud también se anula y la fase no está definida. Además, debido a la nota 3.4.7, en un entorno B_0 de \mathbf{x}_0 la carga de la singularidad, calculada a lo largo de circuitos cerrados η_0 contenidos en B_0 y que encierren a \mathbf{x}_0 , es v_0 . Sean $\mathbf{x}_{\eta_0} = (r_{\eta_0}, \theta_{\eta_0})$ los puntos de cualquiera de estos circuitos. Apliquemos las rotaciones elementales del grupo, $\mathcal{C}_n^t = e^{it\frac{2\pi}{n}}$, $t = 1, \dots, n-1$, a $\psi(\mathbf{x}_{\eta_0})$. Esto transforma la función en $\psi(\mathbf{x}_{\eta_t})$, donde \mathbf{x}_{η_t} son tales que $z_{\eta_t} = z_{\eta_0} e^{it\frac{2\pi}{n}}$, $t = 1, \dots, n-1$ y, evidentemente, forman curvas η_t , $t = 1, \dots, n-1$ que encierran a los puntos z_t . Por tanto, la fase $\varphi(\mathbf{x}_{\eta_t})$ cumplirá que $\varphi(\mathbf{x}_{\eta_t}) = \varphi(\mathbf{x}_{\eta_0}) + m\frac{2\pi}{n}t$, $\forall \mathbf{x}_{\eta_t}$ debido a la aplicación de los elementos del grupo. En consecuencia, al evaluar la vorticidad en torno a los puntos \mathbf{x}_t en cualquier circuito η_t , se obtendrá v_0 , ya que el término $e^{im\frac{2\pi}{n}t}$ no contribuye a la integral. \square

NOTACIÓN 3.4.9. Sea $\mathbf{x}_0 = (r_0, \theta_0) \neq \mathbf{x}_s$ el punto en el que existe una singularidad de vorticidad v_0 . Al conjunto de vórtices situados según 3.4.8 en puntos con el mismo radio r_0 y en ángulos $\theta = \theta_0 + t\frac{2\pi}{n}$, $t = 0, \dots, n-1$ con vorticidad v_0 lo denominaremos anillo de vórtices de radio r_0 y vorticidad v_0 .

Por lo tanto, los *clusters* definidos en 3.4.1 deben obedecer la propiedad (3.4.8) y deben presentar anillos de vórtices.

OBSERVACIÓN 3.4.10. Si la función cerca de \mathbf{x}_0 se comporta como $\propto e^{iv_0\theta}$, entonces la función cerca de los puntos \mathbf{x}_t se comportará como $\psi \propto e^{imt\frac{2\pi}{n}} e^{iv_0\theta}$, $t = 1, \dots, n-1$. Los ejemplos numéricos de soluciones simétricas que vamos a ver a continuación cumplen esta propiedad.

En la figura 3.4.1 se presenta la amplitud y fase de soluciones simétricas compuestas o *clusters* en sistemas con simetría \mathcal{C}_{4v} , donde el potencial lineal $V(\mathbf{x})$ es como el introducido en la figura 3.2.1 (c). Se ha comprobado que los ejemplos presentados cumplen con la tabla de caracteres de la representación correspondiente ($m = -1, j = 2$) y que los vórtices situados fuera del eje satisfacen los lemas 3.4.5 y 3.4.6 y la proposición 3.4.8.

En la figura 3.4.2 se representa la posición de las singularidades en los *clusters* de vórtices de la figura 3.4.1. Analicemos cuidadosamente cada una de estas soluciones. Para ello utilizaremos la siguiente notación:

NOTACIÓN 3.4.11. Sea $D \times D$ el tamaño de un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. En este dominio, la celda unidad de tamaño $a \times a$ se repite N^2 veces (al igual que en 3.2.1 (c), a denota el periodo de la red cuadrada). Denotemos como $\hat{j} = (j_x, j_y)$, $j_{x,y} = 0, 1, \dots, N$, el centro de los agujeros de radio R situados en las coordenadas $(x, y) = (-\frac{D}{2} + j_x a, -\frac{D}{2} + j_y a)$. El centro de estos agujeros coincide con los máximos del potencial $V(\mathbf{x})$. Denotemos como $\hat{i} = (i_x, i_y)$, $i_{x,y} = 1, \dots, N$, al mínimo de potencial situado en las coordenadas $(x, y) = (-\frac{D}{2} + i_x a + \frac{a}{2}, -\frac{D}{2} + i_y a + \frac{a}{2})$.

En todos los casos presentados las singularidades situadas en puntos diferentes del eje de simetría \mathbf{x}_s , se encuentran sobre máximos de potencial \hat{j} , mientras que los máximos de la amplitud se sitúan en los mínimos de potencial \hat{i} .

Con esta notación, en $\hat{j} = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2})$ se encuentra el eje de simetría rotacional y hay una singularidad de carga $v_{\mathbf{x}_s} = -1$. Debido a este antivórtice central de carga $v_{\mathbf{x}_s} = -1$, la fase correspondiente a los máximos de amplitud situados en los mínimos del potencial $\hat{i}_1 = (\frac{N-1}{2} - 1, \frac{N-1}{2} - 1)$, $\hat{i}_2 = (\frac{N-1}{2} - 1, \frac{N-1}{2})$, $\hat{i}_3 = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2})$ y $\hat{i}_4 = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2} - 1)$ es, para los tipos 1 y 3, $\pi, \frac{3\pi}{2}, 0$, y $\frac{\pi}{2}$ y para los tipos 2 y 4, $0, \frac{\pi}{2}, \pi$, y $\frac{3\pi}{2}$, respectivamente. Analicemos detalladamente el resto de vórtices que aparecen:

1. **Clusters de vórtices tipo 1.** Aparecen singularidades en los máximos de potencial $\hat{j}_1 = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2} + 1)$, $\hat{j}_2 = (\frac{N-1}{2} + 1, \frac{N-1}{2})$, $\hat{j}_3 = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2} - 1)$ y $\hat{j}_4 = (\frac{N-1}{2} - 1, \frac{N-1}{2})$, con $N = 9$. Si analizamos la fase de los máximos de la amplitud en torno a $\hat{j}_1 = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2} + 1)$, es decir, en las posiciones $\hat{i}_1 = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2})$, $\hat{i}_2 = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2} + 1)$, $\hat{i}_3 = (\frac{N-1}{2} - 1, \frac{N-1}{2} + 1)$ y $\hat{i}_4 = (\frac{N-1}{2} - 1, \frac{N-1}{2})$ se observa que la fase es, respectivamente, $0, \frac{\pi}{2}, \pi$, y $\frac{3\pi}{2}$. Como hemos girado en sentido inverso a las agujas del reloj, la carga de esta singularidad es $+1$, es decir, es un vórtice. La fase de los máximos de amplitud en torno a cada uno de los otros tres vórtices está relacionada con estos cuatro máximos por las rotaciones correspondientes dado que $m = -1$, de acuerdo con 3.4.8. Por lo tanto se trata también de tres vórtices. En la figura 3.4.2 se presenta un esquema de la estructura del *cluster* tipo 1.
2. **Clusters de vórtices tipo 2.** Aparecen singularidades en los máximos del potencial situados en $\hat{i}_1 = (\frac{N-1}{2} + 2, \frac{N-1}{2} + 2)$, $\hat{i}_2 = (\frac{N-1}{2} - 2, \frac{N-1}{2} + 2)$, $\hat{i}_3 = (\frac{N-1}{2} - 2, \frac{N-1}{2} - 2)$ y $\hat{i}_4 = (\frac{N-1}{2} + 2, \frac{N-1}{2} - 2)$ con $N = 9$. Si analizamos la fase de los máximos de amplitud en torno a $\hat{i}_1 = (\frac{N-1}{2} + 2, \frac{N-1}{2} + 2)$, se observa que en las posiciones $\hat{j}_1 = (\frac{N-1}{2} + 2, \frac{N-1}{2} + 2)$, $\hat{j}_2 = (\frac{N-1}{2} + 1, \frac{N-1}{2} + 2)$, $\hat{j}_3 = (\frac{N-1}{2} + 1, \frac{N-1}{2} + 1)$ y $\hat{j}_4 = (\frac{N-1}{2} + 2, \frac{N-1}{2} + 1)$, la fase es $0, \frac{\pi}{2}, \pi$, y $\frac{3\pi}{2}$, respectivamente. Igual que anteriormente, se trata

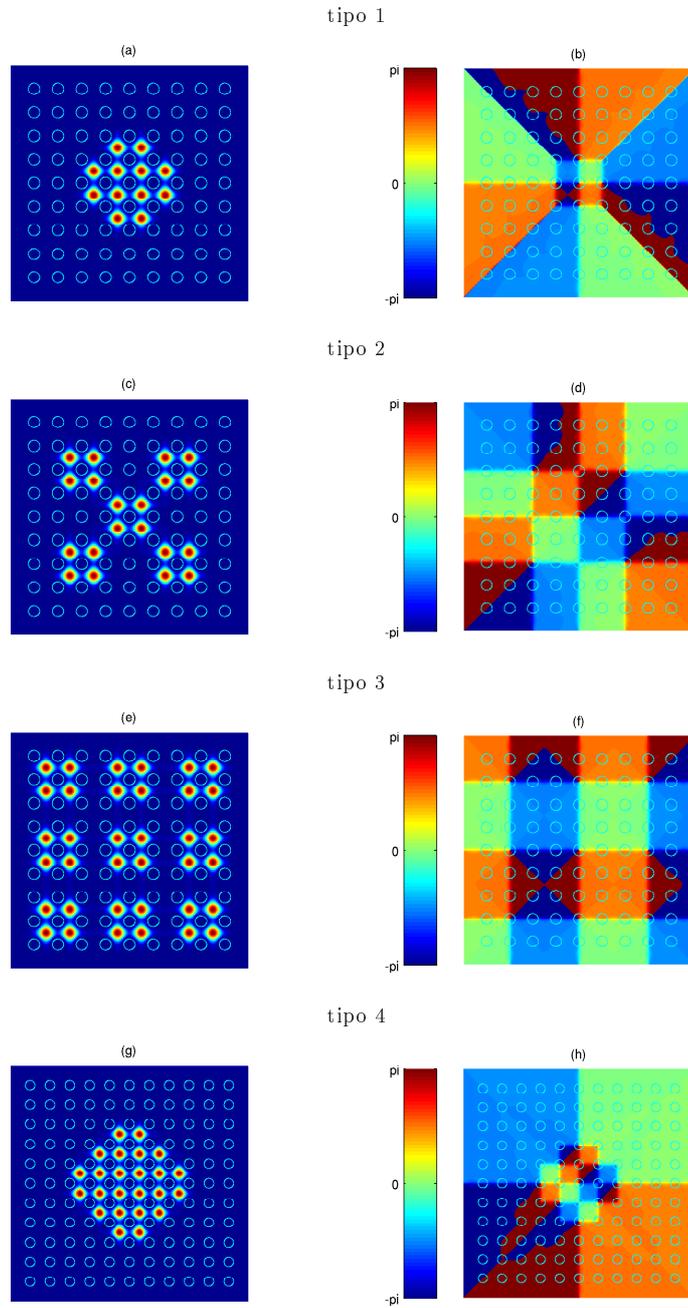


FIGURA 3.4.1. *Clusters* de vórtices con simetría \mathcal{C}_{4v} y $\mu = 0,02$ con pseudomomento $m = -1$. La amplitud de las soluciones se representa en (a), (b), (e) y (g). El potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos de color azul claro. En (b), (d), (f) y (h) se representan las fases correspondientes.

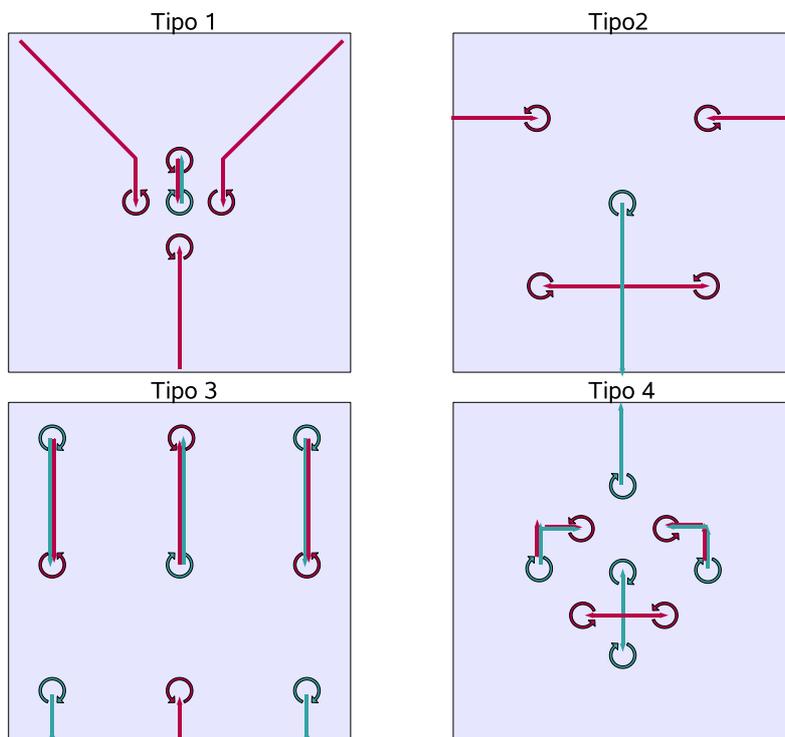


FIGURA 3.4.2. Posiciones de los vórtices y antivórtices en cada una de las soluciones presentadas en 3.4.1. Los vórtices con carga positiva se representan mediante flechas rojas girando en el sentido contrario al de las agujas del reloj, mientras que los antivórtices (carga negativa) se representan mediante flechas azules girando en el sentido de las agujas del reloj. Las flechas azules salientes desde la singularidad representan las líneas de ruptura en los antivórtices y las flechas rojas señalando hacia la singularidad las líneas de ruptura en los vórtices.

de un vórtice. De acuerdo con 3.4.8, la fase de los máximos de amplitud en torno a cada uno de las otras tres singularidades está relacionada con estos cuatro máximos, teniendo en cuenta que $m = -1$. Se trata también, por tanto, de tres vórtices. En la figura 3.4.2 se presenta un esquema de la estructura de este *cluster*.

3. **Clusters de vórtices tipo 3.** Aparecen vórtices en las mismas posiciones relativas que en los *clusters* tipo 1, pero las coordenadas $\hat{i}_1 = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2} + 3)$, $\hat{i}_2 = (\frac{N-1}{2} + 3, \frac{N-1}{2})$, $\hat{i}_3 = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2} - 3)$ y $\hat{i}_4 = (\frac{N-1}{2} - 3, \frac{N-1}{2})$, donde $N = 9$. Además aparecen otras cuatro singularidades de fase en las posiciones $\hat{i}_5 = (\frac{N-1}{2} + 3, \frac{N-1}{2} + 3)$, $\hat{i}_6 = (\frac{N-1}{2} - 3, \frac{N-1}{2} + 3)$, $\hat{i}_7 = (\frac{N-1}{2} - 3, \frac{N-1}{2} - 3)$ y $\hat{i}_8 = (\frac{N-1}{2} + 3, \frac{N-1}{2} - 3)$. Si analizamos la fase de los máximos de la amplitud en torno a $\hat{i}_5 = (\frac{N-1}{2} + 3, \frac{N-1}{2} + 3)$, esto es, en las coordenadas $\hat{j}_1 = (\frac{N-1}{2} + 2, \frac{N-1}{2} + 2)$, $\hat{j}_2 = (\frac{N-1}{2} + 2, \frac{N-1}{2} + 3)$,

$\hat{j}_3 = (\frac{N-1}{2} + 3, \frac{N-1}{2} + 3)$ y $\hat{j}_4 = (\frac{N-1}{2} + 3, \frac{N-1}{2} + 2)$ se observa que la fase es $0, \frac{\pi}{2}, \pi$, y $\frac{3\pi}{2}$, respectivamente. Como hemos girado en el sentido de las agujas del reloj, la carga de esta singularidad es $v_5 = -1$. Nuevamente las otras tres singularidades son también de carga -1 y la fase en los máximos de amplitud en torno a todos ellos cumple con 3.4.8. En la figura 3.4.2 se presenta un esquema de la estructura de este *cluster*.

4. **Clusters de vórtices tipo 4.** Aparecen vórtices en las mismas posiciones relativas que en los *clusters* tipo 2, pero en las posiciones $\hat{i}_1 = (\frac{N-1}{2} + 1, \frac{N-1}{2} + 1)$, $\hat{i}_2 = (\frac{N-1}{2} - 1, \frac{N-1}{2} + 1)$, $\hat{i}_3 = (\frac{N-1}{2} - 1, \frac{N-1}{2} - 1)$ y $\hat{i}_4 = (\frac{N-1}{2} + 1, \frac{N-1}{2} - 1)$, con $N = 11$. Además aparecen singularidades en las posiciones $\hat{i}_5 = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2} + 2)$, $\hat{i}_6 = (\frac{N-1}{2} + 2, \frac{N-1}{2})$, $\hat{i}_7 = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2} - 2)$ y $\hat{i}_8 = (\frac{N-1}{2} - 2, \frac{N-1}{2})$. Analicemos la fase de los máximos de la amplitud en torno a $\hat{i}_5 = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2} + 2)$. La fase en las posiciones $\hat{j}_1 = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2} + 2)$, $\hat{j}_2 = (\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2} + 1)$, $\hat{j}_3 = (\frac{N-1}{2} - 1, \frac{N-1}{2} + 1)$ y $\hat{j}_4 = (\frac{N-1}{2} - 1, \frac{N-1}{2} + 2)$ es $0, \frac{\pi}{2}, \pi$, y $\frac{3\pi}{2}$, respectivamente, con lo que se trata de una singularidad de carga $v_5 = -1$. Las tres singularidades relacionadas con esta según la proposición 3.4.8 son también de carga -1 . En la figura 3.4.2 se presenta un esquema de la estructura de este *cluster*.

NOTACIÓN 3.4.12. Denominamos *línea de ruptura* a la línea que se origina en cada singularidad y que cumple que al evaluar la fase a lo largo de trayectorias que la cortan, ésta cambia entre 0 y $k2\pi$ con $k \in \mathbb{Z}$.

Se ha observado en los resultados numéricos que la posición de estas líneas presenta ciertas restricciones en los *clusters* y, por lo tanto, debe ser tenido en cuenta en las semillas iniciales utilizadas para obtener las soluciones de 2.2.1 mediante el método numérico descrito en el apéndice D. En particular se ha observado en los resultados numéricos que las líneas de ruptura son líneas que unen el vórtice del que parten con otro extremo puede estar localizado en alguna de las siguientes posibilidades:

1. En la frontera de dominio.
2. En un vórtice con la misma carga en valor absoluto pero signo contrario.
3. En otro vórtice con la misma carga, siempre que previamente han cortado con la línea que se origina en un vórtice con a misma carga en valor absoluto pero signo contrario.

En los *clusters* de vórtices mostrados en la figura 3.4.1 se observan de las tres posibilidades. La estructura de vórtices y antivórtices correspondiente se ha representado en la figura 3.4.2. Debido a que si no hay cruces de líneas de ruptura, las líneas de ruptura que empiezan en un antivórtice terminan en un vórtice o en infinito, se han representado estas como flechas salientes azules y las asociadas a vórtices como flechas rojas entrantes. Analicemos cada uno de los *clusters* por separado:

1. *Clusters* tipo 1. Presentan tres líneas de ruptura asociadas a vórtices que van hasta infinito, y una que termina en el antivórtice central
2. *Clusters* tipo 2. Dos líneas de ruptura asociadas a vórtices van a infinito y las otras dos terminan en el otro vórtice, tras cruzarse con la línea de ruptura asociada al antivórtice central.
3. *Clusters* tipo 3. Hay un anillo de vórtices y otro de antivórtices. Una de las líneas de ruptura asociadas a un vórtice va al antivórtice central, y las

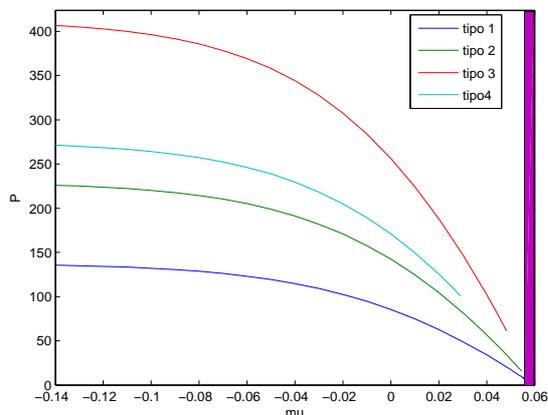


FIGURA 3.4.3. Valores de $P = \int |\psi|^2 dx^2$ para cada autovalor μ para las cuatro tipos de *clusters* presentados.

otras dos a sendos antivórtices del anillo de antivórtices. La última va a infinito al igual que las dos asociadas a los antivórtices restantes.

4. *Clusters* tipo 4. Nuevamente, hay una anillo de antivórtices y otro de vórtices. Dos de las líneas de ruptura del anillo de vórtices terminan en el anillo de antivórtices. Las otras dos terminan en el otro vórtice, tras cruzarse con la línea de ruptura que se origina en el antivórtice central y va a otro de los antivórtices del anillo de vórtices. La única línea asociada al anillo de antivórtices restante va a infinito.

Finalmente, se ha calculado la vorticidad en un circuito que incluye todas las singularidades y se ha obtenido $v = 3$ para los *clusters* tipo 1 y 2 y $v = -1$ para los *clusters* 3 y 4. Por lo tanto, existen contraejemplos de soluciones simétricas no simples con pseudomomento $m = -1$ y vorticidad distinta de -1 . Más adelante, en el último apartado del capítulo 4, analizaremos la relación entre vorticidad y pseudomomento en estos casos. Obsérvese también que hay una relación entre la vorticidad calculada en la frontera del dominio y el número de líneas de ruptura que llegan hasta éste.

En la figura 3.4.3 se representa la curva $P = P(\mu)$ de los *clusters* presentados en 3.4.1. Se ha representado la primera banda de conducción como una banda de color rosa. Por lo tanto todas estas soluciones aparecen en la primera banda prohibida.

Dinámica de soluciones con simetría rotacional

4.1. Introducción

El estudio realizado en los dos capítulos previos se centra en soluciones estacionarias o solitones. Es decir, soluciones $\phi(\mathbf{x}, z) = e^{i\mu z}\psi(\mathbf{x})$ de la ecuación de Schrödinger no lineal deducida en el apéndice A. Vamos extender estos resultados a la propagación de soluciones no estacionarias. Para ello, definiremos de nuevo las soluciones autoconsistentes simétricas, les asociaremos un momento l o pseudomomento m angular y estudiaremos la conservación de estas cantidades a lo largo de la propagación y el efecto de cambios en la simetría del medio sobre la simetría de la solución. También estudiaremos la relación entre la vorticidad v , el momento l o pseudomomento m angular y el número de singularidades que presente la solución a lo largo de la propagación.

En el segundo apartado fijaremos la notación y las ecuaciones a estudiar. En el tercer apartado demostraremos que las soluciones con simetría rotacional discreta no sólo presentan pseudomomento angular bien definido, sino que éste se conserva a lo largo de la evolución. En el cuarto apartado obtendremos qué pasa con el momento o pseudomomento angular cuando, a lo largo de la propagación, se reduce la simetría de $V(\mathbf{x})$. Además, cuando podamos asumir que las soluciones obtenidas para longitudes de propagación elevadas tienen carácter simple, esto se traducirá en una predicción sobre la vorticidad y podremos obtener distintas *transformaciones de vorticidad*, como inversiones de la misma cuando ésta cambia de signo, o borrados, cuando la vorticidad se anula. Se presentarán ejemplos numéricos de estas transformaciones en distintos sistemas. En el quinto apartado se profundizará en la relación entre pseudomomento angular y la vorticidad en el caso general en el que la solución no es simple, obteniendo una regla semiempírica que relaciona ambas cantidades con el número de singularidades de fase que presenta la solución simétrica en cada z dentro de un circuito cerrado.

4.2. Soluciones estacionarias y no estacionarias

Consideremos la ecuación

$$(4.2.1) \quad L(\mathbf{x}, |\phi(\mathbf{x}, z)|^2) \phi(\mathbf{x}, z) = -i \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, z)}{\partial z},$$

donde L se define como en la ecuación 2.2.1 y $z \in \mathbb{R}$. En este caso, V puede ser también función de z y lo escribiremos como $V(\mathbf{x}, z)$. En este capítulo denotaremos por \mathcal{G} al grupo de simetría de $V(\mathbf{x}, z)$ y por \mathcal{G}' al grupo de simetría de $|\phi(\mathbf{x}, z)|^2$ en un determinado z . Nótese que el grupo simetría de V (y de $|\phi(\mathbf{x}, z)|^2$) puede cambiar a lo largo de z .

NOTACIÓN 4.2.1. Se denomina *solución estacionaria* de la ecuación 4.2.1 a las soluciones de dicha ecuación cuando $V(\mathbf{x}, z) = V(\mathbf{x})$, cuya dependencia en z es de la forma $\phi(\mathbf{x}, z) = e^{i\mu z}\psi(\mathbf{x})$. Dichas soluciones cumplen la ecuación de autovalores 2.2.1. Se denomina *solución estacionaria rotatoria* de la ecuación 4.2.1 a las soluciones de dicha ecuación cuando $V(\mathbf{x}, z) = V(\mathbf{x})$, cuya dependencia en z es de la forma $\tilde{\phi}(r, \theta, z) = e^{i\mu z}\tilde{\psi}(r, \theta + \omega z)$. Dichas soluciones cumplen la ecuación de autovalores 2.4.1.

Consideremos la ecuación:

$$(4.2.2) \quad L_\omega \left(\mathbf{x}, |\tilde{\phi}(r, \theta, z)|^2 \right) \tilde{\phi}(r, \theta, z) = -i \frac{\partial \tilde{\phi}(r, \theta, z)}{\partial z},$$

donde L_ω se define como en el apartado 2.4 y $z \in \mathbb{R}$ (nuevamente $V = V(\mathbf{x}, z)$). En este caso las soluciones estacionarias no rotatorias de la forma $\tilde{\phi}(r, \theta, z) = e^{i\mu z}\tilde{\psi}(r, \theta)$ son solución de la ecuación no lineal de autovalores 2.4.1 con $V(\mathbf{x}, z) = V(\mathbf{x})$.

En adelante vamos a razonar únicamente para soluciones de la ecuación 4.2.1. Sin embargo, los resultados son igualmente válidos para las soluciones de la ecuación 4.2.2.

NOTACIÓN 4.2.2. Al igual que en capítulos anteriores denotaremos por \mathcal{G} al grupo de simetría de $V(\mathbf{x}, z)$. Nótese que ahora el grupo de simetría \mathcal{G} puede variar a lo largo de la evolución. Asimismo denotaremos por \mathcal{G}' al grupo de simetría de $|\phi(\mathbf{x}, z)|^2$, el cual cumple que coincide con \mathcal{G} o es un subgrupo de este, $\mathcal{G}' \subset \mathcal{G}$. Evidentemente \mathcal{G}' también puede variar a lo largo de la propagación.

Supongamos que $\phi(\mathbf{x}, z_0)$ es una solución de 4.2.1 en un z_0 determinado. Supongamos que $\mathcal{G} \equiv \mathcal{O}(2)$ y que $\mathcal{G}' \equiv \mathcal{O}(2)$. Siguiendo argumentos similares a los utilizados en el capítulo 2 se puede deducir que $\phi(\mathbf{x}, z_0)$ debe presentar momento angular l bien definido, con $l \in \mathbb{Z}$. Estas soluciones tienen por tanto, la forma $\phi(\mathbf{x}, z) = e^{il\theta}g(r, z)$ aunque la dependencia en z no tiene por qué ser de la forma $e^{i\mu z}$.

Por otra parte, si suponemos que $\mathcal{G} \equiv \mathcal{C}_n$ o \mathcal{C}_{nv} , con $\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}$ o bien que $\mathcal{G} \equiv \mathcal{O}(2)$ pero que $\mathcal{G}' \equiv \mathcal{C}_n$ o \mathcal{C}_{nv} , el operador no lineal L tendrá simetría \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} . Por lo tanto, mediante argumentos similares a los utilizados en el capítulo 2 se puede deducir que la solución presenta pseudomomento angular m bien definido, donde m puede tomar los valores permitidos según el orden de simetría obtenidos en el teorema 2.2.22. En consecuencia, la solución $\phi(\mathbf{x}, z_0)$ también debe pertenecer a alguna de las representaciones irreducibles del grupo de rotaciones discretas de orden n considerado, siempre que su módulo, $|\phi(\mathbf{x}, z_0)|^2$, presente simetría rotacional discreta. Estas soluciones tienen, por tanto, la forma $\phi(\mathbf{x}, z) = e^{im\theta}u(r, \theta, z)$, con $u(r, \theta + \epsilon, z) = u(r, \theta, z)$, $\epsilon = \frac{2\pi}{n}$. Sin embargo, la dependencia en z no tiene por qué ser de la forma $e^{i\mu z}$.

NOTACIÓN 4.2.3. A estas soluciones con simetría rotacional discreta o continua las denominaremos *soluciones simétricas no estacionarias*.

Para definir las soluciones simétricas no estacionarias hemos impuesto la simetría del operador, lo cual da lugar a la existencia de un momento o pseudomomento angular. Sin embargo, no hemos demostrado que, a lo largo de la evolución con z , la simetría se conserve, y en consecuencia las cantidades l o m se conserven. Veamos que en los sistemas con simetría rotacional el momento angular se conserva,

mientras que en los sistemas con simetría rotacional discreta, aunque ya no se conserva el momento angular, podemos obtener conclusiones sobre el pseudomomento angular.

4.3. Simetría rotacional y cantidades conservadas

Las soluciones con momento angular bien definido son aquellas que son autofunciones de la ecuación $\mathcal{R}\phi = e^{il\theta}\phi$, donde l representa el momento angular y el operador de rotaciones infinitesimales es $\mathcal{R} = e^{-i\theta(\frac{\partial}{\partial\theta})}$, con θ la coordenada angular en polares. En sistemas cuyo operador de evolución L sea invariante bajo los elementos del grupo $\mathcal{O}(2)$, l se conserva ya que coincide con la componente z del momento angular j_z definido como:

$$j_z = -i \int_{\mathbb{R}^2} dx dy \phi^* (r \times \nabla) \phi,$$

(cuando ϕ es una autofunción de \mathcal{R}) debido al teorema de Noether, $\frac{\partial j_z}{\partial z} = 0$. Por lo tanto, en un sistema cuyo operador sea invariante bajo los elementos del grupo $\mathcal{O}(2)$, si la solución inicialmente presenta momento angular bien definido, éste se conserva.

Esto deja de ser cierto en sistemas con simetría rotacional discreta, es decir, si $\mathcal{G} \equiv \mathcal{C}_n$ o \mathcal{C}_{nv} . En el caso no lineal, $F(|\phi|^2) \neq 0$, tampoco es cierto en medios con simetría rotacional, es decir cuando \mathcal{G} es $\mathcal{O}(2)$, si la función $\phi(\mathbf{x}, z_0)$ al inicio de la propagación cumple que $|\phi(\mathbf{x}, z_0)|^2$ es invariante bajo \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} , es decir, si $\mathcal{G}' \equiv \mathcal{C}_n$ o \mathcal{C}_{nv} . Este es el caso, por ejemplo, de los azimutones [110]. En estos casos, como hemos visto, la solución presenta pseudomomento angular bien definido y es fácil ver que el momento angular no se conserva, ya que el operador de rotaciones infinitesimales no conmuta con el operador L .

Sin embargo, es posible demostrar que el pseudomomento angular sí que se conserva. El siguiente teorema se introdujo en [215] con una demostración basada en la transformación 2.3.1 y operadores traslacionales. La demostración que se va a presentar a continuación está basada en ésta, pero se usan directamente operadores de rotaciones discretas, sin que haya necesidad de hacer uso de la transformación 2.3.1.

NOTACIÓN 4.3.1. Sea z_0 la posición en z a partir de la cual se estudia la propagación de una función $\phi(\mathbf{x}, z)$ descrita por la ecuación de propagación 4.2.1. Denominaremos condición inicial a $\phi(\mathbf{x}, z_0)$.

TEOREMA 4.3.2. (de conservación del pseudomomento angular). Sea $\phi(\mathbf{x}, z)$ una solución de 4.2.1 y supongamos que $\mathcal{G} \equiv \mathcal{O}(2)$, \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} . Supongamos que la condición inicial $\phi(\mathbf{x}, z_0)$ es tal que $\mathcal{G}' \equiv \mathcal{C}_n$ o \mathcal{C}_{nv} y que $\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}$. Entonces el pseudomomento angular m de la condición inicial se conserva a lo largo de la evolución con z .

DEMOSTRACIÓN. Para las soluciones estacionarias en las que la evolución con z es de la forma $e^{i\mu z}$, la demostración es trivial. Veamos que también se cumple en el caso de que la condición inicial $\phi_0 = \phi(\mathbf{x}, z_0 = 0)$ sea una solución no estacionaria con m definido, es decir, cuando ϕ_0 pertenezca a alguna representación irreducible (y por lo tanto sea de la forma $\tilde{\phi}(r, \theta, 0) = e^{im\theta} u(r, \theta, 0)$, con $m = \frac{-n}{2}, \dots, \frac{n}{2}$ si n par o $m = \frac{-n+1}{2}, \dots, \frac{n-1}{2}$ si n impar y $u(r, \theta + \epsilon, 0) = u(r, \theta, 0)$, $\epsilon = \frac{2\pi}{n}$). Para demostrarlo vamos a proceder por inducción.

Como sabemos el operador $L(\mathbf{x}, |\phi_0|^2) = L_0 + L_1$ es invariante frente a los elementos de rotación \mathcal{C}_ϑ del grupo \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} , ya que $V(\mathbf{x})$ lo es y $|\phi_0|^2$ también lo es. Por lo tanto, $\mathcal{C}_\vartheta L \mathcal{C}_\vartheta^{-1} = L$, donde $\vartheta = t \frac{2\pi}{n}$, $t \in \mathbb{Z}$.

Consideremos la evolución de $z_0 = 0$ a z como una sucesión de pasos infinitesimales de longitud h con $h \rightarrow 0$. En una ecuación de primer orden en la variable de evolución, la solución en z_j se transforma en $z_{j+1} = z_j + h$ según la ecuación $\phi_{j+1} = e^{i\bar{L}(\mathbf{x}, |\phi_j|^2)h} \phi_j$, donde $j \in \mathbb{N}$ es un índice tal que $z_j = z_0 + j * h$ y $\phi_j = \phi(\mathbf{x}, z_j)$.

Vamos a demostrar el teorema por inducción. Se cumple que $\mathcal{C}_\vartheta L(\mathbf{x}, |\phi_0|^2) \mathcal{C}_\vartheta^{-1} = L(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)$, por lo que $\mathcal{C}_\vartheta e^{iL(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)h} \mathcal{C}_\vartheta^{-1} = e^{iL(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)h}$, ya que con $h \rightarrow 0$, y haciendo el desarrollo de la exponencial, se obtiene que $\mathcal{C}_\vartheta \left(1 + iL(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)h\right) \mathcal{C}_\vartheta^{-1} = 1 + iL(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)h$. Por lo tanto, $\mathcal{C}_\vartheta \phi_1 = \mathcal{C}_\vartheta e^{iL(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)h} \phi_0 = e^{iL(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)h} \mathcal{C}_\vartheta \phi_0$ y teniendo en cuenta que $\mathcal{C}_\vartheta \phi_0 = e^{im\vartheta} \phi_0$, se obtiene $\mathcal{C}_\vartheta \phi_1 = e^{iL(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)h} e^{im\vartheta} \phi_0$. Consecuentemente $\mathcal{C}_\vartheta \phi_1 = e^{im\vartheta} \phi_1$, con lo que ϕ_1 es también una función con pseudomomento angular bien definido e igual al correspondiente a ϕ_0 .

Supongamos ahora que ϕ_j es una función con pseudomomento angular bien definido y que por tanto cumple que $\mathcal{C}_\vartheta \phi_j = e^{im\vartheta} \phi_j$. Por otra parte, $\mathcal{C}_\vartheta L(\mathbf{x}, |\phi_j|^2) \mathcal{C}_\vartheta^{-1} = L(\mathbf{x}, |\phi_j|^2)$. Como anteriormente, si usamos la ecuación de evolución discreta junto con estas dos ecuaciones se obtiene que $\mathcal{C}_\vartheta \phi_{j+1} = e^{im\vartheta} \phi_{j+1}$ y por lo tanto ϕ_{j+1} conserva el mismo pseudomomento angular que ϕ_j .

En el límite continuo, $h \rightarrow 0$, los anteriores resultados se preservan, demostrando así que si la condición inicial en $z = 0$ tiene pseudomomento angular bien definido, para $z > z_0 = 0$ la solución mantiene el mismo pseudomomento angular. Por lo tanto si $\tilde{\phi}(r, \theta, 0) = e^{im\theta} u_m(r, \theta, 0)$, con $u_m(r, \theta + \epsilon, 0) = u_m(r, \theta, 0)$ entonces la solución tiene la forma $\tilde{\phi}(r, \theta, z) = e^{im\theta} u_m(r, \theta, z)$, con $u_m(r, \theta + \epsilon, z) = u_m(r, \theta, z)$ para $z > 0$. \square

OBSERVACIÓN 4.3.3. Si aplicamos la definición de j_z a una función con pseudomomento angular definido como $\tilde{\phi}(r, \theta, z) = e^{im\theta} u_m(r, \theta, z)$, con $u_m(r, \theta + \epsilon, z) = u_m(r, \theta, z)$, y operamos, se obtiene:

$$j_z = m + \int_{\mathbb{R}^2} u_m^* \left(-i \frac{\partial}{\partial \theta} \right) u_m dr d\theta.$$

De esta condición se deduce que la conservación de m para estas soluciones aparece como balance de dos cantidades no conservadas: j_z , definida más arriba y j_z^m definida como $j_z^m = \int_{\mathbb{R}^2} u_m^* \left(-i \frac{\partial}{\partial \theta} \right) u_m dr d\theta$, ya que $m = j_z - \int_{\mathbb{R}^2} u_m^* \left(-i \frac{\partial}{\partial \theta} \right) u_m dr d\theta = j_z - j_z^m$.

NOTA 4.3.4. j_z^m es el momento angular asociado a la función $u_m(r, \theta, z)$, que es periódica en θ .

4.4. Reducción de la simetría de $V(\mathbf{x})$

4.4.1. Reglas de Paso. Vamos a analizar las soluciones de la ecuación de evolución 4.2.1 cuando la condición inicial es una función con momento angular l bien definido y $V(\mathbf{x})$ tiene una dependencia en z de la siguiente forma:

$$(4.4.1) \quad V(r, \theta, z) = \begin{cases} V(r) & \text{si } z < z_1 \\ V(r, \theta) / V(r, \theta) = V(r, \theta + \frac{2\pi}{n}) & \text{si } z \geq z_1 \end{cases} .$$

Es decir, hasta cierto z_1 el potencial lineal $V(r, \theta, z)$ es invariante bajo los elementos del grupo $\mathcal{O}(2)$ y a partir de z_1 es invariante bajo los elementos de un grupo de simetría rotacional discreta, \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} .

OBSERVACIÓN 4.4.1. Nótese que, si la condición inicial de la ecuación 4.2.1 es una función con momento angular l bien definido y V tiene la forma 4.4.1, a partir de z_1 la solución es una función con pseudomomento angular m bien definido. Como $\phi(\mathbf{x}, z < z_1)$ cumple que $|\phi(\mathbf{x}, z < z_1)|^2$ es invariante bajo $\mathcal{O}(2)$ se cumple que $\mathcal{R}\phi(\mathbf{x}, z < z_1) = e^{i\theta}\phi(\mathbf{x}, z < z_1)$, donde \mathcal{R} es el operador de rotaciones infinitesimales. Como además cualquier grupo de simetría rotacional discreta, \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} , es subgrupo de éste, se cumple que $\mathcal{C}_n^t\phi(\mathbf{x}, z < z_1) = e^{im\vartheta}\phi(\mathbf{x}, z < z_1)$ con $\vartheta = t\frac{2\pi}{n}$, $t \in \mathbb{Z}$ y donde \mathcal{C}_n^t es uno de los elementos de rotación de \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} . Razonando tal y como se hizo en la demostración del teorema de conservación del pseudomomento angular 4.3.2, se obtiene que en $z = z_1$, cuando la simetría de $V(\mathbf{x})$ se reduce, la solución es una función con pseudomomento angular bien definido, pues sigue transformándose correctamente bajo los elementos de los grupos de simetría rotacional discreta \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} . A partir $z > z_1$, según el teorema 4.3.2, el valor de m se conservará. Sin embargo, con este tipo de razonamientos no podemos predecir el valor de m a partir de l y el orden de la simetría discreta. Vamos a obtener una regla que relaciona el valor de l con el de m .

LEMA 4.4.2. *Supongamos que la condición inicial de la ecuación 4.2.1 es una función con momento angular l bien definido. Supongamos que V tiene la forma 4.4.1. Entonces, a partir de z_1 , el valor de m estará determinado por la ecuación:*

$$l - m = kn, \quad \text{con } k \in \mathbb{Z},$$

donde n es el orden del grupo de simetría rotacional discreto considerado.

DEMOSTRACIÓN. Sea $\phi_l(\mathbf{x}, z_0 = 0)$ una función con momento angular bien definido. Como éste se conserva se cumple que $\phi_l(\mathbf{x}, z)$, $z_0 \leq z \leq z_1$, tiene el mismo momento angular. Según la observación 4.4.1 se cumple que $\phi(\mathbf{x}, z_1) = \phi_m(\mathbf{x}, z_1)$, es decir, es una función con pseudomomento angular bien definido. Veamos que m no puede tomar cualquier valor. El coeficiente de proyección de ϕ_l sobre ϕ_m es $c_{ml} = \int_{\mathbb{R}^2} \phi_m^*(\mathbf{x}, z_1)\phi_l(\mathbf{x}, z_1^-)d^2\mathbf{x}$, donde $\phi_l(\mathbf{x}, z_1^-)$ es la función evaluada en z_1 . Sabemos que $\phi_m(r, \theta + \frac{2\pi}{n}, z_1) = e^{im\frac{2\pi}{n}}\phi_m(r, \theta, z_1)$ y que $\phi_l(r, \theta + \frac{2\pi}{n}, z_1^-) = e^{il\frac{2\pi}{n}}\phi_l(r, \theta, z_1^-)$. Luego si realizamos el cambio de variable $\theta \rightarrow \theta + \frac{2\pi}{n}$ en la definición de c_{ml} obtenemos la siguiente relación: $c_{ml} = e^{i(l-m)\frac{2\pi}{n}}c_{ml}$. Luego el coeficiente debe ser cero para todos los valores de m salvo para aquellos que cumplan que $l - m = kn$ con $k \in \mathbb{Z}$. \square

PROPOSICIÓN 4.4.3. *Supongamos que la condición inicial de la ecuación 4.2.1 es una función con momento angular l bien definido. Si $V(\mathbf{x})$ tiene la forma 4.4.1, se cumple que a partir de z_0 la solución es una función con pseudomomento angular m bien definido y el valor de m estará determinado por la ecuación:*

$$l - m = kn, \quad \text{con } k \in \mathbb{Z} \quad \text{con } |m| \leq \frac{n}{2} \text{ si } n \text{ es par y } |m| \leq \frac{n-1}{2} \text{ si } n \text{ es impar}$$

donde n es el orden del grupo de simetría rotacional discreto considerado.

DEMOSTRACIÓN. Basta con tener en cuenta el lema anterior, la observación 4.4.1 y el teorema de valor máximo del pseudomomento angular 2.2.22. \square

Estudiemos el caso en que $V(\mathbf{x})$ tiene una dependencia en z de la siguiente forma:

$$(4.4.2) \quad V(r, \theta, z) = \begin{cases} V(r, \theta) / V(r, \theta) = V(r, \theta + \frac{2\pi}{n}) & \text{si } z < z_1 \\ V(r, \theta) / V(r, \theta) = V(r, \theta + \frac{2\pi}{n'}) & \text{si } z \geq z_1 \end{cases} .$$

Con $\frac{n}{n'} \in \mathbb{Z}$. Es decir, hasta cierto z_0 el potencial lineal V es invariante bajo los elementos de los grupos \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} , y a partir de z_1 pasa a ser invariante bajo los elementos de cierto grupo de simetría discreta $\mathcal{C}_{n'}$ o $\mathcal{C}_{n'v}$, donde se cumple que $\mathcal{C}_{n'} \subset \mathcal{C}_n$ o $\mathcal{C}_{n'v} \subset \mathcal{C}_{nv}$.

Es fácil comprobar que en este caso se cumple un teorema análogo al anterior:

PROPOSICIÓN 4.4.4. *Supongamos que la condición inicial de la ecuación 4.2.1 es una función con pseudomomento angular m bien definido. Si V tiene la forma 4.4.2 se cumple que, a partir de z_1 , la solución es una función con pseudomomento angular m' bien definido y el valor de m' estará determinado por la ecuación:*

$$m - m' = kn'$$

con $k \in \mathbb{Z}$ y con $|m'| \leq \frac{n'}{2}$ si n' es par y $|m'| \leq \frac{n'-1}{2}$ si n' es impar donde n' es el orden del grupo de simetría rotacional discreto final.

DEMOSTRACIÓN. Basta con razonar como en el caso de 4.4.1, pero para una condición inicial con pseudomomento angular m bien definido. \square

OBSERVACIÓN 4.4.5. Podemos obtener una cota para k a partir de la regla de transformación presentada en 4.4.3. Escribamos $k = \frac{l-m}{n}$ y tomemos el módulo de esta expresión, $|k| = \frac{|l-m|}{n} \leq \frac{1}{n}(|l| + |m|)$. Utilizando el teorema 2.2.22 para la cota de m obtenemos, $|k| \leq \frac{1}{n}(l + \frac{n}{2})$, sea n par o impar. Por lo tanto, $|k| \leq \frac{1}{2}(2l + n)$. Podemos operar igualmente con la regla obtenida en 4.4.4. En este caso, $k = \frac{m-m'}{n'}$ y operando, $|k| = \frac{|m-m'|}{n'} \leq \frac{1}{n'}(|m| + |m'|)$. Utilizando, de nuevo, el teorema 2.2.22, $|k| \leq \frac{1}{n'}(\frac{n}{2} + \frac{n'}{2})$. Por lo tanto, $|k| \leq \frac{1}{2}(1 + \frac{n'}{n})$.

4.4.2. Transformaciones de vorticidad. Supongamos que para $z < z_1$ tenemos una solución simple estacionaria o no, con momento angular l bien definido en el medio homogéneo, y por lo tanto con vorticidad v bien definida (ya que en este caso $v = l$ según el lema 3.2.3). Teniendo en cuenta la condición presentada en 4.4.3, hay tres tipos de transformaciones de vorticidad para las soluciones estacionarias o no cuando $z > z_1$ entre $\mathcal{O}(2)$ y \mathcal{C}_n o \mathcal{C}_{nv} :

1. Si el valor de m que corresponde al valor inicial de l de acuerdo con la proposición 4.4.3 es tal que la solución se corresponde con una solución tipo solitón fundamental o nodal el fenómeno se llama *borrado de vorticidad*.
2. Si el valor de m que corresponde al valor inicial de l de acuerdo con la proposición 4.4.3 es tal que la solución se corresponde con una solución tipo vórtice el fenómeno se llama *transmutación de vorticidad*. Este caso además se subdivide en i) *reducción de vorticidad*, si l y m tienen el mismo signo e ii) *inversión de vorticidad* si tienen signo contrario.

3. Si $|l| < \frac{n}{2}$ con n par o impar, se cumple que $l = m$ y no se produce ninguna transformación de vorticidad.

Si $\phi(\mathbf{x}, z)$ cuando $z < z_1$ es una solución simple con pseudomomento angular m bien definido y el potencial lineal es como en 4.4.2, también se cumple que $v = m$ y la transformación de vorticidad que se produce se puede clasificar de acuerdo con alguno de los tres tipos de transformaciones introducidas en el párrafo anterior, teniendo en cuenta esta vez la condición introducida en la proposición 4.4.4.

NOTA 4.4.6. Como sabemos por 3.2.3, únicamente para las soluciones simples se cumple que $v = l$ o m . Por lo tanto, las transformaciones anteriores son transformaciones sobre la vorticidad únicamente si para longitudes de propagación suficientemente elevadas, la solución obtenida es una solución simple. En otro caso la transformación afecta únicamente al pseudomomento angular, sin que podamos afirmar nada sobre la vorticidad. Más adelante profundizaremos en la relación entre la vorticidad v y el pseudomomento angular m .

En la ref. [217] se estudió el caso en el que para $z < z_1$ la función era una solución simple tipo vórtice estacionaria del medio homogéneo que daba lugar, para algún $z > z_1$, a una solución simple estacionaria de tipo vórtice del medio con simetría discreta. Este proceso se conoce como *transmutación de vórtices*. En la ref. [217] se analizaron los casos en los que momento angular de entrada era $l = 3, 5, 7$ en una simetría \mathcal{C}_{4v} , dando lugar a vórtices estacionarios con pseudomomento angular $m = -1, 1, -1$ respectivamente, de acuerdo con la regla 4.4.3. En la ref. [222] se presentaron ejemplos de borrado e inversión de vorticidad cuando $F(|\psi(\mathbf{x})|^2) = 0$, en sistemas con interfases entre $\mathcal{O}(2)$ y medios con simetría rotacional discreta \mathcal{C}_{3v} , \mathcal{C}_{4v} , y \mathcal{C}_{5v} , cuando no se requiere que la solución para $z > z_1$ sea estacionaria. Finalmente, algunas de las transformaciones de vorticidad han sido recientemente observadas en experimentos en redes ópticamente inducidas [223].

Vamos a presentar ejemplos de inversión, borrado y reducción de vorticidad en distintas interfases en el caso no lineal con $F(|\psi(\mathbf{x})|^2) = \gamma |\psi(\mathbf{x})|^2$, $\gamma > 0$. Se ha simulado la ecuación de evolución 4.2.1 con un método de paso dividido (*split step*) [5]. Se omite la simulación para $z < z_1$, puesto que antes de la interfase, en un medio con simetría $\mathcal{O}(2)$ el momento angular se conserva y en un medio con simetría rotacional discreta \mathcal{C}_{nv} , el pseudomomento angular también se conserva, tal y como se demostró en 4.3.2. Por lo tanto, en cualquiera de los dos medios, antes de la interfase, la evolución sólo va a cambiar la forma de la solución, pero no su momento o pseudomomento angular. Podemos, por tanto, suponer que la evolución antes de z_1 es tal que da lugar a una función en z_1 con el momento o pseudomomento angular determinado y una forma funcional arbitraria. Utilizaremos esta función como condición inicial en $z_1 = 0$ y simularemos la ecuación para $z > z_1$.

El dominio transversal Ω es una caja de tamaño $[-\frac{D}{2}, \frac{D}{2} - \epsilon_x] \times [-\frac{D}{2}, \frac{D}{2} - \epsilon_y]$, y se ha tomado un mallado transversal con $x_r = -\frac{D}{2} + i_x \epsilon_x$, $i_x = 0, 1, \dots, N - 1$ y $\epsilon_x = \frac{D}{N}$ e $y_r = -\frac{D}{2} + i_y \epsilon_y$, $i_y = 0, 1, \dots, N - 1$ y $\epsilon_y = \epsilon_x$. El método de paso dividido utiliza condiciones periódicas en los límites del dominio y se han utilizado paredes absorbentes mediante un potencial imaginario puro que sólo es distinto de cero cerca de la frontera del dominio. Se ha simulado la evolución para $z_j = h_j$, con $j = 0, 1, \dots$ y $h = 10^{-3}$. A lo largo de la evolución se han calculado las siguientes variables:

1. La potencia $P(z) = \int |\psi(\mathbf{x}, z)|^2 d\mathbf{x}^2$.

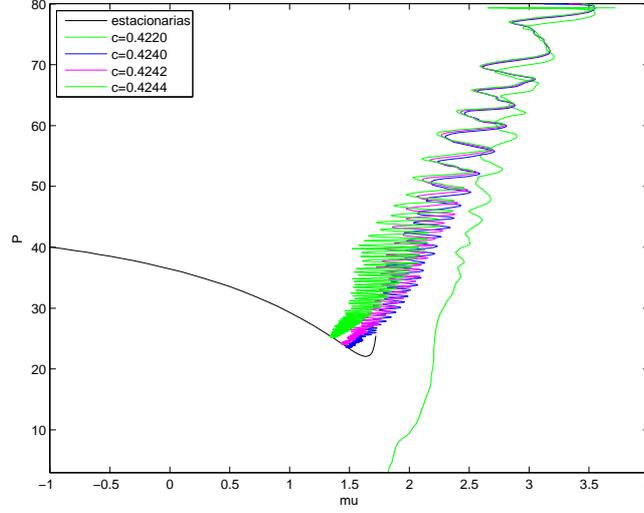


FIGURA 4.4.1. Evolución de $P(z)$ y $\langle \mu(z) \rangle$ con z en el plano $P - \langle \mu \rangle$ para soluciones con condiciones iniciales con $r_0 = 2, 1$, $l = +3$ y distintos valores de c . En color negro se representa $P = P(\mu)$ para soluciones estacionarias con $m = -1$.

2. El valor esperado de μ , $\langle \mu(z) \rangle = \frac{\int d\mathbf{x}^2 (\psi^*(\mathbf{x}, z) (-V(\mathbf{x}) + \nabla^2) \psi(\mathbf{x}, z) + \gamma |\psi(\mathbf{x}, z)|^4)}{P(z)}$.
3. El pseudomomento angular en cada \mathbf{x} , $m(r, \theta, z) = -\frac{in}{2\pi} \log \left(\frac{\psi(r, \theta + \frac{2\pi}{n}, z)}{\psi(r, \theta, z)} \right)$, donde n es el orden del medio con simetría discreta. Como m es una cantidad fija para campos con simetría discreta, $m(\mathbf{x}, z)$ debe ser el mismo $\forall \mathbf{x}$ y como es una cantidad conservada, debe ser constante $\forall z$.

Estas cantidades se han obtenido para cada z_j y cada \mathbf{x}_{i_x, i_y} , y las integraciones en \mathbf{x} se han realizado numéricamente.

4.4.2.1. *Inversión de vorticidad.* Supongamos que el sistema presenta simetría $\mathcal{O}(2)$ para $z < z_1$ y simetría discreta \mathcal{C}_{4v} para $z > z_1$. En particular, para $z > z_1$ el potencial es de la forma:

$$(4.4.3) \quad V(\mathbf{x}) = V_0 (\cos^2(x) + \cos^2(y)),$$

con $V_0 = 2$. La solución en z_0^- es:

$$(4.4.4) \quad \psi(\mathbf{x}, z_1^-) = cr^l e^{-\frac{x^2+y^2}{r_0^2}} e^{il\theta},$$

y presenta, por tanto, momento angular l . Si el momento angular inicial es $l = +3$, de acuerdo con la regla 4.4.3, $m = l - kn = 3 - 4 = -1$. En este caso, necesariamente k debe ser igual a 1, pues para cualquier otro valor, $|m| > \frac{n}{2}$, lo cual no está permitido por el teorema de pseudomomento angular máximo 2.2.22.

En la figura 4.4.1 se representa la evolución de $P(z)$ y $\langle \mu(z) \rangle$ en el plano $P - \langle \mu \rangle$ para distintos valores de la amplitud c de la condición inicial 4.4.4 y momento angular inicial $l = +3$. En todos los casos la potencia inicial es muy superior a la de las soluciones estacionarias. A lo largo de la evolución la solución va perdiendo

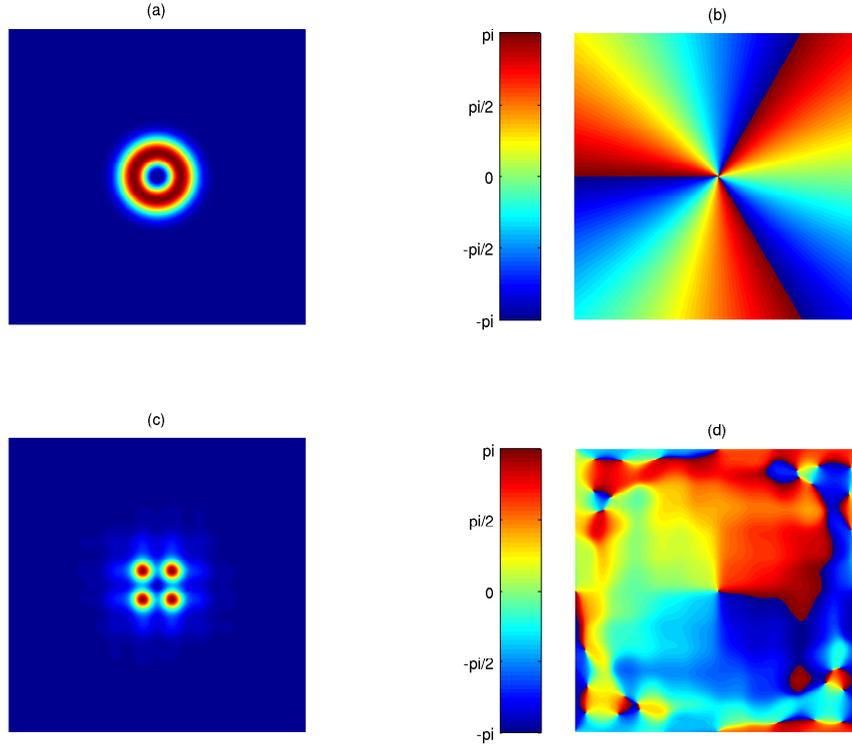


FIGURA 4.4.2. Amplitud (a) y fase (b) de la condición inicial con $l = +3$ y amplitud (c) y fase (d) de la solución para $z = 200$ cuando $c = 0,424$ y $r_0 = 2,1$.

potencia y la $\langle \mu \rangle$ oscila y se reduce. Algunas de las condiciones iniciales no dan lugar a soluciones estacionarias, bien porque difractan a una función nula, bien porque se inestabilizan por autoenfoque. En 4.4.1 se ha representado un ejemplo cuando $c = 0,422$ y $r_0 = 2,1$ en el que la solución difracta, pero se han omitido ejemplos de soluciones que se inestabilizan por autoenfoque. Sin embargo, para cierto rango de las constantes c y r_0 la solución tiende a una solución simple estacionaria cuando $z \rightarrow \infty$. En la figura 4.4.1 se representan algunos ejemplos. No se ha representado la evolución de m , puesto que se ha obtenido $m = -1, \forall z \geq 0$.

En la figura 4.4.2 se representan la condición inicial y la solución para $z = 200$. Como se observa la solución final tiene la fase correspondiente a un vórtice de pseudomomento angular $m = -1$. La vorticidad de la condición inicial es $v = l = +3$, mientras que la vorticidad de la solución para $z =$ es $v = m = -1$, con lo que se ha producido la inversión de vorticidad. Además se ha logrado para $z \rightarrow \infty$ un vórtice estacionario con μ definida.

4.4.2.2. Borrado de vorticidad. Supongamos que el sistema presenta simetría \mathcal{C}_{6v} para $z < z_1$ y simetría discreta \mathcal{C}_{2v} para $z > z_1$. En particular, para $z > z_1$ el potencial es de la forma presentada en la figura 3.2.1 (a) con $\omega = 8$, y $d = 4\pi$. La condición inicial es de la forma $\psi(\mathbf{x}, z = z_0^-) = c \sum_{j=0}^{n-1} \exp\left(\frac{(x-x_j)^2 + (y-y_j)^2}{2\omega_0^2}\right) \exp(ijm\theta)$

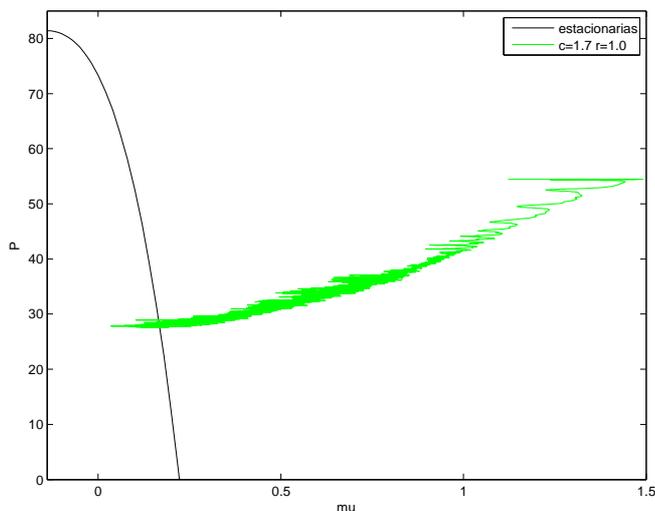


FIGURA 4.4.3. Evolución de $P(z)$ y $\langle \mu(z) \rangle$ con z en el plano $P - \langle \mu \rangle$ para una solución con condición inicial con pseudomomento angular $m = +2$. En color negro se representa $P = P(\mu)$ para soluciones estacionarias con $m' = 0$ en el potencial con simetría \mathcal{C}_{2v} .

donde $(x_j, y_j) = d(\cos \frac{2\pi j}{n}, \sin \frac{2\pi j}{n})$ con $n = 6$ y $d = 4\pi$, por lo que presenta simetría \mathcal{C}_{6v} . Por lo tanto se trata de una interfase $\mathcal{C}_{6v} - \mathcal{C}_{2v}$. El pseudomomento angular inicial es $m = +2$ y, de acuerdo con la regla 4.4.4, $m' = m - kn = 2 - 2 = 0$. Nuevamente, k debe ser igual a 1, pues para cualquier otro valor, $|m'| > \frac{n}{2}$, lo cual no está permitido por el teorema de pseudomomento angular máximo 2.2.22. Por lo tanto, este será un caso de borrado de vorticidad.

En la figura 4.4.3 se representa la evolución de $P(z)$ y $\langle \mu(z) \rangle$ con z en el plano $P - \langle \mu \rangle$ cuando la condición inicial presenta $c = 1,7$, $\omega = 1$ y pseudomomento angular inicial $m = +2$. La solución tiende a la estacionaria, pero cuando z es elevado la simetría se pierde y la solución se inestabiliza, observándose, además, que la evolución de $P(z)$ y $\langle \mu(z) \rangle$ con z corta la curva de soluciones estacionarias.

En la figura 4.4.4 se representan (a) la amplitud y (b) la fase de la condición inicial y (c) la amplitud y (d) la fase de la solución para $z = 650$. Se ha calculado el pseudomomento de la solución final para comprobar que la fase es la correspondiente a un solitón fundamental en \mathcal{C}_{2v} ($m = 0$). La vorticidad de la condición inicial es $v = m = 2$, mientras que la solución para $z = 650$ no es una solución tipo vórtice ya que $m' = 0$. Las soluciones con $m' = 0$ son soluciones tipo solitón fundamental, con lo que se ha producido un borrado de vorticidad. Para $z > 900$ la solución se desestabiliza y la simetría se pierde. Esta desestabilización se ha observado en todos los casos simulados.

4.4.2.3. Reducción de vorticidad. A diferencia que en la inversión de vorticidad, en este caso, la vorticidad v para $z < z_1$ y la vorticidad final v' coinciden en signo, aunque $v' < v$. En este caso no vamos a presentar ejemplos numéricos porque las soluciones se inestabilizaban por autoenfoco. Veamos algunos razonamientos que justifican por qué se complican estas simulaciones.

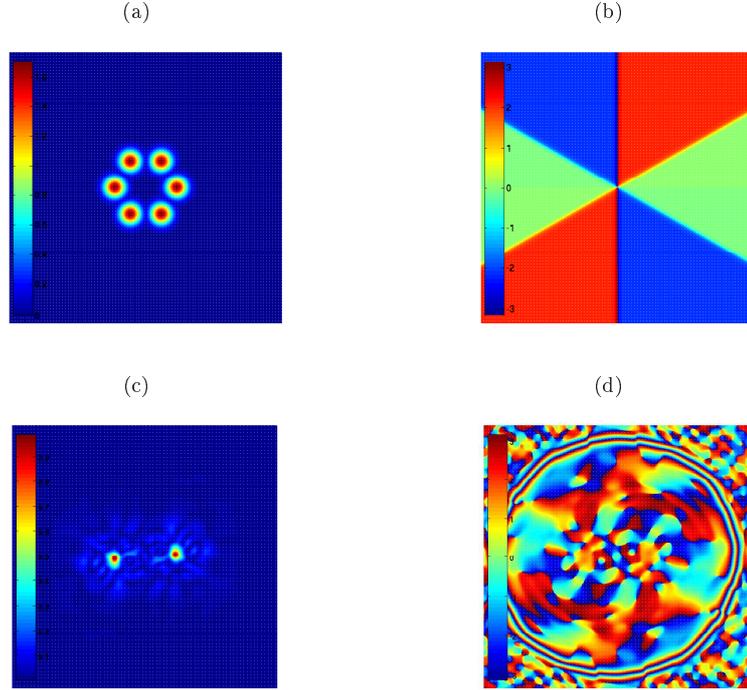


FIGURA 4.4.4. Amplitud (a) y fase (b) de la condición inicial con $m = +2$ y amplitud (c) y fase (d) de la solución con $m' = 0$ para $z = 650$ cuando $c = 1,7$ y $\omega_0 = 1$.

Por un lado, en el caso $\mathcal{O}(2) - \mathcal{C}_{nv}$ necesitaríamos que el momento angular l de entrada cumpliera que $|l| > n$. Si el medio es \mathcal{C}_{3v} (que es el grupo discreto de menor orden para el que se forman vórtices) para $z > z_1$, el momento angular debe ser al menos $l = +4$ (o bien, como máximo, $l = -4$) y el pseudomomento angular sería $m = +1$ (o bien $m = -1$). Se ha observado en las simulaciones numéricas que condiciones iniciales con estos momentos tan elevados tienden a inestabilizarse por colapso antes de formar el nuevo solitón. En la ref. [217] se utilizaron dos medios diferentes, con γ distintas a ambos lados de z_1 , para evitar este efecto.

Por otro, se puede pensar que la utilización de dos medios con simetría discreta, es decir, una interfase $\mathcal{C}_{nv} - \mathcal{C}_{n'v}$ como la descrita en 4.4.2 puede permitir observar esta transformación. Vamos a obtener condiciones sobre el valor mínimo del orden de simetría n para $z > z_1$, dado el orden de simetría n' para $z > z_1$ para obtener esta reducción de vorticidad.

Por un lado se cumple que $|m| \leq \frac{n}{2}$ por el teorema 2.2.22. Por otro lado, la condición para que haya reducción de la vorticidad es que $|m| > n'$, para obtener un m' del mismo signo que m (téngase en cuenta la regla 4.4.4). En consecuencia, $n' < |m| \leq \frac{n}{2}$. Además, se cumple que $\frac{n}{n'} \in \mathbb{Z}$, tal y como se impone en la forma de $V(\mathbf{x}, z)$ descrita por 4.4.2. Sea $p = \frac{n}{n'}$. Entonces $n' < |m| \leq \frac{pn'}{2}$ con lo que $p \geq 2$ o bien $n > 3n'$. Por lo tanto, si $n' = 3$, al menos necesitamos utilizar un medio

con orden de simetría $n = 9$, y partir de un pseudomomento $m = 4$. En este caso tampoco se han podido observar esta transformación en las simulaciones numéricas.

4.5. Relación entre vorticidad y momento o pseudomomento angular

Como sabemos, una solución simple definida en 3.2.1 con pseudomomento m no presenta singularidades situadas fuera del eje de simetría rotacional \mathbf{x}_s , al contrario que una solución compuesta o *cluster*, definida en 3.4.1. Las soluciones no estacionarias, dado que el momento o el pseudomomento angular se conserva durante la evolución, también pueden ser clasificadas en simples o compuestas. Sin embargo, a lo largo de la propagación el número de singularidades puede cambiar, y por tanto su carácter de solución simple o compuesta. Como vimos, para las soluciones simples pudimos obtener una relación entre el pseudomomento y la vorticidad (lema 3.2.3), lo cual nos permitió extender el teorema de valor máximo de aquel, a una proposición sobre el valor máximo de la vorticidad (proposición 3.2.5). Vamos a estudiar el pseudomomento y la vorticidad en el caso de soluciones compuestas, con el fin de obtener una relación entre ambos. Veamos, en primer lugar, que si para cierto z la solución presenta pseudomomento angular bien definido, debe cumplir con el siguiente lema:

LEMA 4.5.1. *Si el sistema presenta simetría rotacional discreta, a lo largo de la evolución con z las posiciones de las singularidades siempre están relacionadas a través de las condiciones de simetría.*

DEMOSTRACIÓN. Basta con tener en cuenta el teorema de conservación de pseudomomento angular 4.3.2 y la proposición 3.4.8. \square

NOTA 4.5.2. Este resultado se puede extender a las líneas nodales si tenemos en cuenta que podemos aplicar la proposición 3.4.8 a todos los puntos de la línea nodal, los cuales son puntos singulares.

Como hemos visto, cuando en la ecuación 4.2.1 el potencial lineal V tiene la forma 4.4.1 o 4.4.2 y la condición inicial es una función con momento o pseudomomento angular bien definido, se produce una transformación en la función que, como veremos, puede afectar al número de singularidades o líneas nodales de la solución y al valor de las vorticidades v_j asociado a cada singularidad individual. Hasta el momento sólo hemos obtenido la regla de paso que relaciona el momento o pseudomomento angular l o m de entrada con el pseudomomento angular de salida m o m' , y lo hemos aplicado al caso particular en el que podemos obtener para un valor de $z > z_1$ suficientemente grande una solución simple. En las simulaciones numéricas presentadas en el apartado anterior y en las que presentaremos a continuación, se ha observado que en $z = z_1$ se produce una solución compuesta o *cluster*. Es decir, cuando se producen inversiones, reducciones o borrados de vorticidad, en $z = z_1$ se observa la aparición de singularidades, que a lo largo de la propagación se mueven hacia la frontera del dominio y cuyas trayectorias se encuentran relacionadas a través del anterior lema. Cuando se calcula la vorticidad a lo largo de circuitos que encierren a todas estas singularidades o que no las contengan en su interior, se obtienen distintos resultados. Vamos a ofrecer sin demostración el siguiente resultado:

PROPOSICIÓN 4.5.3. *Supongamos que $\mathcal{G}' \equiv \mathcal{C}_n$ o \mathcal{C}_{nv} . Sea $\phi(\mathbf{x}, z)$ una solución con pseudomomento $m < \frac{n}{2}$. Supongamos que en un z determinado presenta K*

anillos de singularidades de carga v_k . Entonces la vorticidad calculada en circuitos ζ que encierran todas las singularidades es:

$$v = m + \sum_{k=1}^K n v_k.$$

Si $m = \frac{n}{2}$ cuando n es par, la vorticidad será $v = \sum_{k=1}^K n v_k$.

Aunque no vamos a demostrar el resultado, podemos ofrecer algunos razonamientos que lo sostienen. En primer lugar, por la proposición 2.5.2 sabemos que en el origen hay una singularidad de carga $m < \frac{n}{2}$ (evidentemente, si $m = 0$ no hay singularidad). Además, por la proposición 3.4.8 si el eje de simetría pasa por \mathbf{x}_s y hay un vórtice de carga v_i situado en $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}_s$, entonces hay $n - 1$ vórtices más con la misma carga. Por lo tanto podemos descomponer el circuito cerrado η en $Kn + 1$ circuitos cerrados, donde Kn de ellos encierran cada una de las n singularidades de los K anillos y el último circuito encierra la singularidad central. La integral de línea en cada uno de los Kn circuitos ofrecerá como resultado v_k mientras que la última integral será m , con lo que se deduce que $v = m + \sum_{k=1}^K n v_k$.

NOTA 4.5.4. Se puede extender fácilmente al caso de soluciones nodales ($m = \frac{n}{2}$, n par), teniendo en cuenta que la integral en torno al eje de simetría es $v_{\mathbf{x}_s} = 0$, (véase la proposición 2.6.6) y por tanto, para este caso, el resultado es $v = \sum_{k=1}^K n v_k$.

COROLARIO 4.5.5. Si, bajo las condiciones de la proposición anterior, se calcula la vorticidad en un circuito ζ que incluye sólo $K' < K$ anillos de vórtices, la vorticidad será

$$v' = m + \sum_{k=1}^{K'} n v_k,$$

si $m \neq \frac{n}{2}$ y $v' = \sum_{k=1}^{K'} n v_k$ si $m = \frac{n}{2}$.

Los *clusters* estacionarios presentados en el capítulo 3 cumplen con esta regla. Los *clusters* tipo 1 y 2 presentaban una vorticidad calculada a lo largo de la frontera del dominio de cálculo $v = 3$. Estos *clusters* de $m = -1$ presentaban un anillo de vórtices de carga $v_1 = +1$ en un sistema con simetría rotacional de orden $n = 4$. Luego, según la proposición 4.5.3, $v = -1 + 4(+1) = 3$. Por otra parte la vorticidad calculada a lo largo de la frontera en los *clusters* tipo 3 y 4 era $v = -1$. En este caso los *clusters* de carga $m = -1$ presentaban dos anillos de vórtices, unos de carga $v_1 = -1$ y otros de carga $v = 1$. Luego, según la proposición 4.5.3, $v = -1 + 4(+1) + 4(-1) = -1$.

Veamos algunos ejemplos de soluciones no estacionarias en las que se cumple la proposición 4.5.3, a lo largo de la evolución. Para ello vamos a analizar algunas transformaciones de vorticidad.

En la fig. 4.5.1 se presenta la evolución de un campo con momento angular $l = +4$ en z_1^- cuando el sistema presenta simetría rotacional discreta de orden $n = 5$ a partir de $z_1 = 0$. Se representa la fase y el dual del gradiente de la fase del campo. Obsérvese que el dual del gradiente de la fase de la solución es un campo vectorial cuyos vectores señalan hacia las singularidades de carga positiva y son flechas salientes de las singularidades de carga negativa. Además se ha representado

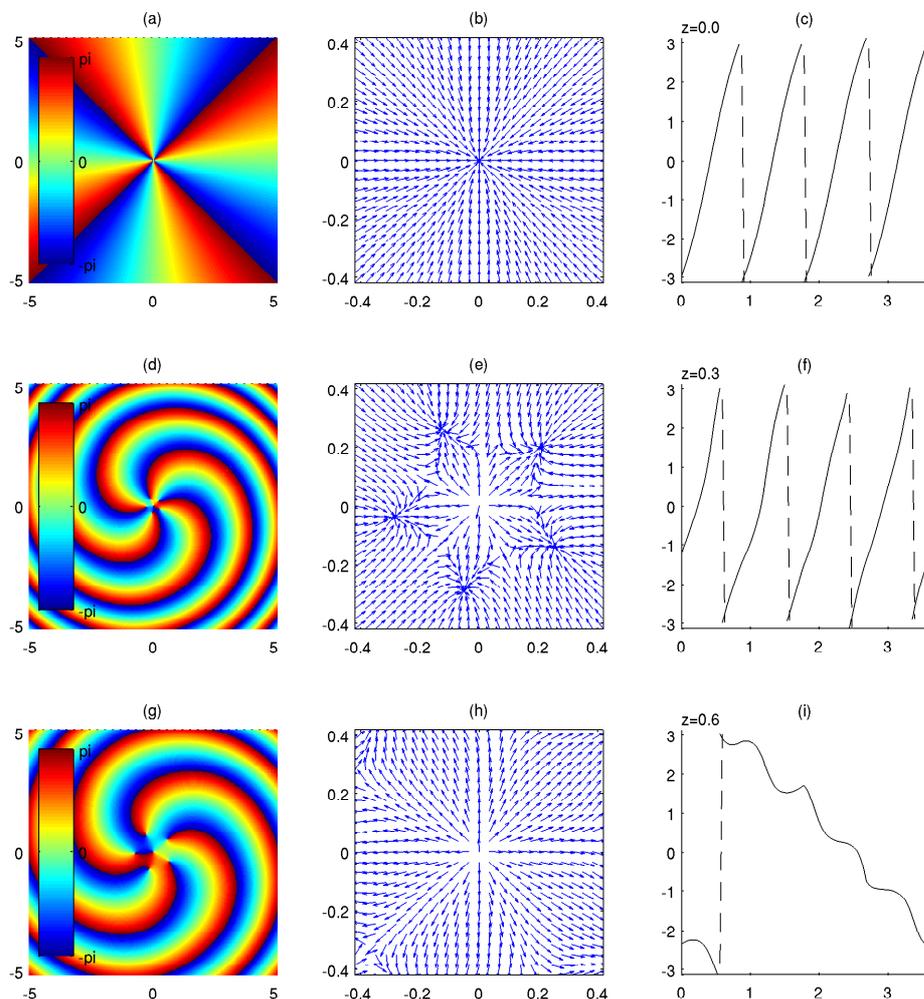


FIGURA 4.5.1. Simulación de una interfase $\mathcal{O}(2)\text{-}\mathcal{C}_{5v}$ cuando la condición inicial tiene momento angular $l = +4$. En (a), (d) y (g) se representa la fase de la solución para $z = 0, 0,3$ y $0,6$ respectivamente. En (b), (e) y (h) se representa al dual del gradiente de la fase en cada nodo del mallado numérico en los mismos z . En (c), (f) e (i) se representa la fase a lo largo de un circuito ζ que rodea el dominio $\Omega_\zeta = [-0,42, 0,42] \times [-0,42, 0,42]$.

la fase a lo largo de un circuito ζ que sigue la frontera del dominio cuadrado $\Omega_\zeta = [-0,42, 0,42] \times [-0,42, 0,42]$. Este circuito ζ , por tanto, encierra al eje de simetría. En las figuras 4.5.1 (a), (b) y (c) se representa el campo en z_1^- , es decir, antes de evolucionar. En este caso la vorticidad es $v = +4$, y en el centro hay una carga de valor $v_{x_s} = +4$. No está en contradicción con ninguno de los resultados anteriores pues aún no se ha entrado en el sistema con simetría rotacional de orden $n = 5$. En las figuras 4.5.1 (d), (e) y (f) se representa el campo en $z = 0,3$. Tal y como

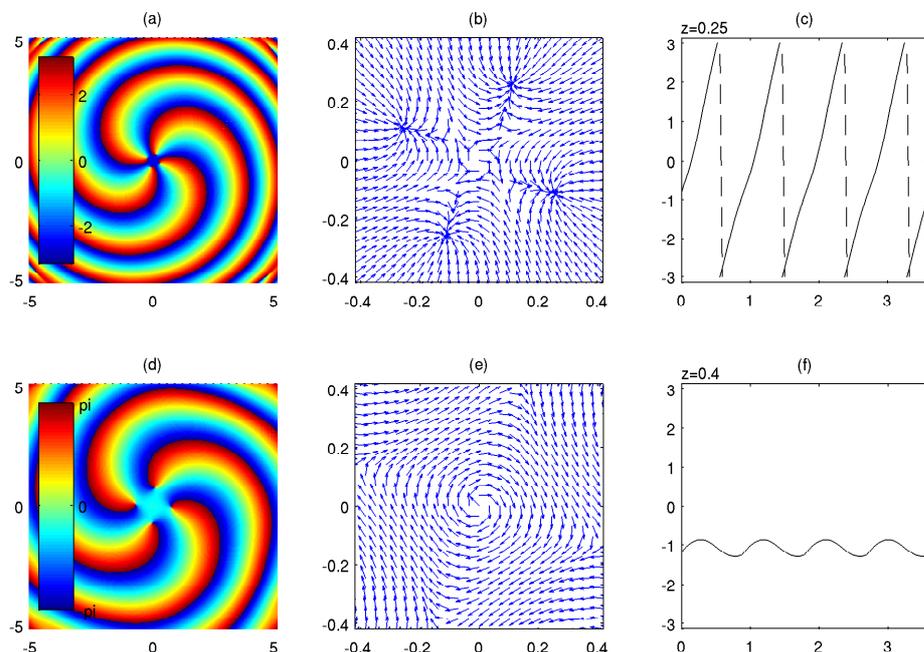


FIGURA 4.5.2. Simulación de una interfase $\mathcal{O}(2)\text{-}\mathcal{C}_{4v}$ cuando la condición inicial tiene momento angular $l = +4$. En (a) y (d) se representa la fase de la solución para $z = 0,25$ y $0,4$ respectivamente. En (b) y (e) se representa al dual del gradiente de la fase en cada nodo del mallado numérico en los mismos z . En (c) y (f) se representa la fase a lo largo de un circuito ζ que rodea el cuadrado $\Omega_\zeta = [-0,42, 0,42] \times [-0,42, 0,42]$.

se aprecia en el centro hay un antivórtice de carga $m = -1$, en consonancia con la regla 4.4.3 ($m = l - kn = 4 - 5 = -1$, con $k = 1$) y el corolario 2.6.5. Además, aparece un anillo de 5 vórtices de carga $v_1 = +1$. La vorticidad calculada en el circuito representado (f) es $v = +4$, de acuerdo con 4.5.3 ya que $v = -1 + 5 = +4$. En 4.5.1 (g), (h) e (i) se representa el campo en $z = 0,6$. Se observa que en el centro permanece el vórtice de carga $m = -1$. Sin embargo, el anillo de 5 vórtices de carga $v_1 = +1$ se ha alejado lo suficiente como para salir de la región encerrada por ζ . Ahora, la vorticidad calculada en este circuito es $v = -1$, de acuerdo con 4.5.3, $v = m = -1$, ya que no hay anillos de vórtices dentro del circuito. Nótese que este es un caso de inversión de vorticidad.

En la figura 4.5.2 se presenta la evolución de un campo con momento angular $l = +4$ en z_1^- cuando el sistema pasa a presentar simetría rotacional discreta de orden $n = 4$ a partir de $z_1 = 0$. Se representa, de nuevo, la fase, el dual del gradiente de la fase del campo y la fase a lo largo de un circuito ζ descrito anteriormente y que encierra al eje de simetría. La condición inicial es la misma que en las figuras 4.5.1 (a), (b) y (c). En las figuras 4.5.2 (a), (b) y (c) se representa el campo en $z = 0,25$. Ahora no hay ningún vórtice en el centro, tal y como predicen la regla

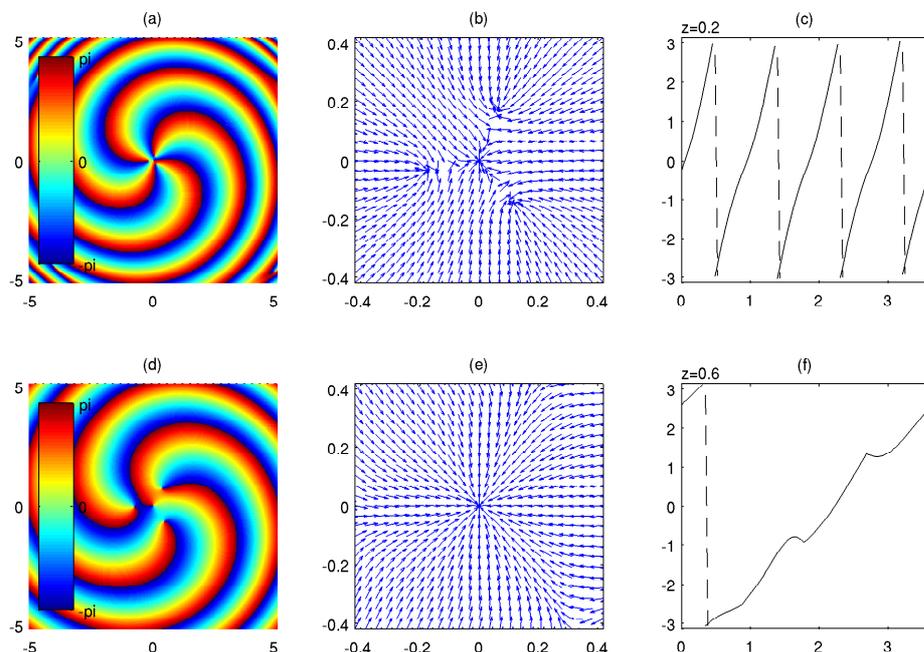


FIGURA 4.5.3. Simulación de una interfase $\mathcal{O}(2)\text{-}\mathcal{C}_{3v}$ cuando la condición inicial tiene momento angular $l = +4$. En (a) y (d) se representa la fase de la solución para $z = 0,2$ y $0,6$ respectivamente. En (b) y (e) se representa al dual del gradiente de la fase en cada nodo del mallado numérico en los mismos z . En (c) y (f) se representa la fase a lo largo de un circuito ζ que rodea el cuadrado $\Omega_\zeta = [-0,42, 0,42] \times [-0,42, 0,42]$.

4.4.3 ($m = l - kn = 4 - 4 = 0$, con $k = 1$) y el corolario 2.6.10. Además, aparece un anillo de 4 vórtices de carga $v_1 = +1$. La vorticidad calculada en el circuito representado (c) es $v = +4$, de acuerdo con 4.5.3 ya que $v = 0 + 4 = +4$. En 4.5.2 (d), (e) y (f) se representa el campo en $z = 0,4$. Se observa que el anillo de 4 vórtices de carga $v_1 = +1$ ha salido de la región encerrada por ζ . Ahora, la vorticidad calculada en este circuito es nula, de acuerdo con 4.5.3 según la cual $v = m = 0$, produciéndose un borrado de vorticidad.

En la figura 4.5.3 se presenta la evolución de un campo con momento angular $l = +4$ en z_1^- cuando el sistema pasa a presentar simetría rotacional discreta de orden $n = 3$ a partir de $z_1 = 0$. Se representan las mismas cantidades que en los casos anteriores y la condición inicial es la misma que en las figuras 4.5.1 (a), (b) y (c). En las figuras 4.5.3 (a), (b) y (c) se representa el campo en $z = 0,2$, donde se observa que en el eje de simetría hay un vórtice de carga $v_0 = m = +1$, tal y como predicen 4.4.3 ($m = l - kn = 4 - 3 = +1$, con $k = 1$) y el corolario 2.6.5. Adicionalmente se observa un anillo de 3 vórtices de carga $v_1 = +1$. La vorticidad calculada en el circuito representado (c) es $v = +4$, de acuerdo con 4.5.3 ya que $v = 1 + 3 = +4$. En las figuras 4.5.3 (d), (e) y (f) se representa el campo en

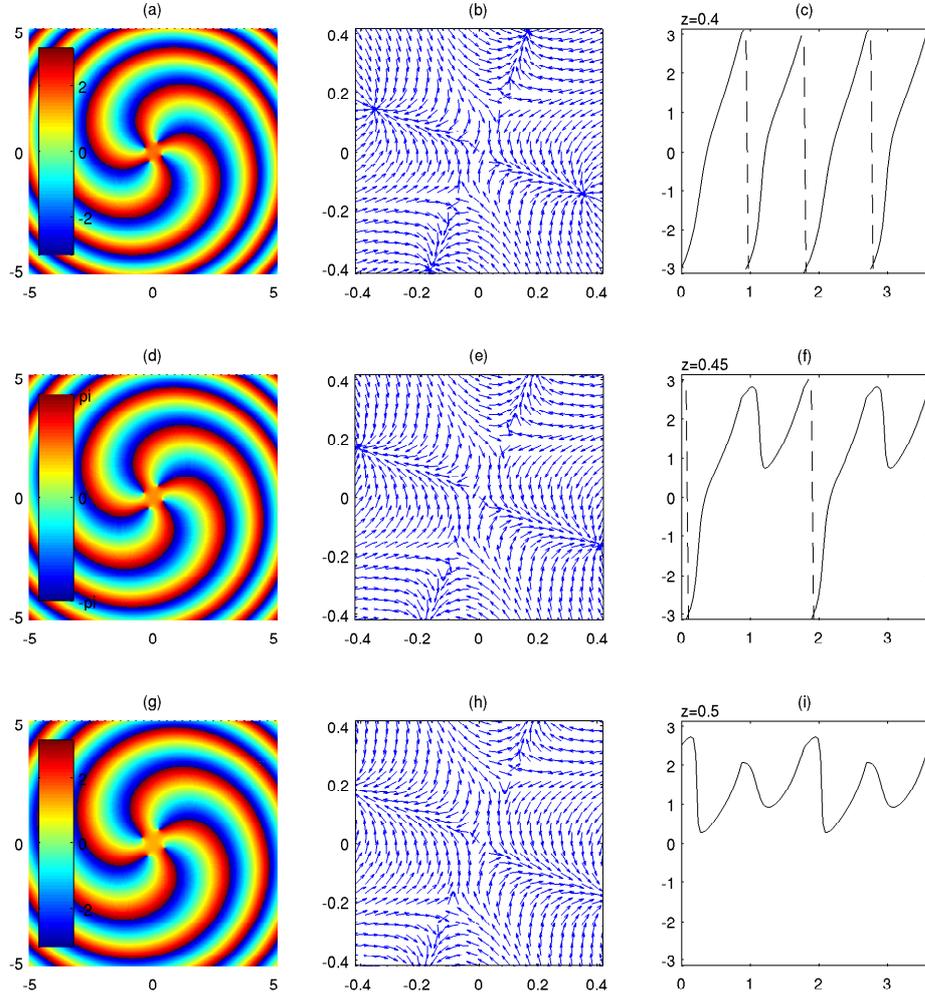


FIGURA 4.5.4. Simulación de una interfase $\mathcal{O}(2)\text{-}\mathcal{C}_{2v}$ cuando la condición inicial tiene momento angular $l = +4$. En (a), (d) y (g) se representa la fase de la solución para $z = 0,4$, $0,45$ y $0,5$, respectivamente. En (b), (e) y (h) se representa al dual del gradiente de la fase en cada nodo del mallado numérico en los mismos z . En (c), (f) e (i) se representa la fase a lo largo de un circuito ζ que rodea el cuadrado $\Omega_\zeta = [-0,42, 0,42] \times [-0,42, 0,42]$.

$z = 0,6$, cuando el anillo de 3 vórtices de carga $v_1 = +1$ ya ha salido de la región encerrada por ζ . Ahora, la vorticidad calculada en este circuito es, de acuerdo con la proposición 4.5.3, $v = m = +1$, produciéndose una reducción de vorticidad.

En la figura 4.5.4 se presenta la evolución de un campo con momento angular $l = +4$ en z_1^- cuando el sistema pasa a presentar simetría rotacional discreta de orden $n = 2$ a partir de $z_1 = 0$. En las figuras 4.5.4 (a), (b) y (c) se representa el campo en $z = 0,4$, donde se observa que en el eje de simetría no hay ninguna vórtice,

tal y como predice la regla de transmutación 4.4.3 ($m = l - kn = 4 - 2 = +2$, con $k = 1$) y el corolario 2.6.6. Por otra parte, se observan dos anillos de 2 vórtices de carga $v_1 = +1$. Estas dos parejas se encuentran situadas a distancias ligeramente diferentes, en concordancia con 3.4.8 y la simetría \mathcal{C}_{2v} . La vorticidad calculada en el circuito representado (c) es $v = +4$, de acuerdo con 4.5.3 ya que $v = 0 + 2 + 2 = +4$. En las figuras 4.5.4 (d), (e) y (f) se representa el campo en $z = 0,45$, cuando el primer anillo de 2 vórtices de carga $v_1 = +1$ ya ha salido de la región encerrada por ζ . Ahora, la vorticidad calculada en este circuito es $v = 0 + 2 = +2$. Finalmente, en las figuras 4.5.4 (g), (h) y (i) se representa el campo en $z = 0,5$, cuando ambos anillos de vórtices ya han salido de la región encerrada por ζ , siendo por tanto la vorticidad calculada a lo largo de ζ nula. De nuevo se ha producido un borrado de vorticidad.

Parte 2

Solitones espaciales e invariancia traslacional discreta

Teoría matemática del pseudomomento lineal y dinámica de soluciones no lineales con invariancia traslacional

5.1. Introducción

En el presente capítulo vamos a extender los resultados obtenidos en los capítulos 2, 3 y 4 a sistemas invariantes bajo un grupo de traslaciones discretas. En los sistemas que vamos a estudiar, el potencial, $V(\mathbf{x})$, puede ser invariante bajo los elementos de un grupo de traslaciones discretas, $\mathcal{P}_{\mathbf{R}}$ (véase apéndice C). Los potenciales periódicos presentados en las figuras 3.2.1 (c) y (d) son de este tipo. Pero además la amplitud de las soluciones dinámicas, $|\phi|^2$, o estacionarias, $|\psi|^2$, es también invariante bajo los elementos del mismo grupo. Esta es la diferencia con los sistemas estudiados hasta este punto, donde la amplitud sólo mostraba invariancia rotacional. De hecho, como veremos, los resultados que presentamos son igualmente válidos si $V(\mathbf{x})$ caracteriza un medio homogéneo, es decir, es invariante bajo los elementos del grupo $E(\mathbb{R}^2)$, pero la amplitud de las soluciones es invariante bajo los elementos de un grupo de traslaciones discretas, $\mathcal{P}_{\mathbf{R}}$.

En el segundo apartado obtendremos que las soluciones estacionarias en sistemas periódicos también se pueden clasificar en función del pseudomomento lineal, que en este caso tiene dos componentes. Para ello aplicaremos elementos de la teoría de las funciones de Bloch al caso no lineal. Obtendremos de nuevo que hay cotas sobre los posibles valores del pseudomomento lineal y que las soluciones se organizan según una estructura de bandas. Asimismo se calculan numéricamente algunos ejemplos con distintos pseudomomentos lineales en el caso de redes cuadradas. En el tercer apartado se estudia la dinámica de este tipo de soluciones. En primer lugar se demuestra que el pseudomomento lineal se conserva con la evolución y a continuación se realiza un estudio de estabilidad numérica de las soluciones estacionarias presentadas en el segundo apartado.

NOTACIÓN 5.1.1. Como en los capítulos anteriores, denotaremos por $\phi(\mathbf{x}, z)$ a las soluciones dinámicas de 4.2.1 y por $\psi(\mathbf{x})$ a las soluciones de la ecuación 2.2.1 para las que se cumple que ϕ es $\phi(\mathbf{x}, z) = e^{i\mu z}\psi(\mathbf{x})$. Asimismo, denotaremos por \mathcal{G} al grupo de simetría de $V(\mathbf{x})$ y por \mathcal{G}' al grupo de simetría de $|\phi|^2$ o de $|\psi|^2$.

5.2. Soluciones estacionarias con simetría traslacional discreta

Sea $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^2$ de la forma $\mathbf{R}_i = i_1 \mathbf{a}_1 + i_2 \mathbf{a}_2$, con \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 los vectores primitivos de una red de Bravais y $i_1, i_2 \in \mathbb{Z}$ (para una definición de red de Bravais, véase apéndice C). Supongamos que el grupo de simetría \mathcal{G} de $V(\mathbf{x})$ es isomorfo a $E(\mathbb{R}^2)$ o $\mathcal{P}_{\mathbf{R}}$, donde $\mathcal{P}_{\mathbf{R}}$ representa el grupo de traslaciones discretas en el plano de distancia \mathbf{R} . En el presente capítulo nos vamos a ocupar únicamente de soluciones

autoconsistentes que sean invariantes traslacionales, es decir, vamos a estudiar soluciones que cumplen que el grupo de simetría \mathcal{G}' de $|\psi|^2$ es isomorfo a un grupo con simetría traslacional $\mathcal{P}_{\mathbf{R}'}$, siendo $\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}$. Por lo tanto, a lo largo del presente capítulo denominaremos *soluciones autoconsistentes traslacionalmente simétricas* a las soluciones con este tipo de simetría.

NOTACIÓN 5.2.1. Supongamos que $\mathbf{x} \in \Omega$, donde Ω es un dominio finito de dimensiones $D_1 \times D_2$ con $D_1, D_2 \in \mathbb{R}^+$, es decir, $\Omega = \{\mathbf{x}/x \in]\frac{-D_1}{2}, \frac{D_1}{2}[\text{ e } y \in]\frac{-D_2}{2}, \frac{D_2}{2}[\}$. Denominaremos *dominio básico* a esta región. En principio, nada impide que $\Omega \equiv \mathbb{R}^2$. Supondremos que la función ψ cumple condiciones periódicas en la frontera de este dominio, es decir, $\psi(\frac{-D_1}{2}, \mathbf{y}) = \psi(\frac{D_1}{2}, \mathbf{y})$ y $\psi(\mathbf{x}, \frac{-D_2}{2}) = \psi(\mathbf{x}, \frac{D_2}{2})$.

Aunque los resultados que se van a presentar a continuación se pueden obtener también desde el punto de vista de la teoría de grupos, en el caso de simetría traslacional resulta más fácil razonar directamente con las herramientas de la teoría de las funciones de Bloch (véase apéndice 3). Además los resultados son igualmente válidos para el caso en que la función $F(|\psi|^2)$ fuera idénticamente nula, es decir, el caso lineal.

Vamos a demostrar en primer lugar que las soluciones de este tipo de operador tienen la forma de funciones de Bloch no lineales.

TEOREMA 5.2.2. (*Teorema no lineal de Bloch*). *Sea un operador $L(\mathbf{x}, |\psi|^2)$ tal y como se define en la ecuación 2.2.1, con $V(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i) = V(\mathbf{x})$ donde \mathbf{R}_i es un vector de la red de Bravais. Entonces las soluciones autoconsistentes traslacionalmente simétricas ψ tienen la forma:*

$$\psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}),$$

donde $u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i)$ y $\mathbf{p} = (p_1, p_2) \in \mathbb{Z}^2$ (si $\Omega \subset \mathbb{R}^2$).

DEMOSTRACIÓN. Sea $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}$ el operador de traslación¹, definido de modo que se cumpla que $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i)$, donde los $\mathbf{R}_i = i_1 \mathbf{a}_1 + i_2 \mathbf{a}_2$ con $i_1, i_2 \in \mathbb{Z}$, provienen de una red de Bravais de vectores primitivos \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 . El operador $L(\mathbf{x}, |\psi(\mathbf{x})|^2)$ es invariante bajo esta transformación, puesto que $L(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i, |\psi(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i)|^2) = L(\mathbf{x}, |\psi(\mathbf{x})|^2)$ y tanto el operador Laplaciano Δ como $V(\mathbf{x})$ y $F(|\psi|^2)$ lo son. Aplicando lo anterior a la ecuación de autovalores 2.2.1 se obtiene:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} L(\mathbf{x}, |\psi(\mathbf{x})|^2) \psi(\mathbf{x}) &= L(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i, |\psi(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i)|^2) \psi(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i) = \\ &= L(\mathbf{x}, |\psi(\mathbf{x})|^2) \psi(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i) = L(\mathbf{x}, |\psi(\mathbf{x})|^2) \mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} \psi(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Como la anterior expresión es válida para cualquier ψ (simétrica) necesariamente se cumple que:

$$\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} L(\mathbf{x}, |\psi(\mathbf{x})|^2) = L(\mathbf{x}, |\psi(\mathbf{x})|^2) \mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}.$$

Además el efecto de aplicar dos traslaciones distintas \mathbf{R}_i y $\mathbf{R}_{i'}$, no depende del orden en que se realice la operación. Efectivamente, $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} \mathcal{P}_{\mathbf{R}_{i'}} \psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i + \mathbf{R}_{i'}) = \mathcal{P}_{\mathbf{R}_{i'}} \mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} \psi(\mathbf{x})$. Por lo tanto, $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} \mathcal{P}_{\mathbf{R}_{i'}} = \mathcal{P}_{\mathbf{R}_{i'} + \mathbf{R}_i}$. Como cualquier $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}$ conmuta con el operador $L(\mathbf{x}, |\psi(\mathbf{x})|^2)$ y los distintos operadores $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}$ conmutan

¹Nótese que denominamos $\mathcal{P}_{\mathbf{R}}$ al grupo y $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}$ a los elementos que representan diferentes traslaciones para distintos vectores \mathbf{R}_i .

entre sí, decimos que el conjunto de los $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}$ y el operador $L(\mathbf{x}, |\psi(\mathbf{x})|^2)$ forman un conjunto de operadores conmutativo. Por lo tanto los autovectores de $L(\mathbf{x}, |\psi(\mathbf{x})|^2)$ pueden ser elegidos de modo que sean simultáneamente autoestados de todos los $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}$, es decir,

$$L(\mathbf{x}, |\psi(\mathbf{x})|^2)\psi = \mu\psi,$$

$$\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}\psi = c(\mathbf{R}_i)\psi \quad \forall \mathbf{R}_i.$$

Debido a la conmutatividad se cumple que $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}\mathcal{P}_{\mathbf{R}_{i'}}\psi = c(\mathbf{R}_i)c(\mathbf{R}_{i'})\psi = \mathcal{P}_{\mathbf{R}_i+\mathbf{R}_{i'}}\psi = c(\mathbf{R}_i+\mathbf{R}_{i'})\psi$. Por lo tanto, los autovalores también cumplen que $c(\mathbf{R}_i)c(\mathbf{R}_{i'}) = c(\mathbf{R}_i+\mathbf{R}_{i'})$.

Escribamos el coeficiente correspondiente al vector \mathbf{a}_1 como $c(\mathbf{a}_1) = e^{i2\pi j_1}$, donde $j_1 \in \mathbb{C}$. Del mismo modo $c(\mathbf{a}_2) = e^{i2\pi j_2}$ donde $j_2 \in \mathbb{C}$. Se han elegido j_1 y j_2 de manera que se cumplan ambas expresiones. Aplicando la conmutatividad de los autovalores obtenida anteriormente y la definición de la red de Bravais (en particular, que $\mathbf{R}_i = i_1\mathbf{a}_1 + i_2\mathbf{a}_2$), se obtiene que $C(\mathbf{R}_i) = c(\mathbf{a}_1)^{i_1}c(\mathbf{a}_2)^{i_2}$. Consecuentemente, $C(\mathbf{R}_i) = e^{i2\pi i_1 j_1} e^{i2\pi i_2 j_2}$, o bien, $C(\mathbf{R}_i) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_i}$ con $\mathbf{p} = j_1\mathbf{b}_1 + j_2\mathbf{b}_2$, donde los vectores $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2)$ satisfacen que $\mathbf{b}_i\mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, con $i, j = 1, 2$ (δ_{ij} es la función delta de Kronecker). Para una red de Bravais rectangular ($\mathbf{a}_1 = a_1\mathbf{i}$ y $\mathbf{a}_2 = a_2\mathbf{j}$, con \mathbf{i}, \mathbf{j} los versores de una red cartesiana), los vectores \mathbf{b}_i son $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a_1}\mathbf{i}$ y $\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a_2}\mathbf{j}$. Por lo tanto,

$$(5.2.1) \quad \mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_i}\psi(\mathbf{x}),$$

lo cual es equivalente a:

$$(5.2.2) \quad \psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}u(\mathbf{x}), \quad \text{con } u(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i) = u(\mathbf{x}).$$

Hasta aquí, el vector \mathbf{p} no tiene por qué tomar valores reales y estar discretizado, ya que $j_i \in \mathbb{C}$, $i = 1, 2$. Vamos a deducir esta restricción sobre \mathbf{p} a partir de las condiciones de periodicidad de las funciones ψ . Sea N_i el entero para el que se cumple que $a_i N_i = D_i$ con $i = 1, 2$. Sea $\mathbf{D} = N_1\mathbf{a}_1 + N_2\mathbf{a}_2$. La periodicidad de ψ impone que $\psi(\mathbf{x} + \mathbf{D}) = \psi(\mathbf{x})$. Si aplicamos 5.2.1 a la condición de contorno, se obtiene:

$$\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i=(N_1, N_2)}\psi = \psi(\mathbf{x} + \mathbf{D}) = \psi(\mathbf{x} + N_1\mathbf{a}_1 + N_2\mathbf{a}_2) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{D}}\psi(\mathbf{x}).$$

Para que se cumpla la condición de contorno, necesariamente $e^{i\mathbf{p}\mathbf{D}} = 1$. Sustituyendo la expresión para \mathbf{D} se obtiene $e^{i2\pi N_1 j_1} = 1$ y $e^{i2\pi N_2 j_2} = 1$. Luego $N_i j_i = m_i$ con $m_i \in \mathbb{Z}$, $i = 1, 2$. Por lo tanto $\mathbf{p}_{j=(j_1, j_2)} = \frac{m_1}{N_1}\mathbf{a}_1 + \frac{m_2}{N_2}\mathbf{a}_2$, de donde se deduce que $\mathbf{p}_{j=(j_1, j_2)} \in \mathbb{R}^2$ y está discretizado.

En el caso de que la red de Bravais original sea cuadrada ($\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}$ y $\mathbf{a}_2 = a\mathbf{j}$), cada vector \mathbf{p} está separado de los vectores vecinos en \mathbb{R}^2 en las direcciones de x e y una distancia $\Delta p = \frac{2\pi}{aN}$. \square

OBSERVACIÓN 5.2.3. (Red recíproca). Los vectores $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ son los vectores primitivos de la red recíproca cuyos nodos se obtienen a partir de vectores $\mathbf{P}_j = J_1\mathbf{b}_1 + J_2\mathbf{b}_2$ cuando $J_1, J_2 \in \mathbb{Z}$, ya que entonces se cumple que $e^{i\mathbf{R}\mathbf{P}_j} = 1$, lo cual es la condición que sirve para definir red recíproca (véase apéndice 3). Nótese que

para los vectores $\mathbf{p}_{\hat{j}}$ se cumple que $j_1, j_2 \in \mathbb{R}$. Es fácil ver que todo vector $\mathbf{p}_{\hat{j}'}$ se puede escribir como $\mathbf{p}_{\hat{j}'} = \mathbf{p}_{\hat{j}} + \mathbf{P}_{\hat{j}}, \forall \mathbf{p}_{\hat{j}'}$. Basta con observar que se cumple que, $e^{i\mathbf{R}\mathbf{p}_{\hat{j}'}} = e^{i\mathbf{R}\mathbf{p}_{\hat{j}}} e^{i\mathbf{R}\mathbf{P}_{\hat{j}}} = e^{i\mathbf{R}\mathbf{p}_{\hat{j}}}$ ya que $e^{i\mathbf{R}\mathbf{P}_{\hat{j}}} = 1$, por la definición de red recíproca.

DEFINICIÓN 5.2.4. Se denomina a \mathbf{p} *pseudomomento lineal* dado que cumple el mismo papel en las funciones de Bloch que el momento lineal en las ondas planas. En adelante se omite el subíndice \hat{j} .

NOTA 5.2.5. Nótese que la anterior demostración es igualmente válida para soluciones no autoconsistentes ψ_{na} del operador generado por una solución autoconsistente traslacionalmente simétrica, ψ . Es decir, las soluciones ψ_{na} de $L(\mathbf{x}, |\psi(\mathbf{x})|^2)\psi_{na} = \mu\psi_{na}$ tienen la forma de funciones de Bloch y por tanto, todo el espectro de $L(\mathbf{x}, |\psi(\mathbf{x})|^2)$ son funciones de Bloch. En particular la solución que coincide con ψ es la solución de la ecuación.

COROLARIO 5.2.6. Sean $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x})$ y $\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x})$ dos soluciones autoconsistentes traslacionalmente simétricas con pseudomomentos lineales \mathbf{p} y \mathbf{p}' . Supongamos que $\mathbf{p}' = \mathbf{p} + \mathbf{P}_{\hat{j}}$. Entonces ambas funciones son idénticas y sus autovalores, $\mu_{\mathbf{p}}$ y $\mu_{\mathbf{p}'}$, coinciden.

DEMOSTRACIÓN. Como sabemos la red recíproca viene definida por los vectores $\mathbf{P}_{\hat{j}} = J_1\mathbf{b}_1 + J_2\mathbf{b}_2$ con $J_1, J_2 \in \mathbb{Z}$, donde $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a_1}\mathbf{i}$ y $\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a_2}\mathbf{j}$ si la red de Bravais original es rectangular o bien los \mathbf{b}_i se definen de modo que cumplan $\mathbf{b}_i\mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, con $i, j = 1, 2$ para otra geometría. Luego podemos expresar cualquier vector \mathbf{p}' como combinación un vector en la primera zona de Brillouin \mathbf{p} y un vector de la red recíproca $\mathbf{P}_{\hat{j}}$, que no afecta a la forma de la onda de Bloch, es decir, $\mathbf{p}' = \mathbf{p} + \mathbf{P}_{\hat{j}}$.

Veamos ahora que las funciones con \mathbf{p}' fuera de esta celda son las mismas que aquellas con \mathbf{p} definido dentro del mismo. Por el teorema 5.2.2, podemos escribir $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x})$, con $u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i) = u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x})$. Asimismo, $\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{p}'\mathbf{x}}u_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x})$, donde la función $u_{\mathbf{p}'}$ es igualmente periódica. Se cumple que $\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{p}'\mathbf{x}}e^{i\mathbf{P}_{\hat{j}}\mathbf{x}}u_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}\tilde{u}_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x})$ donde $\tilde{u}_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{P}_{\hat{j}}\mathbf{x}}u_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x})$. La función $\psi_{\mathbf{p}'}$ cumple que $L(\mathbf{x}, |\psi_{\mathbf{p}'}|^2)\psi_{\mathbf{p}'} = \mu_{\mathbf{p}'}\psi_{\mathbf{p}'}$, luego $\tilde{u}_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x})$ cumple la ecuación:

$$\left[(\nabla + i\mathbf{p})^2 + V(\mathbf{x}) + F(|\tilde{u}_{\mathbf{p}'}|^2) \right] \tilde{u}_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}) = \mu_{\mathbf{p}'}\tilde{u}_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}).$$

Por otra parte, la solución estacionaria $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x})$ cumple que $L(\mathbf{x}, |\psi_{\mathbf{p}}|^2)\psi_{\mathbf{p}} = \mu_{\mathbf{p}}\psi_{\mathbf{p}}$ y por lo tanto,

$$\left[(\nabla + i\mathbf{p})^2 + V(\mathbf{x}) + F(|u_{\mathbf{p}}|^2) \right] u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \mu_{\mathbf{p}}u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}),$$

Luego cumple la misma ecuación con las mismas condiciones de contorno y por lo tanto, necesariamente $u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \tilde{u}_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x})$, con lo que cualquier función con $\mathbf{p}' = \mathbf{p} + \mathbf{P}_{\hat{j}}$ se puede reducir a la misma función con pseudomomento \mathbf{p} . Consecuentemente, los \mathbf{p} distintos están acotados. Además, necesariamente $\mu_{\mathbf{p}} = \mu_{\mathbf{p}'} = \mu_{\mathbf{p} + \mathbf{P}_{\hat{j}}}$, es decir, los autovalores son una función periódica de \mathbf{p} . \square

OBSERVACIÓN 5.2.7. Por lo tanto, los valores de los pseudomomentos \mathbf{p} pueden ser confinados siempre en la primera zona de Brillouin.

COROLARIO 5.2.8. Supongamos que la red de Bravais original es cuadrada ($\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}$ y $\mathbf{a}_2 = a\mathbf{j}$). Entonces la primera zona de Brillouin tiene un tamaño $(\frac{2\pi}{a})^2$ y en ella hay N^2 momentos distintos.

DEMOSTRACIÓN. Si $\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}$ y $\mathbf{a}_2 = a\mathbf{j}$, como $|\mathbf{b}_i| = b = \frac{2\pi}{a}$, $i = 1, 2$ la celda de Wigner-Seitz de la red recíproca es tamaño $(\frac{2\pi}{a})^2$. Como los pseudomomentos se expresan como $\mathbf{p} = \frac{m_1}{N}\mathbf{b}_1 + \frac{m_2}{N}\mathbf{b}_2$, se encuentran separados una distancia $\Delta p = \frac{2\pi}{aN}$. Por lo tanto hay N^2 momentos distintos en este área. \square

COROLARIO 5.2.9. *Para cada valor de \mathbf{p} en la primera zona de Brillouin hay un número infinito de soluciones con autovalores distintos separados entre sí un cierto valor discreto.*

DEMOSTRACIÓN. Sea $\psi(r, \theta) = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x})$ una solución de Bloch de la ecuación (2.2.1). Como hemos visto, $u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x})$ cumple la ecuación:

$$\left[(\nabla + i\mathbf{p})^2 + V(\mathbf{x}) + f(|u_{\mathbf{p}}|^2) \right] u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \mu_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}),$$

con la condición de contorno $u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x} + \mathbf{R})$. Este problema tiene una familia infinita de soluciones $u_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x})$ con autovalores distintos $\mu_{\mathbf{p},\alpha}$, para cada valor de $|u_{\mathbf{p}}|^2$. \square

NOTACIÓN 5.2.10. Dado que $|\mathbf{b}_i| = \frac{2\pi}{a_i}$, $i = 1, 2$, vamos a expresar el pseudomomento como $\mathbf{p} = m_1\Delta p_1 \frac{\mathbf{b}_1}{|\mathbf{b}_1|} + m_2\Delta p_2 \frac{\mathbf{b}_2}{|\mathbf{b}_2|}$, donde $\Delta p_{1,2} = \frac{2\pi}{a_{1,2}N_{1,2}}$, $m_{1,2} \in \mathbb{Z}$ y $\mathbf{m} = (m_1, m_2)$.

DEFINICIÓN 5.2.11. Denominaremos a \mathbf{m} *pseudomomento lineal entero*, para distinguirlo del pseudomomento lineal \mathbf{p} .

NOTACIÓN 5.2.12. En adelante tomaremos sólo redes de Bravais cuadradas, es decir, $\mathbf{a}_1 = a_1\mathbf{i}$ y $\mathbf{a}_2 = a_2\mathbf{j}$ con $a_1 = a_2 = a$. El dominio Ω puede ser dividido en $N \times N$ celdas de tamaño $a \times a$ que denominaremos celdas elementales. Sea $\hat{i} = (i_x, i_y)$ con $i_{x,y} = 1, \dots, N$. Denotaremos a cada celda elemental como $\Omega_{\hat{i}}$, es decir, $\Omega_{\hat{i}} = \{\mathbf{x}/\mathbf{x} \in]\frac{-D}{2} + (i_x - 1)a, \frac{-D}{2} + i_x a[\cup]\frac{-D}{2} + (i_y - 1)a, \frac{-D}{2} + i_y a[\}$. La red recíproca de $\mathbf{R}_{\hat{i}}$ se define por $\mathbf{P}_{\hat{j}} = (P_x, P_y) = \frac{2\pi}{a}J_x\mathbf{i} + \frac{2\pi}{a}J_y\mathbf{j}$ con $J_x, J_y \in \mathbb{Z}$.

En estas redes cuadradas escribiremos el pseudomomento lineal es $\mathbf{p} = m_x\Delta p\mathbf{i} + m_y\Delta p\mathbf{j}$, donde $\Delta p = \frac{2\pi}{aN}$ y el pseudomomento lineal entero es $\mathbf{m} = (m_x, m_y)$ con $m_{x,y} \in \mathbb{Z}$. También podemos escribir el pseudomomento lineal como $\boxed{\mathbf{p} = \Delta p\mathbf{m}}$, o bien $\mathbf{p} = (p_x, p_y) = (m_x\Delta p, m_y\Delta p) = (m_x\frac{2\pi}{aN}, m_y\frac{2\pi}{aN}) = (m_x\frac{b}{N}, m_y\frac{b}{N})$, donde $b = \frac{2\pi}{a}$.

COROLARIO 5.2.13. *(de valor máximo para $p_{x,y}$) El pseudomomento lineal \mathbf{p} está acotado. En el caso cuadrado, cada una de las componentes $p_{x,y}$ está acotada por $|p_{x,y}| \leq \frac{\pi}{a}$ luego el pseudomomento lineal entero \mathbf{m} cumple que $|m_{x,y}| \leq \frac{N}{2}$ si N es par y $|m_{x,y}| \leq \frac{N-1}{2}$ si N es impar.*

DEMOSTRACIÓN. Como hemos visto el pseudomomento lineal \mathbf{p} puede ser confinado a la primera zona de Brillouin, que vamos a definir en el cuadrado $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}] \times [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ en el que, como hemos visto, se definen N^2 momentos con espaciado $\Delta p = \frac{2\pi}{aN}$. Luego $|p_{x,y}| = |m_{x,y}\Delta p| \leq \frac{\pi}{a}$. De aquí se obtiene que $|m_{x,y}| \leq \frac{N}{2}$ si N es par y $|m_{x,y}| \leq \frac{N-1}{2}$ si N es impar. \square

OBSERVACIÓN 5.2.14. En el caso lineal puede escribirse el operador L como $L_{Lineal}^{\mathbf{p}} = \left[(\nabla + i\mathbf{p})^2 + V(\mathbf{x}) \right]$, y calcular los autovalores variando de modo continuo el valor del pseudomomento \mathbf{p} . De este modo, podemos obtener la relación

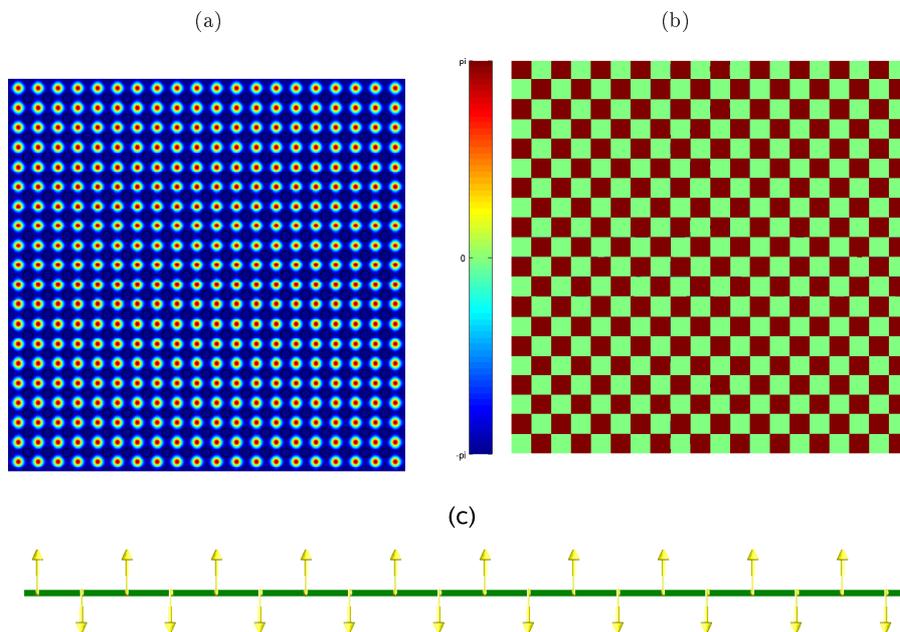


FIGURA 5.2.1. Amplitud (a), fase (b) y representación esquemática de la fase a lo largo de la fila inferior (c) para una solución simétrica con $\mu = -0,01$ y $m_x = m_y = 10$.

entre \mathbf{p} y $\mu_{\mathbf{p}}$, lo cual permite obtener los intervalos de $\mu_{\mathbf{p}}$ para los que no se obtiene solución, conocidos como *bandas prohibidas*. Por otra parte, en el caso no lineal, puede variar no sólo \mathbf{p} sino también $|\psi|^2$, lo cual da lugar a una relación adicional entre $\mu_{\mathbf{p},\alpha}$ y la potencia P , definida como en 2.3.7. Esta estructura de bandas es la utilizada en las curvas $P = P(\mu)$ de las soluciones estacionarias presentadas en el capítulo 3. Nótese que la estructura de bandas deducida en 2.3.8 está ligada al pseudomomento angular y a la periodicidad en la variable angular, y no al pseudomomento lineal \mathbf{p} y la simetría traslacional.

Vamos a presentar algunos ejemplos de soluciones estacionarias de 2.2.1 con simetría traslacional con distintos pseudomomentos \mathbf{m} calculadas con el método numérico descrito en el apéndice D. Para calcular estas soluciones en un dominio finito con condiciones de contorno tipo Dirichlet (el campo se anula en la frontera), es necesario realizar consideraciones relacionadas con la naturaleza de las soluciones, que explicaremos en el último apartado del siguiente capítulo. En particular es necesario simular el flujo definido en el apartado 6.6 mediante un campo externo adicional.

Todas las soluciones se han calculado en una red cuadrada como la presentada en la figura 3.2.1 (b). Se ha tomado un número de celdas en cada dirección $N_x = N_y = 20$. Por lo tanto, tal y como se obtiene en el corolario 5.2.13 se debe cumplir que $|m_{x,y}| \leq \frac{N}{2} = 10$. Nos vamos a restringir a los casos en que $m_x = m_y$ y $m_{x,y} \geq 0$.

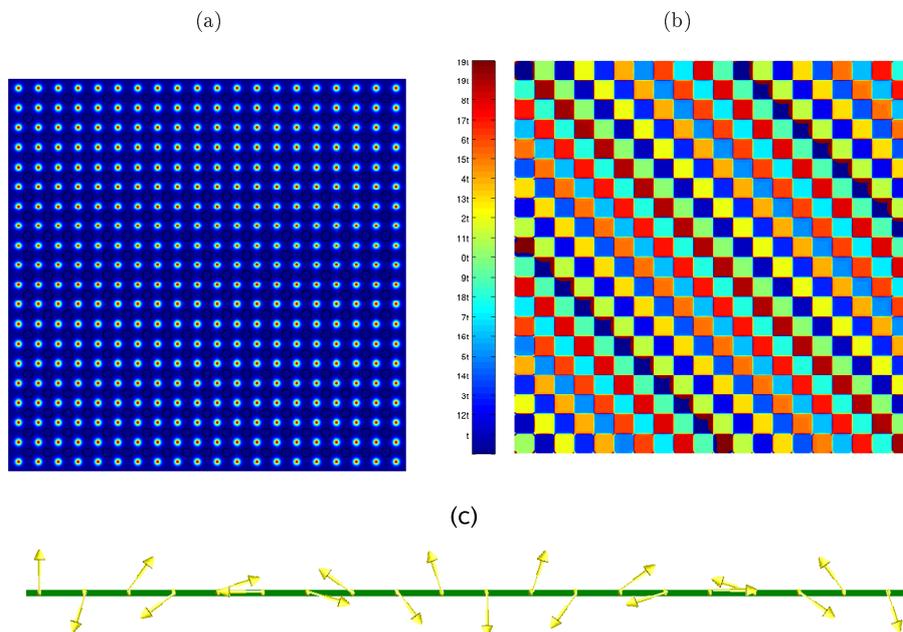


FIGURA 5.2.2. Amplitud (a), fase (b) y representación esquemática de la fase a lo largo de la fila inferior (c) para una solución simétrica con $\mu = -0,06$ y $m_x = m_y = 9$. El valor de la diferencia de fase entre celdas vecinas, $\Delta\varphi = \frac{9}{10}\pi$ se ha representado con la letra t .

En la figura 5.2.1 se presenta la amplitud y la fase de una solución autoconsistente traslacionalmente simétrica cuando $m_x = m_y = 10$. De acuerdo con el teorema 5.2.2, la función debe tener la forma $\psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}u(\mathbf{x})$, con $u(\mathbf{x} + \mathbf{R}) = u(\mathbf{x})$ y $\mathbf{p} = m_x \frac{2\pi}{aN} + m_y \frac{2\pi}{aN}$. Luego, en este caso, $p_x = p_y = \frac{\pi}{a}$. Por lo tanto la diferencia de fase entre celdas separadas una distancia a en la dirección x o y es de $\Delta\varphi = \pi$, tal y como se puede observar en las figuras 5.2.1 (b) y (c). En esta última se representa esquemáticamente la fase en el centro de cada celda como una flecha sobre el plano del papel que señala hacia arriba si la fase es cero, y donde el resto de fases se representan como ángulos contados en sentido *levógiro* (contrario al de las agujas del reloj). Se ha representado únicamente la fase a lo largo de la fila inferior.

La figura 5.2.2 presenta la amplitud y la fase de una solución autoconsistente traslacionalmente simétrica de pseudomomento lineal entero $m_x = m_y = 9$. En este caso, el pseudomomento lineal es $p_x = p_y = m_x \frac{2\pi}{aN} = \frac{9}{20} \frac{2\pi}{a}$ y por lo tanto la diferencia de fase entre celdas separadas una distancia a en la dirección x o y es de $\Delta\varphi = \frac{9}{10}\pi$. Nuevamente se puede observar este comportamiento de la fase en las figuras 5.2.2 (b) y (c), donde esta última, construida como en 5.2.1 (c), representa la fase a lo largo de la fila inferior.

En la figura 5.2.3 se presenta una solución autoconsistente traslacionalmente simétrica cuando el pseudomomento lineal entero es $m_x = m_y = 8$ y por tanto $p_x = p_y = \frac{8}{20} \frac{2\pi}{a}$, es decir, $\Delta\varphi = \frac{8}{10}\pi$. La amplitud se representa en la figura 5.2.3

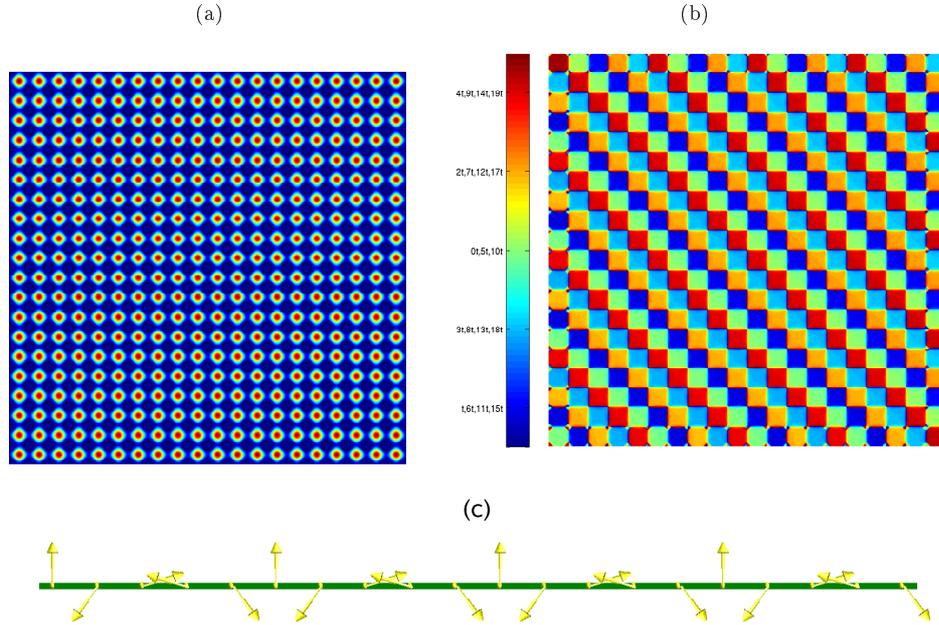


FIGURA 5.2.3. Amplitud (a), fase (b) y representación esquemática de la fase a lo largo de la fila inferior (c) para una solución simétrica con $\mu = 0,03$ y $m_x = m_y = 8$. El valor de la diferencia de fase entre celdas vecinas, $\Delta\varphi = \frac{8}{10}\pi$ se ha representado con la letra t .

(a) y la fase en las figuras 5.2.3 (b) y (c), donde esta última se ha construido como en las anteriores figuras.

En la figura 5.2.4 se presenta la amplitud y la fase de una solución traslacionalmente simétrica con $m_x = m_y = 7$, es decir, $p_x = p_y = \frac{7}{20}\frac{2\pi}{a}$ y $\Delta\varphi = \frac{7}{10}\pi$. La fase se representa en las figuras 5.2.4 (b) y (c), donde esta última se construye como en las anteriores figuras.

La figura 5.2.5 presenta amplitud y fase de una solución traslacionalmente simétrica con pseudomomento $m_x = m_y = 6$. En este caso, $p_x = p_y = \frac{6}{20}\frac{2\pi}{a}$ y $\Delta\varphi = \frac{6}{10}\pi$. La figura 5.2.5 (c) se ha construido como en las anteriores figuras.

La figura 5.2.6 representa una solución autoconsistente traslacionalmente simétrica con pseudomomento $m_x = m_y = 0$. En este caso, como $p_x = p_y = \frac{0}{20}\frac{2\pi}{a}$ y por tanto, $\Delta\varphi = 0$, la fase es homogénea en todo el dominio, tal y como se representa en las figuras 5.2.6 (b) y (c).

En la figura 5.2.7 se presenta la relación entre la potencia P y el autovalor μ para distintos valores del pseudomomento. Las líneas negras verticales representan los límites inferior y superior de la primera banda de conducción. Como se observa la curva para la solución con pseudomomento lineal entero $m_x = m_y = 10$ tiende al límite superior de la banda mientras que la curva de la solución con $m_x = m_y = 0$ tiende al límite inferior. Ambos límites se han obtenido en el caso lineal para funciones de Bloch precisamente con esos pseudomomentos lineales. Estas

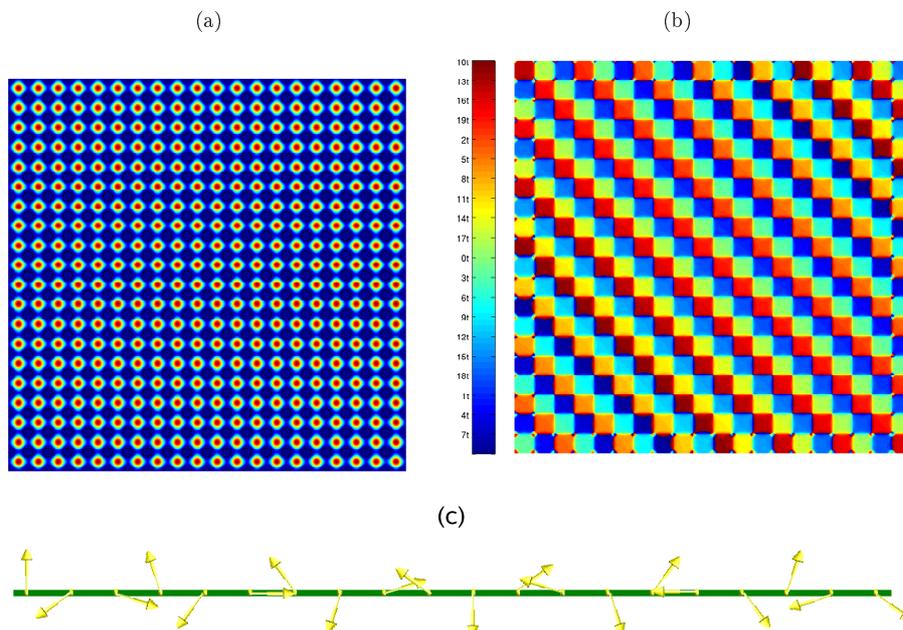


FIGURA 5.2.4. Amplitud (a), fase (b) y representación esquemática de la fase a lo largo de la fila inferior (c) para una solución simétrica con $\mu = 0,03$ y $m_x = m_y = 7$. El valor de la diferencia de fase entre celdas vecinas, $\Delta\varphi = \frac{7}{10}\pi$ se ha representado con la letra t .

soluciones se pueden obtener, por lo tanto, a partir de las soluciones en el caso lineal, tal y como se hace desde el punto de vista de la *Teoría de Bifurcaciones* [181].

Por otra parte, la existencia de estas soluciones es independiente de la presencia de un potencial lineal con invariancia traslacional. En la figura 5.2.8 se presenta una solución con pseudomomento lineal entero $m_x = m_y = 10$ cuando $V_0 = 0$. En la misma figura se representa la curva $P = P(\mu)$ para esta solución y para la solución con el mismo pseudomomento y $V_0 = 2$. Las líneas negras representan los límites inferior y superior de la primera banda de conducción cuando $V_0 = 2$. Cuando $V_0 = 0$ no existe estructura de bandas lineal, y es la solución la que crea su propio potencial con invariancia traslacional en el caso no lineal.

NOTA 5.2.15. Nótese que, para distintas soluciones autoconsistentes traslacionalmente simétricas con parejas \mathbf{p}, α distintas, el autovalor es distinto, es decir, $\mu = \lambda(\mathbf{p}, \alpha)$. En el siguiente capítulo obtendremos una relación entre los autovalores μ de las soluciones estacionarias de la primera banda con distintos pseudomomentos.

OBSERVACIÓN 5.2.16. Podemos obtener los resultados anteriores desde el punto de vista del teorema de autoconsistencia utilizado en el capítulo 2. Supongamos que ψ_ν es una solución simétrica de la ecuación 2.2.1 y que $|\psi_\nu|^2$ presenta invariancia traslacional, es decir $\mathcal{G} \equiv \mathcal{P}_{\mathbf{R}}$. Aplicando el teorema de Bloch lineal al operador

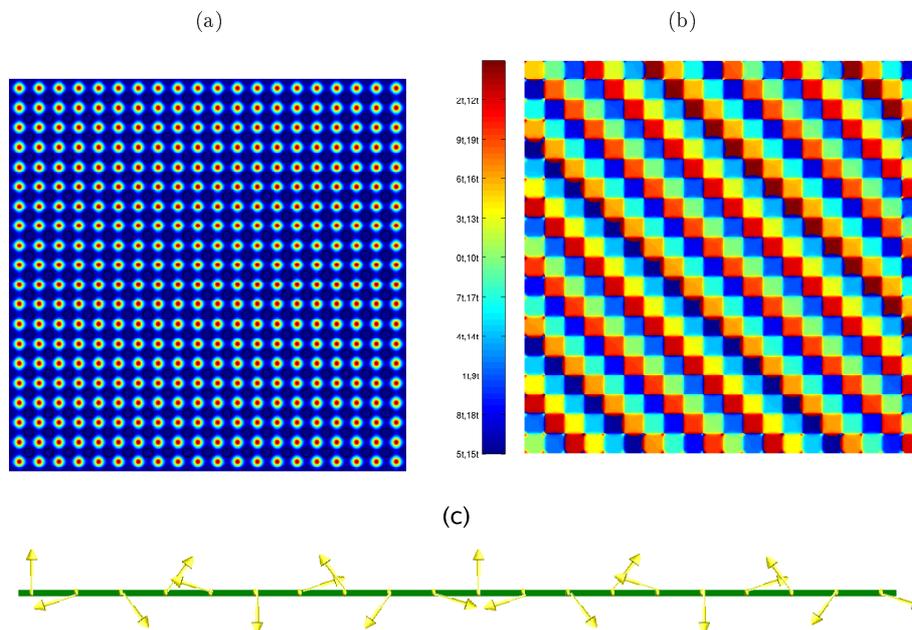


FIGURA 5.2.5. Amplitud (a), fase (b) y representación esquemática de la fase a lo largo de la fila inferior (c) para una solución simétrica con $\mu = 0,02$ y $m_x = m_y = 6$. El valor de la diferencia de fase entre celdas vecinas, $\Delta\varphi = \frac{6}{10}\pi$, se ha representado con la letra t .

generado por dicha solución $L(\mathbf{x}, |\psi_\nu|^2)$, se obtiene que el espectro de este operador está constituido por funciones de Bloch $f(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}u(\mathbf{x})$, donde $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^2$ es el pseudomomento lineal y $u(\mathbf{x}) = u(\mathbf{x} + \mathbf{R})$. Estas soluciones pueden pertenecer a distintas bandas, que denotaremos con letras griegas, y presentan distintos pseudomomentos, \mathbf{p} . Por lo tanto, las denominaremos $f_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x})$ y denotaremos a cada autovalor como como $\mu_{\mathbf{p},\alpha}$. Dichas funciones funciones son, en general, no autoconsistentes, es decir, no son autofunciones del operador generado por ellas mismas. Tal y como hemos demostrado en el teorema 5.2.2, la solución simétrica ψ_ν también tiene la forma de una función de Bloch. Denotaremos su pseudomomento como \mathbf{p}_ν y su banda como α_ν . Como dicha función debe aparecer en el espectro de Bloch del operador generado por ella misma, para alguna de las $f_{\mathbf{p},\alpha}$ se cumple que $\mathbf{p} = \mathbf{p}_\nu$ y $\alpha = \alpha_\nu$. En definitiva, una de las funciones de Bloch coincide con la solución no lineal con invariancia traslacional ψ que genera el operador y para la que se cumple que $\mu_{\mathbf{p},\alpha} = \mu_{\mathbf{p}_\nu,\alpha_\nu}$. El resto de soluciones son soluciones no autoconsistentes ya que $L(|\psi_\nu|^2)f_{\mathbf{p},\alpha} = \mu_{\mathbf{p},\alpha}f_{\mathbf{p},\alpha}$ pero $L(|f_{\mathbf{p},\alpha}|^2)f_{\mathbf{p},\alpha} \neq \mu_{\mathbf{p},\alpha}f_{\mathbf{p},\alpha}$.

5.3. Dinámica de soluciones con invariancia traslacional

5.3.1. Conservación del pseudomomento lineal. Sea $\phi(\mathbf{x}, z)$ una solución de la ecuación 4.2.1, donde $V(\mathbf{x} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{x})$ para todos los $\mathbf{R}_i = i_x a_i \mathbf{i} + i_y a_j \mathbf{j}$, pertenecientes a la red de Bravais descrita en 5.2.12 o bien $V(\mathbf{x} + \mathbf{R}) = cte \in \mathbb{R}$.

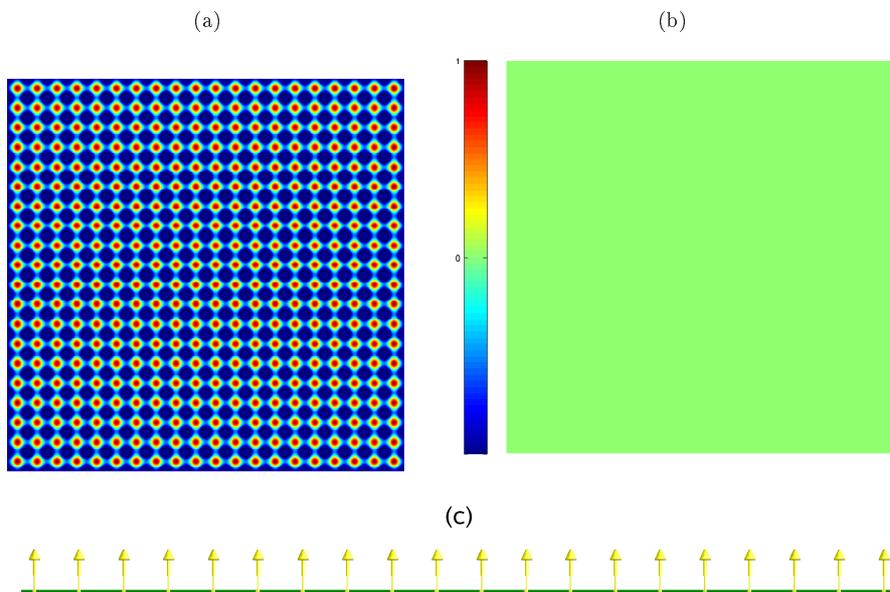


FIGURA 5.2.6. Amplitud (a), fase (b) y representación esquemática de la fase a lo largo de la fila inferior (c) para una solución simétrica con $\mu = 0,04$ y $m_x = m_y = 0$.

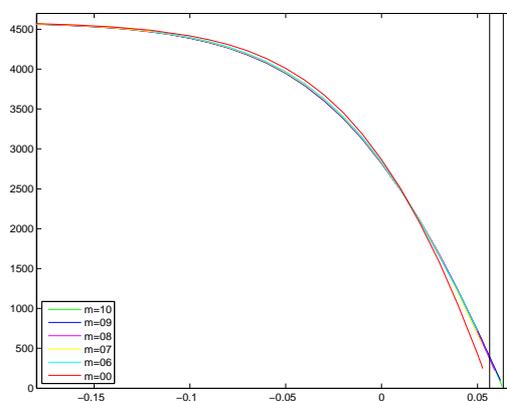


FIGURA 5.2.7. Potencia P en función de μ para las soluciones con $m_x = m_y = m = 10, 9, 8, 7, 6$, y 0 . Las líneas verticales en color negro representan el límite inferior y superior de la primera banda permitida.

Supongamos que $|\phi|^2$ cumple que $|\phi(\mathbf{x} + \mathbf{R}')|^2 = |\phi(\mathbf{x})|^2$, para $\mathbf{R}' = i_x a' \mathbf{i} + i_y a' \mathbf{j}$, pertenecientes a una red de Bravais cuadrada definida como en 5.2.12. Sea, como hasta ahora, \mathcal{G} el grupo de simetría de $V(\mathbf{x})$ y \mathcal{G}' el grupo de simetría de $|\phi|^2$. Supondremos, de nuevo, que \mathcal{G}' es un subgrupo de \mathcal{G} . Por lo tanto, \mathcal{G} es $E(\mathbb{R}^2)$ o $\mathcal{P}_{\mathbf{R}}$,

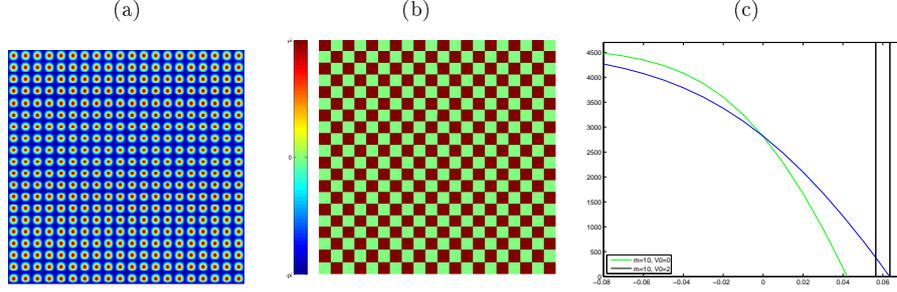


FIGURA 5.2.8. Amplitud (a), fase (b) para una solución simétrica con $\mu = -0,01$ y $m_x = m_y = 10$. En (c) se representa las curvas $P = P(\mu)$ de la solución con $V_0 = 0$ y con $V_0 = 2$. Las líneas verticales en color negro representan el límite inferior y superior de la primera banda permitida cuando $V_0 = 2$.

donde $\mathcal{P}_{\mathbf{R}}$ representa el grupo de traslaciones discretas en el plano de distancia \mathbf{R} y \mathcal{G}' invariante bajo $\mathcal{P}_{\mathbf{R}'}$, donde $\mathcal{P}_{\mathbf{R}'}$ representa el grupo de traslaciones discretas en el plano de distancia \mathbf{R}' . Por simplicidad si \mathcal{G} es $\mathcal{P}_{\mathbf{R}}$, supondremos que \mathcal{G}' es igualmente $\mathcal{P}_{\mathbf{R}}$. Utilizando los mismos argumentos que en el apartado anterior se puede demostrar que si $|\phi(\mathbf{x})|^2$ cumple estas condiciones, se le puede asignar un pseudomomento lineal \mathbf{p} y un pseudomomento lineal entero \mathbf{m} .

Como sabemos las soluciones estacionarias de la ecuación 4.2.1 tienen la forma:

$$\phi(\mathbf{x}, z) = e^{i\mu z} \psi(\mathbf{x}).$$

Por lo tanto, si $\phi(\mathbf{x}, z)$ es una solución estacionaria de la ecuación 4.2.1, $\psi(\mathbf{x})$ debe ser una solución autoconsistente traslacionalmente simétrica de la ecuación 2.2.1 y su módulo, $|\psi(\mathbf{x})|^2$, presenta la misma invariancia traslacional que $|\phi(\mathbf{x})|^2$. En definitiva, el operador generado por ψ presenta, a su vez, invariancia traslacional, es decir, $L(\mathbf{x}, |\psi(\mathbf{x})|^2) = L(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i, |\psi(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i)|^2)$, donde L es el operador definido en la ecuación 2.2.1.

Veamos que el pseudomomento lineal entero \mathbf{m} (y, por tanto, el pseudomomento lineal \mathbf{p}) se conserva a lo largo de la propagación:

TEOREMA 5.3.1. *(de conservación del pseudomomento lineal entero). Supongamos que la condición inicial de la ecuación 4.2.1 presenta pseudomomento lineal bien definido. Entonces éste se conserva a lo largo de la evolución.*

DEMOSTRACIÓN. Para las soluciones estacionarias, en las que evolución con z está determinada, la demostración es trivial. Veamos que también se cumple en el caso de que la condición inicial $\phi_0 = \phi(\mathbf{x}, z = 0)$ sea una solución no estacionaria con pseudomomento lineal \mathbf{p} definido. Se cumple que $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} \phi_0 = e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_i} \phi_0$, es decir, ϕ_0 es autofunción del operador $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}$. Como sabemos $L(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)$ es invariante bajo traslaciones discretas, ya que $L_0 = \nabla^2 + V(\mathbf{x})$ y $L_1 = F(|\psi|^2)$ lo son, pues ∇^2 es invariante bajo traslaciones discretas y tanto $V(\mathbf{x})$ como $|\phi_0|^2$ lo son por hipótesis. Por lo tanto, $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} L \mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}^{-1} = L$.

Consideremos la evolución de 0 a z como una sucesión de pasos infinitesimales de longitud h con $h \rightarrow 0$. En una ecuación de primer orden en la variable de

evolución, la solución en z_j se transforma en $z_{j+1} = z_j + h$ según la ecuación $\phi_{j+1} = e^{iL(\mathbf{x}, |\phi|^2)h} \phi_j$, donde $j \in \mathbb{N}$ es un índice tal que $z_j = z_0 + j * h$ y $\phi_j = \phi(\mathbf{x}, z_j)$.

Vamos demostrar el teorema por inducción. Evidentemente se cumple que $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} L(\mathbf{x}, |\phi_0|^2) \mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}^{-1} = L(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)$ para z_0 . Luego $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} e^{iL(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)h} \mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}^{-1} = e^{iL(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)h}$, ya que con $h \rightarrow 0$ esto se traduce en que $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} \left(1 + iL(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)h\right) \mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}^{-1} = 1 + iL(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)h$. Por lo tanto, $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} \phi_1 = \mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} e^{iL(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)h} \phi_0 = e^{iL(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)h} \mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} \phi_0$. Como $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} \phi_0 = e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_i} \phi_0$, se cumple que $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} \phi_1 = e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_i} e^{iL(\mathbf{x}, |\phi_0|^2)h} \phi_0$ y, consecuentemente, $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} \phi_1 = e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_i} \phi_1$, con lo que ϕ_1 es también una función con pseudomomento lineal bien definido igual al correspondiente a ϕ_0 .

Supongamos ahora que ϕ_j es una función con momento lineal bien definido y que por tanto cumple que $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} \phi_j = e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_i} \phi_j$. También sabemos que $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} L(\mathbf{x}, |\phi_j|^2) \mathcal{P}_{\mathbf{R}_i}^{-1} = L(\mathbf{x}, |\phi_j|^2)$. Procediendo de manera análoga a como hemos hecho con anterioridad, si usamos la ecuación de evolución discreta junto con estas dos propiedades, obtenemos que $\mathcal{P}_{\mathbf{R}_i} \phi_{j+1} = e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_i} \phi_{j+1}$ y, por lo tanto, ϕ_{j+1} posee el mismo pseudomomento lineal que ϕ_j .

Luego, si $h \rightarrow 0$, cuando la condición inicial en $z = 0$ tiene pseudomomento lineal bien definido, para $z > 0$ la solución mantiene el mismo pseudomomento lineal. Por lo tanto, si $\phi(\mathbf{x}, 0) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, 0)$ con $u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i, 0) = u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, 0)$ entonces la solución tiene la forma $\phi(\mathbf{x}, z) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, z)$, con $u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x} + \mathbf{R}_i, z) = u_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, z)$ para $z > 0$. \square

Evidentemente, este resultado también es válido para el pseudomomento lineal entero \mathbf{m} , ya que $\mathbf{p} = \Delta \mathbf{p} \mathbf{m}$.

5.3.2. Estudio de estabilidad. Para estudiar la estabilidad de las soluciones presentadas en el anterior apartado se ha simulado la ecuación 4.2.1 utilizando como condición inicial:

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = \psi_e \cdot e^{i\Upsilon(\mathbf{x})},$$

donde ψ_e es una solución estacionaria de 4.2.1 con pseudomomento lineal entero definido \mathbf{m} , como las introducidas en el anterior apartado y $\Upsilon(\mathbf{x})$ es una función de números aleatorios que cumple $\forall \mathbf{x}$ que $\Upsilon(\mathbf{x}) \in [-\delta, \delta]$. En las simulaciones que presentaremos $\delta = 0,025$. Por lo tanto se trata de una perturbación de la fase de una solución estacionaria del 5%. Las soluciones perturbadas de partida no tienen, en consecuencia, pseudomomento definido. Para cada z se han calculado las siguientes cantidades:

1. La Potencia $P = \int |\phi|^2 d\mathbf{x}$.
2. El autovalor esperado de la solución $\langle \mu \rangle$, tal y como se definió en el apartado 4.4.2.
3. El valor del pseudomomento en la dirección x , \mathbf{m}_x en cada \mathbf{x} definido como $m_x(\mathbf{x}, z) = -\frac{iN}{2\pi} \log \left(\frac{\phi(\mathbf{x} + \mathbf{a}, y, z)}{\phi(\mathbf{x}, y, z)} \right)$.

También se ha calculado el pseudomomento en la dirección y . Como se parte de soluciones con $m_x = m_y$ el comportamiento de ambos pseudomomentos es similar. Como $m_x(\mathbf{x}, z)$ está definido en cada \mathbf{x} , para obtener un valor que recoja cuál es pseudomomento de la solución, se ha calculado la media y varianza de todos los pseudomomentos. Denominaremos a esta media \bar{m}_x .

En la figura 5.3.1 se presenta la evolución de P y $\langle \mu \rangle$ con z en el plano $P - \langle \mu \rangle$ para condiciones iniciales distintas para ψ_e . En particular para ψ_e con distintos

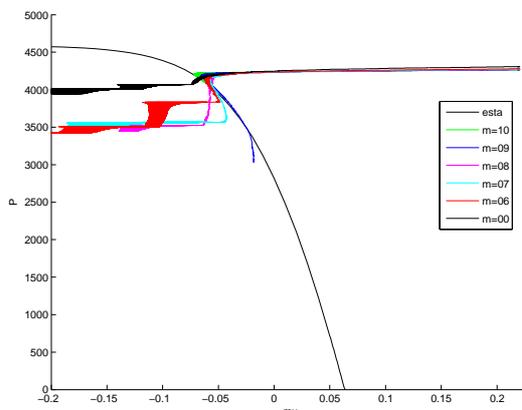


FIGURA 5.3.1. Evolución de P y $\langle \mu \rangle$ con z en el plano $P - \langle \mu \rangle$, para soluciones con condiciones iniciales ψ_e definidas por los pseudomomentos lineales enteros $m_x = m_y = 10, 9, 8, 7, 6$, y 0 y $\mu = -0,08$.

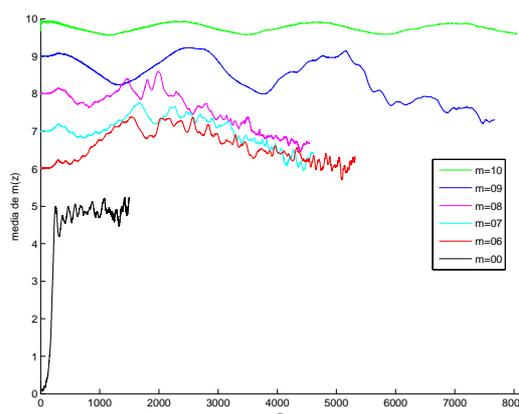


FIGURA 5.3.2. Evolución de $\bar{m}_x(z)$ con z para soluciones con condiciones iniciales ψ_e definidas por los pseudomomentos lineales enteros $m_x = m_y = 10, 9, 8, 7, 6$, y 0 y $\mu = -0,08$.

pseudomomentos lineales iniciales, aunque el autovalor de las soluciones estacionarias ψ_e es el mismo para todos los casos, $\mu = -0,08$. Como se observa la solución más estable es la que corresponde a una perturbación de la solución estacionaria con pseudomomento lineal entero $m_x = m_y = 10$. Su trayectoria en el plano $P - \langle \mu \rangle$ tiende a la curva de estados estacionarios, mientras que las del resto la cortan y tienden a otro tipo de soluciones. La trayectoria cuya condición inicial es una perturbación de la solución estacionaria con pseudomomento $m_x = m_y = 9$ también se mantiene un largo periodo de z sobre la curva de estados estacionarios, pero finalmente también la corta y se desestabiliza. En la figura 5.3.2 se observa como el pseudomomento medio $\bar{m}_x(z)$ de la solución cuya condición inicial es una

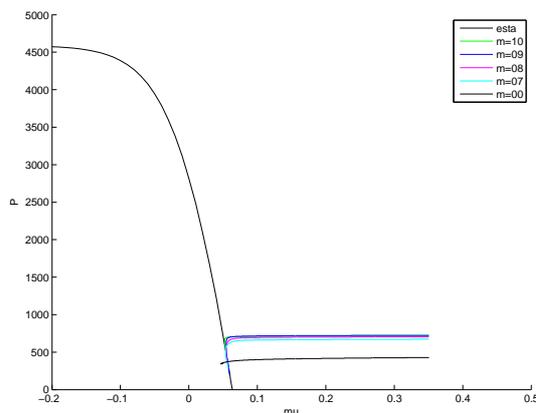


FIGURA 5.3.3. Evolución de P y $\langle \mu \rangle$ con z en el plano $P - \langle \mu \rangle$, para soluciones con condiciones iniciales ψ_e definidas por los pseudomomentos lineales enteros $m_x = m_y = 10, 9, 8, 7$ y 0 y $\mu = 0,05$.

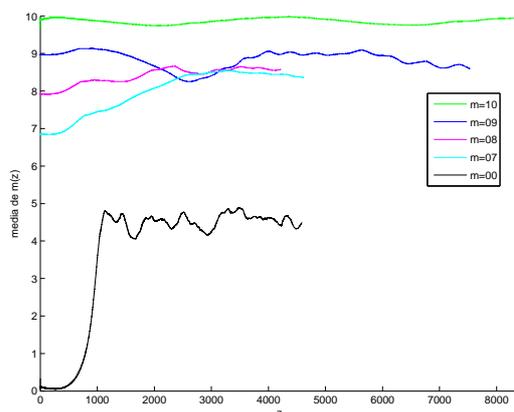


FIGURA 5.3.4. Evolución de $\bar{m}_x(z)$ con z para soluciones con condiciones iniciales ψ_e definidas por los pseudomomentos lineales enteros $m_x = m_y = 10, 9, 8, 7$ y 0 y $\mu = 0,05$.

perturbación de una solución estacionaria con pseudomomento $m_x = m_y = 10$ oscila en torno a ese valor. El de la solución donde ψ_e presentaba pseudomomento $m_x = m_y = 9$ se mantiene en torno a ese valor hasta un $z \approx 5000$. Por otro lado, los ψ_e con pseudomomentos $m_x = m_y = 8, 7, 6$ se alejan antes de los valores de la condición inicial. Sin embargo, es la solución cuya condición inicial presenta pseudomomento cercano a $m_x = m_y = 0$ la que más rápidamente pierde la condición de onda de Bloch no lineal con pseudomomento definido.

En la figura 5.3.3 se presenta la evolución de P y $\langle \mu \rangle$ con z en el plano $P - \langle \mu \rangle$ para condiciones iniciales en las que ψ_e presenta distintos pseudomomentos lineales iniciales. A diferencia de los ejemplos presentados anteriormente, en estos casos el autovalor de las soluciones estacionarias ψ_e es positivo y cercano a la banda

de conducción. En particular, $\mu = 0,05$. Al igual que en los casos anteriores, se observa que cuando ψ_e tiene pseudomomento lineal entero $m_x = m_y = 10$, la solución es más estable, ya que tiende a la curva de estados estacionarios. En el resto de casos las trayectorias cortan la curva de estados estacionarios. Si ψ_e presenta pseudomomento lineal entero $m_x = m_y = 9$, también se mantiene durante un determinado rango de valores de z sobre la curva de estados estacionarios, aunque finalmente también la corta y se desestabiliza. En la figura 5.3.4 se observa un comportamiento similar al observado en la figura 5.3.2. Sin embargo en este caso la solución no cruza tan claramente la curva de estados estacionarios. Para entender la diferencia entre ambos casos, estudiemos la amplitud y la fase de las soluciones para z suficientemente grandes.

En las figuras 5.3.5 y 5.3.6 se representa la amplitud y fase de soluciones $\phi(\mathbf{x}, z)$ para diferentes valores de z cuando la condición inicial es una perturbación de una solución ψ_e con $\mu = -0,08$ y distintos pseudomomentos lineales. En particular, se han representado la amplitud y fase en $z = 750$ para $m_x = m_y = 0$, en $z = 1800$ para $m_x = m_y = 6$, en $z = 3600$ para $m_x = m_y = 7$, en $z = 3000$ para $m_x = m_y = 8$ y en $z = 7200$ para $m_x = m_y = 9$ y $m_x = m_y = 10$. Todas las soluciones se inestabilizan, salvo en el último caso, es decir, si $m_x = m_y = 10$. En primer lugar la fase se desordena y se pierde la invariancia traslacional, tal y como se muestra en las figuras 5.3.5 y 5.3.6. Para z mayores, estas soluciones presentan una inestabilización por *autoenfoque*, ya que la amplitud crece de manera sostenida a lo largo de la propagación en algunas de las celdas del dominio. En la figura 5.3.1 se observa que esta inestabilización se traduce en que la $\langle \mu \rangle$ tiende a valores cada vez más negativos. La solución cuya condición inicial es una perturbación de una solución con pseudomomento $m_x = m_y = 0$ es la que se inestabiliza más rápidamente. La solución que se inestabiliza más tarde es aquella cuya condición inicial es una perturbación de una solución con $m_x = m_y = 9$. Esto también puede observarse en las figuras 5.3.1 y 5.3.2. Finalmente, si $m_x = m_y = 10$ no se observa inestabilización.

En las figuras 5.3.7 y 5.3.8 se representa la amplitud y fase de soluciones $\phi(\mathbf{x}, z)$ para diferentes valores de z cuando la condición inicial es una perturbación de una solución ψ_e con $\mu = 0,05$ y distintos pseudomomentos lineales. En particular, se han representado la amplitud y fase en $z = 1200$ para $m_x = m_y = 0$, en $z = 4200$ para $m_x = m_y = 7$ y $m_x = m_y = 8$, y en $z = 7200$ para $m_x = m_y = 9$ y $m_x = m_y = 10$. Nuevamente, todas las soluciones se inestabilizan, salvo en el último caso, es decir, si $m_x = m_y = 10$. Nótese que en este caso el autovalor es positivo y la potencia P de estas soluciones es muy inferior. De hecho, cuando las soluciones se desestabilizan, la fase se desordena y se pierde la invariancia traslacional, pero no se observa inestabilización por *autoenfoque*. En la figura 5.3.3, donde se muestra la evolución de P y $\langle \mu \rangle$ con z en el plano $P - \langle \mu \rangle$, se observa que las trayectorias de las soluciones que se inestabilizan no se mantienen sobre la curva de estados estacionarios. Al igual que anteriormente, la solución cuya condición inicial es una perturbación de una solución con pseudomomento $m_x = m_y = 0$ es la que se inestabiliza más rápidamente mientras que la solución que se inestabiliza más tarde es aquella cuya condición inicial es una perturbación de una solución con $m_x = m_y = 9$. Nuevamente, si $m_x = m_y = 10$ no se observa inestabilización.

Finalmente, el estudio de estabilidad cuando $V_0 = 0$ y $\mathbf{m} = (10, 10)$, realizado en las mismas condiciones que cuando $V_0 = 2$, se presenta en la figura 5.3.9. Como se observa las soluciones se inestabilizan salvo para valores de μ iniciales muy positivos.

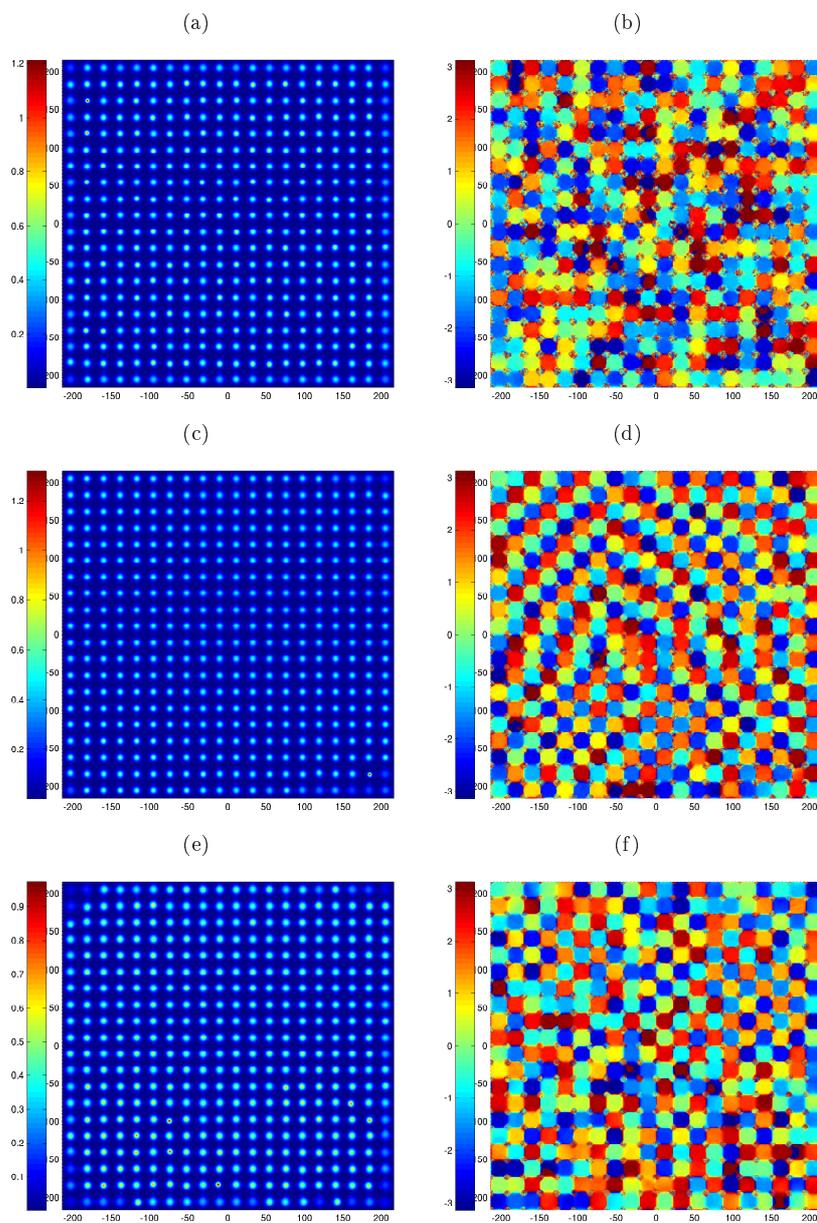


FIGURA 5.3.5. Amplitud - (a), (c), (e) - y fase - (b), (d), (f) - de $\phi(\mathbf{x}, z)$ en diferentes valores de z cuando la condición inicial es una perturbación de una solución con $\mu = -0,08$ y distintos pseudomomentos lineales. En (a) y (b) se muestra la amplitud y fase cuando $z = 750$ y $m_x = m_y = 0$, en (c) y (d) cuando $z = 1800$ y $m_x = m_y = 6$, y en (e) y (f) cuando $z = 3600$ y $m_x = m_y = 7$.

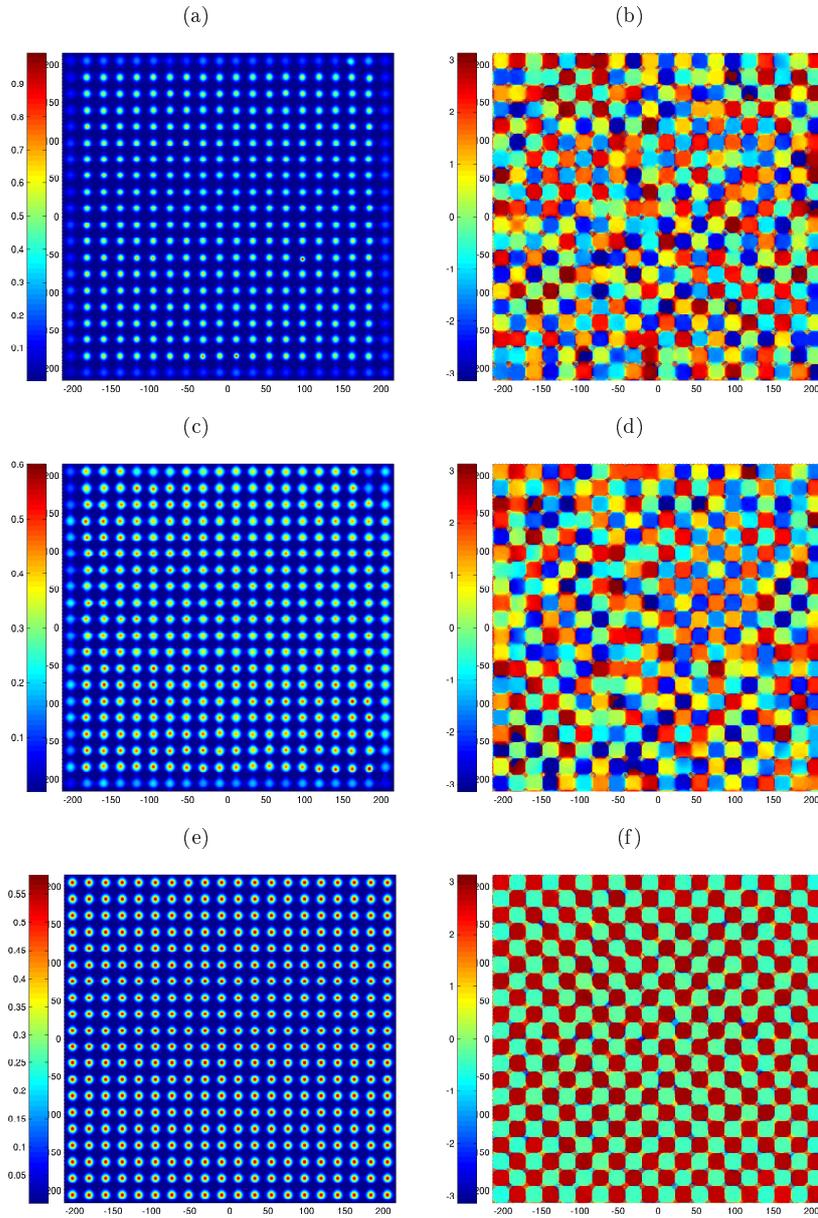


FIGURA 5.3.6. Amplitud - (a), (c), (e) - y fase - (b), (d), (f) - de $\phi(\mathbf{x}, z)$ en diferentes valores de z cuando la condición inicial es una perturbación de una solución con $\mu = -0,08$ y distintos pseudomomentos lineales. En (a) y (b) se muestra la amplitud y fase cuando $z = 3000$ y $m_x = m_y = 8$, en (c) y (d) cuando $z = 7200$ y $m_x = m_y = 9$, y en (e) y (f) cuando $z = 7200$ y $m_x = m_y = 10$.

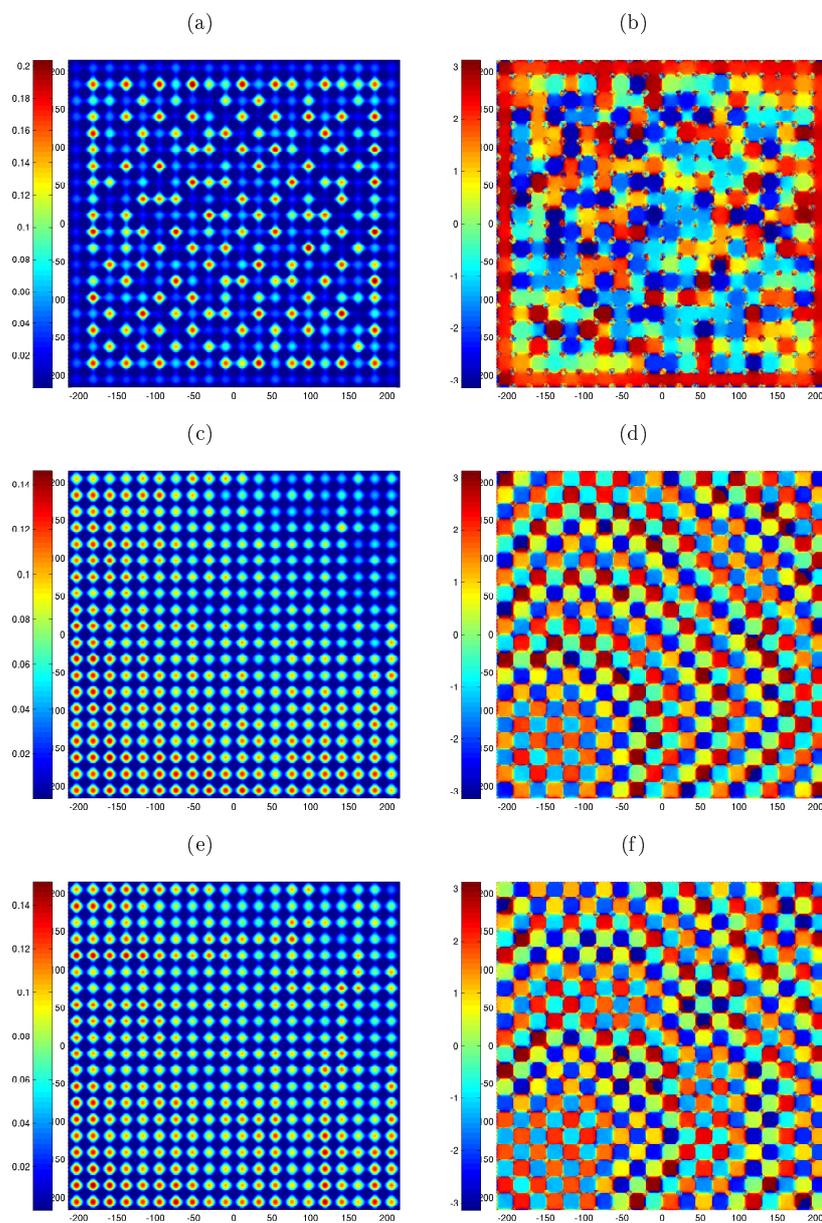


FIGURA 5.3.7. Amplitud - (a), (c), (e) - y fase - (b), (d), (f) - de $\phi(\mathbf{x}, z)$ en diferentes valores de z cuando la condición inicial es una perturbación de una solución con $\mu = 0,05$ y distintos pseudomomentos lineales. En (a) y (b) se muestra la amplitud y fase cuando $z = 1200$ y $m_x = m_y = 0$, en (c) y (d) cuando $z = 4200$ y $m_x = m_y = 7$, y en (e) y (f) cuando $z = 4200$ y $m_x = m_y = 8$.

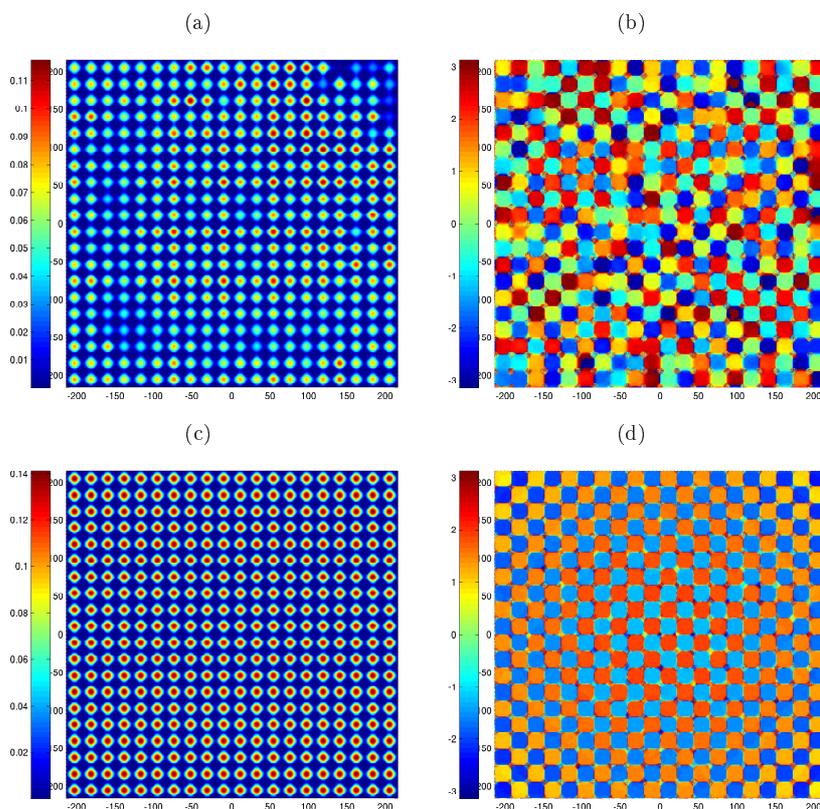


FIGURA 5.3.8. Amplitud - (a), (c), (e) - y fase - (b), (d), (f) - de $\phi(\mathbf{x}, z)$ en diferentes valores de z cuando la condición inicial es una perturbación de una solución con $\mu = 0,05$ y distintos pseudomomentos lineales. En (a) y (b) se muestra la amplitud y fase cuando $z = 7200$ y $m_x = m_y = 9$ y en (c) y (d) para el mismo valor de z y $m_x = m_y = 10$.

El estudio de los campos de salida permite observar que en los casos en los que la solución se desestabiliza se produce la pérdida de invariancia traslacional, es decir, la solución autoenfoca en algunas de las celdas del dominio. Cuando $\mu = 0,04$ la solución se mantiene estable, esto es, mantiene la invariancia traslacional y el pseudomomento y, además, tiende a una solución estacionaria. Por lo tanto, podemos concluir que la existencia de un potencial lineal $V(\mathbf{x})$ periódico no es imprescindible para obtener soluciones estacionarias con invariancia traslacional. Sin embargo, dado que cuando $V_0 = 2$ las soluciones con pseudomomento lineal entero $\mathbf{m} = (10, 10)$ son todas estables y cuando $V_0 = 0$, no todas lo son, podemos afirmar que el potencial periódico sí que contribuye a mejorar la estabilidad de este tipo soluciones.

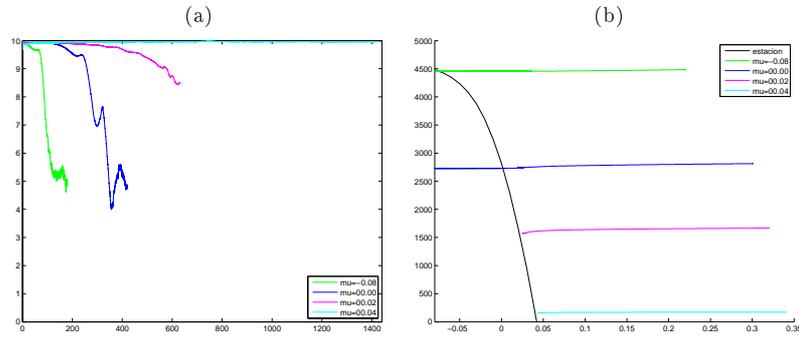


FIGURA 5.3.9. En (a) se representa la evolución de $\bar{m}_x(z)$ con z para soluciones $\phi(\mathbf{x}, z)$ cuando la condición inicial es una perturbación de una solución estacionaria ψ_e con pseudomomento $m_x = m_y = 10$ y distintos valores de μ iniciales, en el caso de $V_0 = 0$. En (b) se representa la evolución de P y $\langle \mu(z) \rangle$ con z en el plano $P - \langle \mu(z) \rangle$ para los mismos casos.

Propiedades de la luz en sistemas con invariancia traslacional

6.1. Introducción

Las soluciones estudiadas en el capítulo 5 siguen siendo funciones de Bloch no lineales, incluso en ausencia del potencial periódico $V(\mathbf{x})$. Su existencia no es consecuencia de la presencia de este potencial periódico, sino que se debe a que el campo $\phi(\mathbf{x}, z)$, en el caso no lineal, crea su propia estructura cristalina. Tal y como se ha presentado en el apartado 5.3.2, la existencia de un potencial periódico permite la estabilización de este tipo de soluciones hasta valores de z muy elevados, aunque la existencia de soluciones con invariancia traslacional no es consecuencia de la presencia de dicho potencial. A lo largo de este capítulo, vamos a ver que las propiedades del campo ϕ cuando adopta la forma de una función de Bloch no lineal son semejantes a las de un sólido cristalino. De hecho, dado que las soluciones poseen invariancia traslacional, ϕ presenta una *ordenación de largo alcance* en las variables espaciales \mathbf{x} , lo cual es la característica distintiva de los sólidos cristalinos.

La teoría que vamos a desarrollar es válida para soluciones en redes de Bravais generales, aunque en lo que sigue vamos a particularizar para soluciones en redes cuadradas de la forma $\mathbf{R} = n_x a \mathbf{i} + n_y a \mathbf{j}$, con \mathbf{i}, \mathbf{j} los versores de una red cartesiana, $a \in \mathbb{R}$ y $n_{x,y} \in \mathbb{Z}$. Como en los capítulos precedentes denominamos ϕ a las soluciones de la ecuación de propagación 4.2.1 y ψ a las soluciones de la ecuación de estados estacionarios 2.2.1, de modo que $\phi(\mathbf{x}, z) = e^{i\mu z} \psi(\mathbf{x})$. Como hemos visto en la observación 5.2.16, si ψ es una solución estacionaria autoconsistente traslacionalmente invariante, es decir, es solución de $L(\mathbf{x}, |\psi|^2) \psi = \mu \psi$ y $|\psi|^2$ presenta invariancia traslacional, el espectro de $L(\mathbf{x}, |\psi|^2)$ es un conjunto de funciones de Bloch, $f_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} u_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x})$ con diferentes pseudomomentos \mathbf{p} y pertenecientes a distintas bandas. Una de estas autofunciones cumple que $\mathbf{p} = \mathbf{q}$ y $\alpha = \beta$, donde \mathbf{q} y β son el pseudomomento y el índice banda, respectivamente, de ψ . El resto son, en general, soluciones no autoconsistentes. Lo mismo puede ser aplicado a una solución dinámica $\phi(\mathbf{x}, z)$ traslacionalmente invariante, y por tanto con pseudomomento lineal \mathbf{p} definido.

NOTA 6.1.1. Hemos visto que existe una relación entre la potencia P de la solución y el autovalor $\mu_{\mathbf{p},\alpha}$, $P = P(\mu_{\mathbf{p},\alpha})$. En adelante supondremos que esta curva es continua y monótona decreciente cuando $F(|\phi|^2) = |\phi|^2$. Los resultados numéricos obtenidos para soluciones estacionarias traslacionalmente invariantes indican que en medios autoenfocantes esta curva tiene este comportamiento (véase la figura 5.2.7).

Por otra parte, por conveniencia, vamos a normalizar las funciones de Bloch no lineales¹ por el número de celdas elementales en el dominio, es decir, $f_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} u_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x})$.

NOTACIÓN 6.1.2. En lo que sigue, denotaremos al par \mathbf{p}, α simplemente por \mathbf{p} .

En el segundo apartado vamos a escribir la acción, el hamiltoniano y las ecuaciones de movimiento del sistema estudiado. En el tercer apartado los vamos a expresar en función de los *coeficientes de Wannier*, que se obtienen del desarrollo de la función en términos de las *funciones de Wannier* que introduciremos en el mismo apartado, con el fin de mostrar que estas soluciones presentan *ordenación de largo alcance*, al igual que los sólidos cristalinos. En el cuarto apartado, se introduce una hipótesis mediante la cual podremos expresar el hamiltoniano del sistema de un modo análogo al que se obtiene en sistemas magnéticos en sólidos cristalinos. En el quinto apartado explotaremos dicha hipótesis para obtener cómo puede ser la fase de las soluciones en estos sistemas, para lo cual expresaremos el hamiltoniano y las ecuaciones de movimiento en términos de la fase. Obtendremos la solución de las ecuaciones de movimiento y observaremos que de este modo recuperamos una variable análoga al pseudomomento lineal obtenido en el capítulo anterior, para la que se obtendrán las mismas cotas. Además, obtendremos una relación entre el valor de este pseudomomento y el autovalor μ de las soluciones estacionarias y comprobaremos numéricamente esta predicción. En el sexto apartado introduciremos el concepto de flujo, el cual nos permitirá proponer una estrategia para obtener estas soluciones en dominios finitos físicamente realizables. Esta estrategia es la misma que ha sido utilizada en el capítulo 5 para calcular numéricamente las soluciones estacionarias. Asimismo explotaremos la analogía encontrada con los sistemas de sólidos magnéticos para predecir la existencia de soluciones con dominios magnéticos y obtendremos numéricamente una solución de este tipo en el último apartado.

6.2. Soluciones estáticas y hamiltoniano

En adelante vamos a considerar la ecuación:

$$(6.2.1) \quad \bar{L}(\mathbf{x}, |\bar{\phi}(\mathbf{x}, z)|^2) \bar{\phi}(\mathbf{x}, z) = -i \frac{\partial \bar{\phi}(\mathbf{x}, z)}{\partial z},$$

donde $\bar{L} = L + \mu$ y, como siempre, $L(\mathbf{x}, |\bar{\phi}(\mathbf{x}, z)|^2) = L_0 + L_1$ donde $L_0 = \nabla^2 - V(\mathbf{x})$ y $L_1(\mathbf{x}, |\bar{\phi}(\mathbf{x}, z)|^2) = F(\mathbf{x}, |\bar{\phi}(\mathbf{x}, z)|^2)$. En lo que sigue tomaremos $F(\mathbf{x}, |\bar{\phi}(\mathbf{x}, z)|^2) = \gamma(\mathbf{x}) |\bar{\phi}(\mathbf{x}, z)|^2$, donde $\gamma(\mathbf{x}) = \pm V(\mathbf{x})$.

DEFINICIÓN 6.2.1. Llamamos *solución estática* de la ecuación 6.2.1 a las funciones $\bar{\phi}(\mathbf{x}, z)$ que cumplen que $\frac{\partial \bar{\phi}(\mathbf{x}, z)}{\partial z} = 0$.

Las soluciones estáticas de la ecuación 6.2.1 son soluciones estacionarias de la ecuación 4.2.1. Para evitar un notación demasiado recargada denotaremos a las funciones $\bar{\phi}$ como ϕ .

Sea \mathcal{L} una función lagrangiana con la forma:

$$(6.2.2) \quad \mathcal{L} = \frac{i}{2} \left[\frac{\partial \phi}{\partial z} \phi^* - \frac{\partial \phi^*}{\partial z} \phi \right] + \phi^* \left[\nabla_t^2 - (V(\mathbf{x}) - \mu) + \gamma(\mathbf{x}) |\phi|^2 \right] \phi.$$

¹Evidentemente, las funciones de Bloch no lineales $f_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} u_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x})$ del espectro de L son ortogonales. Nótese que en este conjunto hay funciones autoconsistentes y otras que no lo son.

Se puede comprobar que la ecuación 6.2.1 aparece como la ecuación de movimiento que se obtiene a partir del lagrangiano 6.2.2 utilizando la formulación de Lagrange convencional [225, 226].

La acción asociada a este lagrangiano, teniendo en cuenta que $S = \int d^3x \mathcal{L}$, [225, 226] es:

$$(6.2.3) \quad S = \int d^2\mathbf{x} dz \left\{ \frac{i}{2} \left[\frac{\partial \phi}{\partial z} \phi^* - \frac{\partial \phi^*}{\partial z} \phi \right] + \phi^* \left[\nabla_t^2 - (V(\mathbf{x}) - \mu) + \gamma(\mathbf{x}) |\phi|^2 \right] \phi \right\}$$

El hamiltoniano correspondiente se obtiene a partir del lagrangiano \mathcal{L} [225, 226] y viene dado por la expresión:

$$H = -\phi^* \left[\nabla_t^2 - (V(\mathbf{x}) - \mu) \right] \phi - \gamma(\mathbf{x}) |\phi|^4.$$

6.3. Ordenación de largo alcance y coeficientes de Wannier

Sabemos que las soluciones estáticas con invariancia traslacional son funciones no lineales de Bloch en las coordenadas espaciales (véase teorema 5.2.2). Al igual que las lineales, las funciones no lineales de Bloch pueden expresarse en términos de las funciones de Wannier (para una definición véase apéndice C) localizadas en cada celda \hat{i} del dominio, tal y como se hace en el caso de cristales convencionales. Tal y como se describe en este apéndice, estas funciones se construyen a partir del espectro de funciones no lineales de Bloch. Por lo tanto, no se trata de las funciones de Wannier asociadas a las funciones de Bloch lineales, y en consecuencia las denominaremos funciones de Wannier no lineales. Debido a que las hemos construido a partir del espectro de funciones no lineales de Bloch asociadas al operador no lineal, vamos a utilizarlas para estudiar el comportamiento de funciones *próximas* a la solución autoconsistente traslacionalmente invariante con la que se genera el operador no lineal, ya que esperamos que éstas estén mejor descritas en términos de funciones de Wannier no lineales.

En el presente apartado, vamos a utilizar las funciones de Wannier no lineales para entender más profundamente la ordenación de largo alcance que presentan las soluciones con invariancia traslacional, así como para reescribir el hamiltoniano de modo que pueda ser utilizado en los siguientes apartados del capítulo para extraer conclusiones acerca de la dinámica del sistema considerado.

6.3.1. Representación de Wannier de las funciones de Bloch. Las funciones de Wannier se pueden obtener a partir de las de Bloch en la banda α y con distintos pseudomomentos \mathbf{p} , como:

$$W_\alpha(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}_i} f_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x}).$$

Como se observa, cada función de Wannier se construye en una de las celdas \hat{i} del dominio Ω . En el apéndice C se demuestra que las funciones de Wannier, en distintas bandas y celdas, son ortogonales, por lo que podemos desarrollar cualquier función en términos de las de Wannier [227, 228]. En particular, una función de Bloch de pseudomomento \mathbf{p} en la banda α se puede construir a partir de las funciones de

Wannier de la misma banda y localizadas en cada una de las celdas \hat{i} del dominio como:

$$f_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{\hat{i}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}_{\hat{i}}} W_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{i}}),$$

donde el sumatorio se extiende a todas las celdas del dominio. Por lo tanto, podemos, en general, escribir cualquier función $\phi(\mathbf{x}, z)$ en el dominio Ω como $\phi(\mathbf{x}, z) = \frac{1}{N} \sum_{\hat{i},\alpha} C_{\alpha,\hat{i}} W_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{i}})$.

Si ϕ es una función estática traslacionalmente simétrica y, por tanto, es una función no lineal de Bloch, los coeficientes serán $C_{\alpha,\hat{i}} = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}_{\hat{i}}}$. Para estas soluciones, los coeficientes del desarrollo de Wannier pueden escribirse como $C''_{\alpha,\hat{i}} = N^{-1} P^{\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}_{\hat{i}}}$ (véase apéndice C). En lo que sigue, en los desarrollos de Wannier utilizaremos siempre esta normalización de los coeficientes, ya que permiten introducir una propiedad de las soluciones no lineales, la potencia P , en los coeficientes, lo cual va a ser de gran utilidad en los razonamientos que vamos a desarrollar. En adelante escribiremos los coeficientes C'' simplemente como C .

En general, para una función ϕ solución no estática de 6.2.1, los coeficientes del desarrollo de Wannier serán función de z , es decir, $C_{\alpha,\hat{i}} = C_{\alpha,\hat{i}}(z)$.

NOTACIÓN 6.3.1. Denotaremos por $\eta_{\hat{i}}$ y $\varphi_{\hat{i}}$ la amplitud y fase, respectivamente, del coeficiente $C_{\alpha,\hat{i}}$. Además, definiremos

$$(6.3.1) \quad \eta_0(\mu) = \frac{P^{\frac{1}{2}}}{N}.$$

Con esta notación, los coeficientes de las soluciones estáticas pueden expresarse como $C_{\hat{i}} = \eta_0(\mu) e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}_{\hat{i}}}$, es decir, $\eta_{\hat{i}} = \eta_0(\mu)$, $\forall \hat{i}$. Nótese que la amplitud de la solución estacionaria es la misma en todas las celdas \hat{i} y está determinada por $\eta_0(\mu)$ (que depende de la potencia) mientras que su fase φ depende de \mathbf{p} .

Por lo tanto una solución estática con invariancia traslacional ϕ , aparece como una superposición de funciones idénticas localizadas en cada celda \hat{i} de la red, $\phi(\mathbf{x}, z) = \sum_{\hat{i}} C_{\hat{i}}(z) W_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{i}})$, con coeficientes de la expansión $C_{\hat{i}}(z) = \eta_0(\mu) e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}_{\hat{i}}}$. Estas funciones localizadas juegan el papel de las funciones de onda en los cristales convencionales [227, 228]. Los coeficientes $C_{\hat{i}}$ forman una red discreta de números complejos con idéntico módulo, $|C_{\hat{i}}| = \eta_0$, garantizando de este modo la invariancia traslacional y, en consecuencia, la ordenación de largo alcance. Por lo tanto, la solución estática ϕ puede ser entendida como una distribución simétrica de *iones de luz* con ordenación de largo alcance.

6.3.2. Hamiltoniano en términos de los coeficientes de Wannier. Supongamos que ϕ es una solución de 6.2.1 y expresémosla en función de la base de Wannier, tal y como hemos visto en el apartado anterior, con el fin de escribir la acción, el hamiltoniano y las ecuaciones de movimiento en términos de estos coeficientes.

Si escribimos la acción 6.2.3 en términos estos coeficientes, obtenemos para el primer término de la misma:

$$\begin{aligned}
 & \int_z \int_{\Omega} d^2 \mathbf{x} \frac{1}{2} i \left[\frac{\partial \phi}{\partial z} \phi^* - \frac{\partial \phi^*}{\partial z} \phi \right] = \\
 & \int_z \sum_{\alpha \uparrow, \beta \uparrow} \frac{1}{2} i \left[\frac{\partial C_{\alpha, \hat{i}}}{\partial z} C_{\beta, \hat{j}}^* - \frac{\partial C_{\beta, \hat{j}}^*}{\partial z} C_{\alpha, \hat{i}} \right] \int_{\Omega} d^2 x W_{\beta}^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{j}}) W_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{i}}) = \\
 & \int_z \sum_{\alpha, \hat{i}} \frac{1}{2} i \left[\dot{C}_{\alpha, \hat{i}} C_{\alpha, \hat{i}}^* - \dot{C}_{\alpha, \hat{i}}^* C_{\alpha, \hat{i}} \right],
 \end{aligned}$$

donde se ha tenido en cuenta las propiedades de ortogonalidad de las funciones de Wannier.

El segundo término de la acción 6.2.3 proporciona:

$$\int_{\Omega} d^2 \mathbf{x} \phi^* [\nabla_t^2 - (V(\mathbf{x}) - \mu)] \phi = \sum_{\alpha, \hat{i}; \beta, \hat{j}} C_{\beta, \hat{j}}^* C_{\alpha, \hat{i}} L_{\beta \hat{j}; \alpha \hat{i}},$$

donde,

$$L_{\beta \hat{j}; \alpha \hat{i}} \equiv - \int_{\Omega} d^2 \mathbf{x} W_{\beta}^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{j}}) (L_0 + \mu) W_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{i}}).$$

Y el tercer término de la acción 6.2.3 es

$$\int_{\Omega} d^2 \mathbf{x} \gamma(\mathbf{x}) |\phi|^4 = \sum_{\alpha, \hat{i}; \beta, \hat{j}; \gamma, \hat{k}; \delta, \hat{l}} C_{\beta, \hat{j}}^* C_{\delta, \hat{l}}^* C_{\alpha, \hat{i}} C_{\gamma, \hat{k}} T_{\beta, \hat{j} \delta, \hat{l}; \alpha, \hat{i} \gamma, \hat{k}},$$

donde,

$$T_{\beta, \hat{j} \delta, \hat{l}; \alpha, \hat{i} \gamma, \hat{k}} \equiv \int_{\Omega} d^2 \mathbf{x} \gamma(\mathbf{x}) W_{\beta}^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{j}}) W_{\delta}^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{l}}) W_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{i}}) W_{\gamma}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{k}}).$$

Por tanto, la acción se puede expresar como

$$(6.3.2) \quad S = \int_z \left\{ \sum_i \frac{1}{2} i \left[\dot{C}_i C_i^* - \dot{C}_i^* C_i \right] - \sum_{ij} L_{ij} C_j^* C_i + \sum_{ijkl} T_{ijkl} C_i^* C_j^* C_k C_l \right\}$$

con

$$L_{ij} \equiv - \int_{\Omega} W_i^* (L_0 + \mu) W_j \quad \text{y} \quad T_{ijkl} \equiv \int_{\omega} d^2 x \gamma(x) W_i^* W_j^* W_k W_l$$

donde, para simplificar la notación, se ha denotado $(\alpha, \hat{i}) \rightarrow i$, $(\beta, \hat{j}) \rightarrow j$, $(\gamma, \hat{k}) \rightarrow k$, $(\delta, \hat{l}) \rightarrow l$ y $W_{\alpha}(\vec{x} - \vec{x}_{\hat{i}})$ simplemente como W_i . En adelante se adoptará siempre esta notación.

A partir de la acción 6.3.2, se puede expresar el hamiltoniano en función de los coeficientes de Wannier como

$$(6.3.3) \quad H = \sum_{ij} L_{ij} C_i^* C_j - \sum_{ijkl} T_{ijkl} C_i^* C_j^* C_k C_l$$

Las ecuaciones de movimiento, obtenidas a partir de lagrangiano [225, 226], son

$$(6.3.4) \quad \boxed{i\dot{C}_i = \sum_j L_{ij}C_j - 2 \sum_{jkl} T_{i,j,k,l}C_j^*C_kC_l}$$

6.4. Fluctuaciones en torno a una solución estática. Magnetismo

Si la solución ϕ_μ^s es una solución estática de la ecuación 6.2.1 caracterizada por μ , los coeficientes de su desarrollo de Wannier tendrán la forma $C_i = N^{-1}P^{\frac{1}{2}}e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}_i} = \eta_0(\mu)e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}_i}$, con lo que éstos no presentarán ninguna dependencia en z . Sin embargo, en general, para soluciones no estáticas, los coeficientes serán funciones de z y escribiremos $C_i = C_i(z)$. Vamos a estudiar fluctuaciones pequeñas en torno a una solución estática ϕ_μ^s , es decir, cuando los coeficientes toman la forma

$$(6.4.1) \quad C_i(z) = (\eta_0(\mu) + \delta\eta_i(z))e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}_i + i\delta\varphi_i(z)},$$

con $|\delta\eta_i|, |\delta\varphi_i| \ll 1$. Si ϕ_μ^s es estable, debe ser un mínimo del funcional de energía (para una μ dada) asociado al hamiltoniano 6.3.3, $\varepsilon[\phi] = \int d^2\mathbf{x}H$. Por lo tanto, una fluctuación pequeña (como la definida por 6.4.1) en torno a este mínimo debe mantenerse cerca de este estado ϕ_μ^s . Con la evolución en z dicha fluctuación debe reducir su energía y potencia P debido las pérdidas radiativas asociadas a las ondas que escapan a través de la frontera del dominio Ω . Por lo tanto, la dinámica está dominada asintóticamente por fluctuaciones de baja energía que, eventualmente, pueden desaparecer dando lugar a una nueva solución estática. Las simulaciones numéricas presentadas en el apartado 5.3.2 presentan este comportamiento dinámico en el caso de las soluciones estables.

Por otra parte, se observa que la ecuación 6.2.1 es invariante bajo transformaciones globales de fase arbitrarias, $\phi \rightarrow e^{i\vartheta}\phi$, $\vartheta \in \mathbb{R}$. En cambio la amplitud, η_0 está fijada a cierto valor $\eta_0 \neq 0$ por la ordenación de largo alcance. En términos energéticos, variaciones globales de la fase no cambian la energía del sistema. Sin embargo, variaciones globales de la amplitud sí que pueden producir variaciones considerables de la energía del sistema. Este hecho determina una diferencia esencial entre las fluctuaciones de la amplitud, $\delta\eta_i$ y las de la fase, $\delta\varphi_i$, que se traduce en que la dinámica a energías cercanas a la correspondiente a una solución estática estable está dominada por las fluctuaciones de fase. El anterior razonamiento nos permite utilizar de ahora en adelante la siguiente hipótesis:

AXIOMA 6.4.1. (*Dominancia de fase en las fluctuaciones en torno a soluciones estáticas estables*). *Suponemos que las variaciones de la amplitud $\delta\eta_i(z)$ son despreciables frente a las variaciones de la fase $\delta\varphi_i(z)$. Por lo tanto, podemos asumir que, para z suficientemente grande (energías suficientemente próximas a las de la solución estática):*

$$(6.4.2) \quad \boxed{C_i(z) \stackrel{z \gg 1}{\simeq} \eta_0(\mu')e^{i\varphi_i(z)}}$$

donde $\varphi_i(z) = \mathbf{p}\mathbf{x}_i + \delta\varphi_i(z)$.

Nótese que hemos considerado η_0 en μ' distinto del μ de la solución estática ϕ_μ^s . Debido a que las fluctuaciones dan lugar a ondas radiantes que salen del dominio Ω , en la evolución con z necesariamente la norma decrece con z (no hay flujo hacia

el interior del dominio Ω). Debido a que $P(\mu)$ es monótona decreciente con μ (véase nota 6.1.1) se cumple que $\mu' > \mu$ (para el caso en que P sea monótona creciente, $\mu' < \mu$). Es decir asintóticamente, la amplitud queda fijada por un nuevo valor de la potencia inferior al de la solución estática sobre la que se calcula la perturbación, que está asociado a un nuevo autovalor μ' mayor que el autovalor de la solución estática inicial. Como la perturbación se supone pequeña, podemos considerar que $\mu' \approx \mu$ con lo que $\eta_0 = \eta_0(\mu') \approx \eta_0(\mu)$ y por lo tanto $C_i(z) \approx \eta_0(\mu')e^{i\varphi_i(z)}$.

NOTACIÓN 6.4.2. Denotaremos $\vec{S}_i = (\cos \varphi_i, \sin \varphi_i)$ y $\vec{S}_i^- = (\sin \varphi_i, -\cos \varphi_i)$

Vamos a obtener el hamiltoniano que describe las fluctuaciones pequeñas cerca de una solución estática. En primer lugar, sustituimos los coeficientes 6.4.2 en 6.3.3, con lo que obtenemos el siguiente hamiltoniano para $z \gg 1$:

$$H \stackrel{z \gg 1}{\simeq} \eta_0^2 \sum_{ij} L_{ij} e^{-i(\varphi_i - \varphi_j)} - \eta^4 \sum_{ijkl} T_{ijkl} e^{-i(\varphi_i + \varphi_j - \varphi_k - \varphi_l)}$$

NOTA 6.4.3. En lo que sigue nos ocuparemos de soluciones estáticas en la primera banda. Podemos suponer que $W = W^*$ ya que, debido a las propiedades de las funciones de Wannier, en el caso de que exista poca interacción entre la función en distintos pozos, se puede hacer la aproximación $W_i \approx \phi_i(x - x_i)$, donde $\phi_i(x - x_i)$ es el modo fundamental de un único pozo de potencial. Esta es la aproximación conocida como *tight binding approximation* (aproximación de enlace fuerte). En todo caso, en los desarrollos siguientes vamos a utilizar las funciones de Wannier no lineales calculadas a partir del espectro del operador, y no la función del solitón individual en un único pozo de potencial. Por lo tanto, los resultados serán válidos tanto para la aproximación de enlace fuerte como en otro caso, pero supondremos que las funciones de Wannier son reales. En definitiva, estamos suponiendo que éstas se corresponden con funciones de Bloch en la primera banda. Debido a esto se cumple que $L_{ij} = -\int_{\Omega} W_i(L_0 + 2n_0\mu)W_j \in \mathbb{R}$ y que $T_{ijkl} \in \mathbb{R}$. Además, en este caso la fase de la solución en cada una de las celdas i es constante y está determinada por φ_i .

Teniendo en cuenta las consideraciones anteriores, el hamiltoniano se transforma en:

$$H \simeq \eta_0 \sum_{ij} L_{ij} \cos(\varphi_i - \varphi_j) - \eta_0^4 \sum_{ijkl} T_{ijkl} \cos(\varphi_i + \varphi_j - \varphi_k - \varphi_l)$$

NOTA 6.4.4. Podríamos considerar igualmente soluciones en bandas superiores y entonces $\phi(x - x_i) \neq \phi^*(x - x_i)$ por lo que tendríamos funciones con $W_i \neq W_i^*$. En este caso el hamiltoniano no podría reducirse a esta forma. Sin embargo, no vamos a considerar este caso en la presente tesis.

Teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned} \cos(\varphi_i + \varphi_j - \varphi_k - \varphi_l) &= \cos\left[(\varphi_i - \varphi_k) + (\varphi_j - \varphi_l)\right] \\ &= \cos(\varphi_i - \varphi_k) \cos(\varphi_j - \varphi_l) - \sin(\varphi_i - \varphi_k) \sin(\varphi_j - \varphi_l) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\cos(\varphi_i - \varphi_j) &= \cos \varphi_i \cos \varphi_j + \sin \varphi_i \sin \varphi_j = (\cos \varphi_i, \sin \varphi_i) \begin{pmatrix} \cos \varphi_j \\ \sin \varphi_j \end{pmatrix} \\ &= \vec{S}_i \vec{S}_j,\end{aligned}$$

y que:

$$\begin{aligned}\sin(\varphi_i - \varphi_k) &= \sin \varphi_i \cos \varphi_k - \cos \varphi_i \sin \varphi_k = (\sin \varphi_i, -\cos \varphi_i) \begin{pmatrix} \cos \varphi_k \\ \sin \varphi_k \end{pmatrix} \\ &= \vec{S}_i \vec{S}_k = -\vec{S}_i \vec{S}_k,\end{aligned}$$

donde $\vec{S}_i = (S_x, S_y) = (\cos \varphi_i, \sin \varphi_i)$ y $\vec{S}_i = (\tilde{S}_x, \tilde{S}_y) = (\sin \varphi_i, -\cos \varphi_i)$, podemos escribir el hamiltoniano como:

$$(6.4.3) \quad \boxed{H \simeq \eta_0^2 \sum_{ij} L_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \eta_0^4 \sum_{ijkl} T_{ijkl} \left[(\vec{S}_i \vec{S}_k)(\vec{S}_j \vec{S}_l) + (\vec{S}_i \vec{S}_l)(\vec{S}_j \vec{S}_k) \right]}$$

Obtengamos las ecuaciones de movimiento que describen la dinámica de las fluctuaciones cerca de las soluciones estáticas. Si sustituimos los coeficientes 6.4.2 en las ecuaciones de movimiento 6.3.4 se obtiene:

$$\begin{aligned}-\eta_0 \dot{\varphi}_i e^{i\varphi_i} &= \eta_0 \sum_j L_{ij} e^{i\varphi_j} - 2\eta_0 \eta_0^2 \sum_{jkl} T_{ijkl} e^{i(\varphi_k + \varphi_l - \varphi_j)} \Rightarrow \\ \boxed{-\dot{\varphi}_i} &= \sum_j L_{ij} e^{i(\varphi_j - \varphi_i)} - 2\eta_0^2 \sum_{jkl} T_{jkl} e^{i(\varphi_k + \varphi_l - \varphi_i - \varphi_j)}\end{aligned}$$

Como L_{ij} y $T_{ijkl} \in \mathbb{R}$, si tomamos parte real e imaginaria de la anterior ecuación se obtiene:

$$\begin{aligned}\Im \quad &\rightarrow 0 = \sum_j L_{ij} \sin(\varphi_j - \varphi_i) - 2\eta_0^2 \sum_{jkl} T_{ijkl} \sin(\varphi_k + \varphi_l - \varphi_i - \varphi_j) \\ \Re \quad &\rightarrow -\dot{\varphi}_i = \sum_j L_{ij} \cos(\varphi_j - \varphi_i) - 2\eta_0^2 \sum_{jkl} T_{ijkl} \cos(\varphi_i + \varphi_j - \varphi_k - \varphi_l)\end{aligned}$$

6.4.1. Eliminación de los términos de autointeracción. Veamos cómo podemos simplificar la anterior expresión, absorbiendo los términos de autointeracción en una variación del autovalor μ de modo que podremos considerar sólo las interacciones entre celdas distintas.

Si $\hat{i} = \hat{j} = \hat{k} = \hat{l}$ la primera ecuación se cumple de modo trivial ya que $\sin(\varphi_i - \varphi_i) = 0$ y $\sin(\varphi_k + \varphi_l - \varphi_i - \varphi_i) = 0$. Luego, la ecuación para la parte imaginaria se puede escribir como:

$$\boxed{0 = \sum_j' L_{ij} \sin(\varphi_j - \varphi_i) - 2\eta_0^2 \sum_{jkl}' T_{ijkl} \sin(\varphi_k + \varphi_l - \varphi_i - \varphi_j)}$$

donde \sum' indica sumatorios que excluyen los términos de autointeracción.

Para obtener un resultado análogo para la ecuación de la parte real, veamos que ésta se puede escribir como:

$$-\dot{\varphi}_i = L_{ii} - 2\eta_0^2 T_{iii} + (\text{términos de interacción con otras celdas}),$$

donde se ha tenido en cuenta que $\cos(\varphi_i - \varphi_i) = 1$. Denotemos por TIOC a los términos que implican interacciones entre distintas celdas. Vamos a denotar por $\Delta\bar{\mu}_i$ a

$$\begin{aligned} \Delta\bar{\mu}_i &= L_{ii} - 2\eta_0^2 T_{iii} \\ &= - \int W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)(L_0 + \mu)W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) - \eta_0^2 \int \gamma W^4(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i). \end{aligned}$$

Dicho término es independiente de la posición \mathbf{x}_i debido a la invariancia traslacional y por lo tanto omitiremos el índice de la celda $\Delta\bar{\mu}_i = \Delta\bar{\mu}$. Luego

$$-n_0\dot{\varphi}_i = \Delta\bar{\mu} + (\text{TIOC}).$$

Consecuentemente, si definimos $\varphi'_i = \varphi_i - \Delta\bar{\mu}z$ entonces:

$$-\dot{\varphi}'_i = -\dot{\varphi}_i - \Delta\bar{\mu} = \Delta\bar{\mu} + (\text{TIOC}) - \Delta\bar{\mu} = (\text{TIOC}),$$

Por lo tanto, si tenemos en cuenta φ' podemos considerar sólo interacciones entre distintas celdas Ω_i . Considerando que los términos de interacción entre celdas distintas son invariantes traslacionales, es decir, $\varphi_i \rightarrow \varphi_i + \Delta\varphi$ la ecuación para φ' es la misma que para φ , pero sin los términos de autointeracción. Por lo tanto, la ecuación de movimiento para la parte real queda:

$$(6.4.4) \quad \boxed{-\dot{\varphi}'_i = \sum_j ' L_{ij} \cos(\varphi'_i - \varphi'_j) - 2\eta_0^2 \sum_{ikl} ' T_{ijkl} \cos(\varphi'_i + \varphi'_j - \varphi'_k - \varphi'_l)}$$

Nótese que los términos de autointeracción suponen una variación en la fase (ya que hemos definido $\varphi'_i = \varphi_i - \Delta\bar{\mu}z$). Veamos cómo, para las fluctuaciones, se puede absorber dicha variación en el autovalor. Como hemos visto la fluctuación respecto a la solución estacionaria tiene la forma $\psi(\mathbf{x}, z) = e^{i\mu'z}\phi(\mathbf{x})$ con $\phi(\mathbf{x}) = \sum_i \eta_0 e^{i\varphi_i(z)} W_i$. Como hemos escrito la fase como $\varphi_i = \varphi'_i + \Delta\bar{\mu}z$, podemos reescribir la solución estacionaria como $\psi(\mathbf{x}, z) = e^{i(\mu' + \Delta\bar{\mu})z} \sum_i \eta_0 e^{i\varphi'_i(z)} W_i = e^{i\mu''z} \phi'(\mathbf{x})$ con $\mu'' = \mu' + \Delta\bar{\mu}$ y $\phi'(\mathbf{x}) = \sum_i \eta_0 e^{i\varphi'_i(z)} W_i$, con lo que los términos de autointeracción quedan absorbidos en una variación del autovalor.

Razonando de modo análogo a como se ha procedido con las ecuaciones de movimiento, el hamiltoniano se puede simplificar aún más. Para ello escribámoslo como:

$$H = H_{AI} + H_I,$$

donde $H_{AI} \equiv$ término de autointeracción, viene dado por

$$\begin{aligned} H_{AI} &\equiv \eta_0^2 \left\{ \sum_i \left[L_{ii} |\vec{S}_i|^2 - \eta_0^2 T_{iii} |\vec{S}_i|^4 \right] \right\} = \left[|\vec{S}_i| = 1 \right] \\ &= \eta_0^2 \left\{ \sum_i \left[L_{ii} - \eta_0^2 T_{iii} \right] \right\}, \end{aligned}$$

y donde $H_I \equiv$ término de interacción, se puede expresar como:

$$(6.4.5) \quad \boxed{H_I = \eta_0^2 \sum'_{ij} L_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \eta_0^4 \sum'_{ijkl} T_{ijkl} \left[(\vec{S}_i \vec{S}_k)(\vec{S}_j \vec{S}_l) + (\vec{S}_i \vec{S}_k)(\vec{S}_j \vec{S}_l) \right]}$$

o en términos de la fase (y teniendo en cuenta de nuevo que consideramos funciones de Wannier reales):

$$(6.4.6) \quad H_I = \eta_0^2 \sum'_{ij} L_{ij} \cos(\varphi_i - \varphi_j) - \eta_0^4 \sum'_{ijkl} T_{ijkl} \left[\cos(\varphi_i - \varphi_k) \cos(\varphi_j - \varphi_l) - \sin(\varphi_i - \varphi_k) \sin(\varphi_j - \varphi_l) \right],$$

donde \sum' indica sumatorios que excluyen los términos de autointeracción.

El término de autointeracción puede eliminarse del mismo modo que se hizo en las ecuaciones de movimiento. Como $\sum_i [L_{ii} - \eta_0^2 T_{iii}] = \sum_i \Delta \bar{\mu}_i = N \Delta \bar{\mu}$ dicho término puede absorberse mediante la transformación del autovalor $\mu' \rightarrow \mu' - \Delta \bar{\mu} \equiv \mu''$. Consecuentemente, el término de autointeracción H_{AI} desaparece del hamiltoniano y $H = H_I$ si consideramos μ'' .

6.4.2. Magnetismo en cristales de luz. Modelo xy y magnetización.

Escribamos los vectores \vec{S}_i como $\vec{S}_i = \eta_0 e^{i\varphi_i(z)} = \eta_0 \vec{S}_i = \eta_0 (\cos \varphi_i + i \sin \varphi_i)$, de modo que el hamiltoniano 6.4.5 queda:

$$(6.4.7) \quad \boxed{H_I = \sum'_{ij} L_{ij} \vec{S}'_i \vec{S}'_j - \sum'_{ijkl} T_{ijkl} \left[(\vec{S}'_i \vec{S}'_k)(\vec{S}'_j \vec{S}'_l) + (\vec{S}'_i \vec{S}'_k)(\vec{S}'_j \vec{S}'_l) \right]}$$

que podemos identificar con un modelo de magnetismo en sólidos cristalinos, ya que

$$(6.4.8) \quad \boxed{H_I = \sum'_{ij} L_{ij} \vec{S}'_i \vec{S}'_j + O(\vec{S}')^4}$$

en el que los vectores \vec{S}'_i representan el *momento magnético o espín* del ión localizado en la celda \hat{i} -ésima de la red.

Los valores de L_{ij} y de T_{ijkl} dependen de integrales en las coordenadas transversales \mathbf{x} que involucran funciones de Wannier en distintas celdas en el caso del hamiltoniano 6.4.7 o de 6.4.8. Por lo tanto, se trata de integrales de superposición entre las funciones de Wannier en distintas celdas. Para funciones de Wannier suficientemente localizadas podemos suponer que $L_{ij} = -J \neq 0$ si las celdas \hat{i} y \hat{j} son las más cercanas en la red (*vecinos próximos*) y $L_{ij} = 0$ en otro caso. Tomar funciones de Wannier suficientemente localizadas es equivalente a hacer la aproximación de enlace fuerte (*tight binding approximation*) introducida en la nota 6.4.3. En estas condiciones el hamiltoniano 6.4.8 se transforma en el modelo xy de magnetismo:

$$(6.4.9) \quad \boxed{H_I = - \sum_{\langle \hat{i}, \hat{j} \rangle} J \vec{S}'_i \vec{S}'_j + O(\vec{S}')^4}$$

donde $\sum_{\langle i, \hat{j} \rangle}$ se extiende únicamente a vecinos próximos. Los cálculos numéricos de soluciones estacionarias cuando $F(|\psi|^2) = |\psi|^2$, permiten observar que las soluciones están más localizadas cuanto menor es el valor del autovalor μ , y en consecuencia cuanto mayor es la potencia P . Por lo tanto, el modelo xy es más válido cuanto menor es el autovalor μ .

Como sabemos, las soluciones estáticas tienen la forma $\phi_\mu^s(\mathbf{x}, z) = e^{i\mu z}\psi(\mathbf{x})$ con $\psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}u_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x})$ y las fluctuaciones en torno a esta solución se pueden expresar como $\psi(\mathbf{x}) = \sum_i \eta_0(\mu') e^{i\varphi_i(z)} W_i$ con $\varphi_i(z) = \mathbf{p}\mathbf{x}_i + \delta\varphi_i(z)$. Para la solución estática $\varphi_i = \mathbf{p}\mathbf{x}_i$ es independiente de z , $\mu' = \mu$ y $\eta_0(\mu) = \frac{P^{\frac{1}{2}}}{N}$. Como se ha mencionado más arriba, vamos a estudiar sólo aquellas soluciones estáticas que cumplen que la fase en cada celda Ω_i es constante, es decir, para las que las funciones de Wannier W_i son reales.

DEFINICIÓN 6.4.5. Denominaremos *solución estática tipo antiferromagnético* a una solución en la que la fase en la celda Ω_i se puede expresar en función de la fase en la celda Ω_j como:

$$(6.4.10) \quad \boxed{\varphi_j = \varphi_i + \pi d_n}$$

donde $d_n \equiv (n_x + n_y)$, $\hat{n} \equiv (\hat{j} - \hat{i}) a = n_x a \mathbf{i} + n_y a \mathbf{j}$ y $n_{x,y} \in [-\frac{N}{2}, \frac{N}{2}] \in \mathbb{N}$.

DEFINICIÓN 6.4.6. Denominaremos *solución estática tipo ferromagnética* a una solución en la que la fase en la celda Ω_i es igual a la fase en la celda Ω_j , es decir,

$$\boxed{\varphi_j = \varphi_i}, \forall \hat{i}, \hat{j}.$$

DEFINICIÓN 6.4.7. Diremos que una solución estática es una *excitación* del estado antiferromagnético si la fase en la celda Ω_i se puede expresar en función de la fase en la celda Ω_j como:

$$(6.4.11) \quad \boxed{\varphi_{\hat{j}} = \varphi_{\hat{i}} + \pi d_n - \Delta_{\hat{n}}\varphi(x_{\hat{i}})}$$

donde $\Delta_{\hat{n}}\varphi$ representa una variación de fase en la dirección del vector \hat{n} .

DEFINICIÓN 6.4.8. Igualmente, se puede hablar de excitaciones del estado fundamental ferromagnético si la fase en la celda Ω_i se puede expresar en función de la fase en la celda Ω_j como $\boxed{\varphi_{\hat{j}} = \varphi_{\hat{i}} - \Delta_{\hat{n}}\varphi(x_{\hat{i}})}$.

La solución tipo antiferromagnético definida con estructura de fase como 6.4.10 se presentó en la figura 5.2.1 y se corresponde con una solución con pseudomomento lineal entero $\mathbf{m} = (10, 10)$, mientras que la de tipo ferromagnético se ha presentado en la figura 5.2.6, y su pseudomomento lineal entero es $\mathbf{m} = (0, 0)$. Igualmente, algunas excitaciones fueron obtenidas en el capítulo anterior (figuras 5.2.2, 5.2.3, 5.2.4 y 5.2.5). En el caso de soluciones ferromagnéticas todos los espines están alineados en la misma dirección $\mathbf{S}_i = \eta_0 \mathbf{u}$ donde \mathbf{u} es un versor en una dirección

arbitraria. En el caso de soluciones antiferromagnéticas, los espines está alineados de modo alternado, $\mathbf{S}_i = \eta_0 (-1)^{i_x+i_y} \mathbf{u}$.

En un modelo xy el hamiltoniano H dependerá de los espines de la forma $\vec{S}_i \vec{S}_j = \cos(\varphi_i - \varphi_j)$ cuando \hat{i} y \hat{j} son celdas vecinas. Para un estado antiferromagnético, la diferencia de fases $\varphi_i - \varphi_j$ es siempre π entre celdas vecinas. Mientras que para un estado ferromagnético es siempre 0. Por lo tanto, cuando el estado fundamental es de tipo antiferromagnético, si J es negativo el hamiltoniano 6.4.9 es negativo y todas las excitaciones tienen energías mayores. Sin embargo, si J es positivo, entonces este hamiltoniano es positivo y las excitaciones tienen energías menores. En este último caso, para obtener la ordenación adecuada de las energías basta con tomar el hamiltoniano con el signo cambiado, lo cual no afecta a la dinámica del sistema.

En sistemas en los que el estado fundamental es de tipo ferromagnético, el hamiltoniano es positivo si $J < 0$ y negativo si $J > 0$ (nótese que en este caso el término $\vec{S}_i \vec{S}_j = \cos(\varphi_i - \varphi_j)$ es positivo). Por lo tanto, en el primer caso sería necesario invertir el signo del Hamiltoniano para obtener la ordenación adecuada de las energías.

El estudio de estabilidad numérico realizado en el apartado 5.3.2 del capítulo 5 indica que el estado fundamental debe ser de tipo antiferromagnético en medios autoenfocantes, $F(|\psi|^2) = |\psi|^2$, pues esta es la solución más estable. Esto se puede demostrar rigurosamente utilizando las herramientas de la teoría de campos, tal y como se hace en la ref. [224]. En este trabajo se calcula L_{ij} a vecinos próximos y se obtiene que es $L_{ij} < 0$. Luego $J > 0$ ya que se ha elegido $L_{ij} = -J$. Por lo tanto, con el convenio de signos tomado hasta ahora el hamiltoniano sería positivo. En consecuencia, para obtener la ordenación adecuada de las energías de las excitaciones sobre el estado fundamental antiferromagnético, tomaremos en adelante el hamiltoniano 6.4.7 con el signo invertido, lo cual no afecta a la dinámica del sistema.

Por lo tanto, debemos considerar la siguiente nota:

NOTA 6.4.9. Con la adecuada elección del signo del Hamiltoniano, el estado fundamental del sistema es la solución de tipo antiferromagnético en sistemas con no linealidad autoenfocante, $F(|\psi|^2) = |\psi|^2$, y la solución de tipo ferromagnético en sistemas con no linealidad desenfocante, $F(|\psi|^2) = -|\psi|^2$. Por lo tanto, como vamos a estudiar especialmente el primer caso, en adelante invertiremos el signo del hamiltoniano 6.4.7.

Vamos a introducir las siguientes cantidades utilizadas en los sistemas magnéticos:

DEFINICIÓN 6.4.10. Denominamos magnetización a $\mathbf{M} = \sum_i \mathbf{S}_i$ y magnetización alternada a $\mathbf{M}_a = \sum_i (-1)^{i_x+i_y} \mathbf{S}_i$.

En el caso ferromagnético $|\mathbf{M}| = N^2 \eta_0 \neq 0$ y $|\mathbf{M}_a| = 0$, mientras que en el antiferromagnético $|\mathbf{M}| = 0$ y $|\mathbf{M}_a| = N^2 \eta_0 \neq 0$.

6.5. Dinámica de fase

Los resultados anteriores nos llevan a preguntarnos si realmente podemos entender las soluciones ferromagnética, antiferromagnética y las excitaciones como ondas de espín del sistema considerado. En ese caso, deberíamos poder obtenerlas como soluciones de ecuaciones de movimiento características de las ondas de espín.

6.5.1. Hamiltoniano y rigidez. Para resolver esta cuestión, vamos a escribir el hamiltoniano para las excitaciones en términos de las diferencias de fase entre celdas $\Delta_{\hat{n}}\varphi(x_{\hat{i}})$ a partir de 6.4.6. Escribamos este hamiltoniano, con el signo cambiado según la nota 6.4.9, como $H = -(H_0 + H_1 + H_2)$, donde

$$H_0 = \eta_0^2 \sum_{ij} ' L_{ij} \cos(\varphi_{\hat{i}} - \varphi_{\hat{j}}),$$

$$H_1 = -\eta_0^4 \sum_{ijkl} ' T_{ijkl} \left[\cos(\varphi_{\hat{i}} - \varphi_{\hat{k}}) \cos(\varphi_{\hat{j}} - \varphi_{\hat{l}}) \right],$$

$$H_2 = -\eta_0^4 \sum_{ijkl} ' T_{ijkl} \left[-\sin(\varphi_{\hat{i}} - \varphi_{\hat{k}}) \sin(\varphi_{\hat{j}} - \varphi_{\hat{l}}) \right],$$

y vamos a reescribir cada uno de los tres términos de manera que sea más sencillo conseguir nuestro propósito. Introduzcamos, en primer lugar, la siguiente notación:

NOTACIÓN 6.5.1. Denotemos por \hat{r} al anillo de vectores \hat{n} centrado en el origen (es decir, en $\hat{i} = (0, 0)$) con el mismo módulo $|\hat{n}|$. Denotemos por $r \in \mathbb{N}$ un índice que denota los distintos anillos de vectores \hat{r} con diferente módulo cuando se ordenan dichos anillos de menor a mayor valor de $|\hat{n}|$. En adelante, vamos a utilizar los índices r en lugar de los índices i . Por ejemplo, $r = 1$ si $|\hat{r}| = a$, $r = 2$ si $|\hat{r}| = a\sqrt{2}$ y $r = 4$ si $|\hat{r}| = a\sqrt{5}$. Denotaremos \bar{d}_r y lo denominaremos degeneración del anillo de índice r , al número de vectores \hat{r} pertenecientes al anillo r , es decir, al número de celdas que pertenecen a dicho anillo. Por ejemplo, $\bar{d}_r = 4$ para $r = 1, 2$, y 3 pero $\bar{d}_r = 8$ para $r = 4$. Para diferenciar entre celdas distintas del mismo anillo utilizaremos el índice s . Finalmente, sea $\sigma \equiv (-1)^{d_n} = (-1)^{n_x + n_y}$ donde (n_x, n_y) determinan el vector \hat{n} considerado. Es fácil ver que σ es el mismo para todos los puntos del anillo r , por lo que denotaremos este parámetro como σ_r .

Veamos que los L_{ij} se puede expresar en términos de los vectores \hat{n} para cada i . Como sabemos, $L_{ij} = \int_{\Omega} d^2\mathbf{x} W_{\alpha}^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{i}})(L_0 + \mu)W_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{j}})$. Como L_0 es invariante bajo traslaciones podemos hacer la transformación $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{x}_{\hat{i}}$, con lo que

$$\begin{aligned} L_{ij} &= \int_{\Omega} d^2\mathbf{x} W_{\alpha}^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{0}})(L_0 + \mu)W_{\alpha}(\mathbf{x} - (\mathbf{x}_{\hat{j}} - \mathbf{x}_{\hat{i}})) \\ &= \int_{\Omega} d^2\mathbf{x} W_{\alpha}^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{0}})(L_0 + \mu)W_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{j}-\hat{i}}) \\ &= L_{\hat{0},(\hat{j}-\hat{i})}. \end{aligned}$$

NOTACIÓN 6.5.2. Denotaremos $L_{\hat{n}} = L_{\hat{0},(\hat{j}-\hat{i})} = L_{ij}$.

Asimismo, debido a la invariancia rotacional², L_{ij} es el mismo para todos los vectores \hat{n} del mismo anillo r en torno a i , por lo que denotaremos a L_{ij} , para todos los \hat{j} pertenecientes al anillo r en torno a \hat{i} , por L_r y por tanto $L_{\hat{n}} = L_r, \forall \hat{n}$ perteneciente al anillo r .

NOTA 6.5.3. En el límite continuo, es decir cuando $a \ll 1$, $\Delta_{\hat{n}}\varphi$ tiende a la derivada direccional $\Delta_{\hat{n}}\varphi = (\vec{\nabla}\varphi \cdot \hat{n}) + O(a)^2$, ya que

$$\Delta_{\hat{n}}\varphi(x_{\hat{i}}) = \varphi_{\hat{i}} - \varphi_{\hat{j}} = \varphi_{i_x, i_y} - \varphi_{j_x, j_y} = \varphi_{i_x, i_y} - \varphi_{j_x, i_y} - \varphi_{j_x, j_y} + \varphi_{j_x, i_y},$$

²El sistema considerado no sólo presenta invariancia traslacional, sino también invariancia rotacional C_{4v} .

o bien,

$$\frac{\varphi_{i_x, i_y} - \varphi_{j_x, i_y}}{a_x} a_x + \frac{\varphi_{j_x, i_y} - \varphi_{j_x, j_y}}{a_y} a_y \approx \vec{\nabla} \varphi \cdot (\hat{j} - \hat{i}) a,$$

donde $a_{x,y} = (j_{x,y} - i_{x,y})a$ luego $\Delta_{\hat{n}} \varphi(x_i) = \vec{\nabla} \varphi \cdot \hat{n} + O(a)$. Para justificar esta aproximación debemos tener en cuenta que las soluciones presentan ordenación de largo alcance y por lo tanto la longitud de correlación τ (la longitud para la que la solución de dos celdas distintas está correlacionada) es muy elevada. Por lo tanto, $\frac{a}{\tau} \rightarrow 0$.

Para simplificar el término H_0 tengamos en cuenta la expresión que relaciona las fases en distintas celdas (ec. 6.4.11). De esta manera podremos escribir este término en función de $\Delta_{\hat{n}} \varphi$. En primer lugar, tengamos en cuenta que para las excitaciones se cumple que

$$\cos(\varphi_i - \varphi_j) = \cos(\varphi_j - \varphi_i) = \cos(\pi d_n - \Delta_{\hat{n}} \varphi) = (-1)^{d_n} \cos(\Delta_{\hat{n}} \varphi).$$

Si desarrollamos en serie de Taylor el término $\cos(\Delta_{\hat{n}} \varphi)$ obtenemos:

$$\cos(\varphi_i - \varphi_j) = (-1)^{d_n} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k!} (\Delta_{\hat{n}} \varphi)^{2k} \right].$$

En el límite continuo ($a \ll 1$) podemos sustituir la diferencia de fases por la derivada direccional:

$$\cos(\varphi_i - \varphi_j) \stackrel{a \ll 1}{\approx} (-1)^{d_n} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k!} \left((\vec{\nabla} \varphi \cdot \hat{n}) + O(a)^2 \right)^{2k} \right].$$

Las excitaciones de baja energía se caracterizan por variaciones suaves de la fase respecto de la del estado fundamental y, en consecuencia, estarán caracterizadas por las derivadas de menor orden. Cualquier excitación con valores significativos de derivadas superiores mostrará variaciones de la fase más abruptas, lo cual implica energías mayores. Por tanto, podemos despreciar todas las derivadas de mayor orden en el desarrollo anterior:

$$(6.5.1) \quad \cos(\varphi_j - \varphi_i) \stackrel{a \ll 1}{\approx} (-1)^{d_n} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla} \varphi(\vec{x}_i) \cdot \hat{n} \right)^2 \right] + O(\vec{\nabla} \varphi)^4.$$

En el apéndice E, apartado E.1 se muestra cómo, utilizando la ecuación 6.5.1, la notación 6.5.2 y las propiedades de simetría, se puede expresar $\sum_{ij} L_{ij} \cos(\varphi_i - \varphi_j)$ como:

$$(6.5.2) \quad \boxed{\sum_j L_{ij} \cos(\varphi_i - \varphi_j) \approx \eta_0^2 \left(+A_1 - a^2 A_2 \left(\vec{\nabla} \varphi \right)^2 \right)}$$

donde $A_1 \equiv \sum_r \bar{d}_r L_r \sigma_r$, $A_2 \equiv \frac{1}{2} \sum_r L_r C_r \sigma_r$ y $C_r = 2kb_r^2$, para un anillo de degeneración $d_r = 4k$, $k \in \mathbb{Z}$ y $|\hat{r}| = b_r a$. Por otra parte, nótese que $O(\nabla \varphi) = O(a)$ ya que $\nabla \varphi \approx \frac{1}{a}(\varphi_j - \varphi_i)$.

Con esto podemos escribir el primer término H_0 del hamiltoniano 6.4.5 como

$$H_0 \equiv \eta_0^2 \sum'_{ij} L_{ij} \cos(\varphi_i - \varphi_j) \stackrel{a \ll 1}{\approx} \eta_0^2 \sum_i \left[+A_1 - a^2 A_2 \left(\vec{\nabla} \varphi(\vec{x}_i) \right)^2 \right].$$

Si consideramos que en el límite continuo $a \ll 1$ se puede sustituir $a^2 \sum \rightarrow \int d^2x$, se obtiene:

$$H_0 \approx \eta_0^2 \int_{\Omega} d^2x \left[+A_1 - a^2 A_2 \left(\vec{\nabla} \varphi(\vec{x}) \right)^2 \right],$$

o bien,

$$(6.5.3) \quad \boxed{H_0 \approx -\bar{H}_0 - \int_{\Omega} d^2x [+ \eta_0^2 A_2] \left(\vec{\nabla} \varphi \right)^2}$$

donde, por conveniencia hemos invertido el signo de \bar{H}_0 , es decir, $\bar{H}_0 \equiv -\eta_0^2 A_1 N^2$.

Teniendo en cuenta la ecuación 6.5.1 y la notación introducida en 6.5.1, se puede escribir H_1 como:

$$\begin{aligned} H_1 &\equiv -\eta_0^4 \sum'_{ijkl} T_{ijkl} \cos(\varphi_i - \varphi_k) \cos(\varphi_j - \varphi_l) \approx \\ &\approx -\eta_0^4 \sum'_{ij} \sum_{\hat{n}, \hat{n}'} T_{ij(i+n)(j+n')} (-1)^{d_n+d_{n'}} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla} \varphi(\vec{x}_i) \cdot \hat{n} \right)^2 \right] \cdot \\ &\quad \cdot \left[1 - \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla} \varphi(\vec{x}_j) \cdot \hat{n}' \right)^2 \right] + O(\nabla \varphi)^4, \end{aligned}$$

donde fijamos las celdas i, j y recorremos los vectores $\hat{n} = \hat{i} - \hat{k}$ y $\hat{n}' = \hat{j} - \hat{l}$, con lo que el sumatorio \sum'_{ijkl} se transforma en $\sum'_{ij} \sum_{\hat{n}, \hat{n}'}$ y permite escribir el tensor T_{ijkl} como $T_{ij(i+n)(j+n')}$.

En el apéndice E, apartado E.2 se muestra como escribir, en el límite continuo, el término H_1 como:

$$(6.5.4) \quad \boxed{H_1 = -\bar{H}_1 - \int_{\Omega} d^2x [\eta_0^4 B_1] \left(\vec{\nabla} \varphi \right)^2}$$

donde $B_1 = \sum_r T_r C_r \sigma_r$, $\sigma_r = (-1)^{d_r}$ de acuerdo con la notación 6.5.1 y \bar{T}_r se obtiene en dicho apéndice. Se ha tomado $\bar{H}_1 = \eta_0^4 \sum'_{ij} \sum_{\hat{n}, \hat{n}'} T_{ij(i+n)(j+n')}$ por conveniencia, es decir, se ha invertido este signo respecto al obtenido en el apéndice E.

Por último, para aproximar el último término observemos que, para las excitaciones:

$$\begin{aligned} \sin(\varphi_{\hat{k}} - \varphi_{\hat{i}}) &= \sin(\pi d_n - \Delta_{\hat{n}} \varphi_{\hat{i}}) = (-1)^{d_n+1} \sin(\Delta_{\hat{n}} \varphi_{\hat{i}}) = \\ &= (-1)^{d_n+1} \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{2k+1}}{(2k+1)!} (\Delta_{\hat{n}} \varphi_{\hat{i}})^{2k+1} \right] \approx (-1)^{d_n+1} \Delta_{\hat{n}} \varphi_{\hat{i}} + O(\Delta_{\hat{n}} \varphi_{\hat{i}})^3. \end{aligned}$$

En el límite continuo podemos tomar:

$$\sin(\varphi_{\hat{k}} - \varphi_{\hat{i}}) \stackrel{a \ll 1}{\approx} (-1)^{d_n+1} \left(\vec{\nabla} \varphi_{\hat{i}} \cdot \hat{n} \right) + O(a)^3.$$

Análogamente, $\sin(\varphi_{\hat{l}} - \varphi_{\hat{j}}) \stackrel{a \ll 1}{\approx} (-1)^{d_{n'}+1} \left(\vec{\nabla} \varphi_{\hat{j}} \cdot \hat{n}' \right) + O(a)^3$. Introduciendo esta aproximación del seno en el tercer término del hamiltoniano 6.4.6 tenemos:

$$H_2 = \eta_0^4 \sum'_{ijkl} (-1)^{d_n+d_{n'}} T_{ijkl} \left(\vec{\nabla} \varphi_{\hat{i}} \cdot \hat{n} \right) \left(\vec{\nabla} \varphi_{\hat{j}} \cdot \hat{n}' \right) + O(\nabla \varphi)^4$$

donde $\hat{n} = \hat{k} - \hat{i}$ y $\hat{n}' = \hat{l} - \hat{j}$.

Se demuestra en el apartado E.1 del apéndice E que

$$(6.5.5) \quad \boxed{H_2 = 0}$$

Teniendo en cuenta las ecuaciones 6.5.3, 6.5.4 y 6.5.5 se obtiene que el hamiltoniano de las excitaciones en el límite continuo es:

$$H \stackrel{\substack{a \ll 1 \\ z \gg 1}}{\approx} -H_0 - H_1 + O(a)^3 = \bar{H}_0 + \bar{H}_1 + \int_{\Omega} d^2 \mathbf{x} [\eta_0^2 A_2 + \eta_0^4 B_1] (\vec{\nabla} \varphi)^2 + O(a)^3,$$

es decir,

$$(6.5.6) \quad \boxed{H \approx \bar{H} + \int_{\Omega} d^2 \mathbf{x} \zeta_s (\vec{\nabla} \varphi)^2 + O(a)^3}$$

donde

$$(6.5.7) \quad \boxed{\zeta_s = \eta_0^2 A_2 + \eta_0^4 B_1}$$

con

$$\boxed{A_2 \equiv \frac{1}{2} \sum_r L_r C_r \sigma_r} \quad \text{y} \quad \boxed{B_1 \equiv \sum_r T_r C_r \sigma_r}$$

siendo $C_r = 2kb_r^2$, y

$$\boxed{\bar{H} = \bar{H}_0 + \bar{H}_1}$$

donde $\bar{H}_0 \equiv \eta_0^2 A_1 N^2$, $A_1 \equiv \sum_r \bar{d}_r L_r \sigma_r$ y $\bar{H}_1 = -\eta_0^4 \sum'_{ij} \sum_{\hat{n}, \hat{n}'} T_{ij(i+n)(j+n')}$.

NOTACIÓN 6.5.4. Denominamos a ζ_s rigidez de la onda de espín.

El hamiltoniano 6.5.6 define la dinámica de las ondas de espín, que como veremos se corresponden con las soluciones ferromagnética, antiferromagnética y con las de las excitaciones. Las particularidades de la dinámica del sistema se recogen en la rigidez ζ_s .

6.5.2. Acción, lagrangiano y ecuaciones de movimiento. Vamos a obtener la acción para las excitaciones de más baja energía. Según las ecuaciones 6.3.2 y 6.3.3,

$$S_L = \int dz \left\{ \sum_i \frac{1}{2} i [\dot{C}_i C_i^* - \dot{C}_i^* C_i] - H \right\}.$$

Consideremos fluctuaciones en los coeficientes como anteriormente, $C_i(z) = [\eta'_0 + \delta\eta_i(z)] e^{i[\varphi_0^i + \delta\varphi_i(z)]} \stackrel{z \gg 1}{\approx} \eta(z) e^{i\varphi_i(z)} \rightarrow \eta_0 e^{i\varphi_i(z)}$. La hipótesis de invariancia de fase se traduce en que consideramos despreciables las variaciones de amplitud frente a las de fase en las direcciones transversales, es decir, $\Delta_{\hat{n}} \eta_i(z) \ll \Delta_{\hat{n}} \varphi_i$, pero las variaciones en las direcciones axiales sí están permitidas, aunque cumplen que $\dot{\eta}(z) \ll \dot{\varphi}(z)$. Por lo tanto, como $\dot{C}_i C_i^* = \dot{\eta} e^{i\varphi_i(z)} \eta e^{-i\varphi_i(z)} + i\dot{\varphi}_i \eta e^{i\varphi_i(z)} \eta e^{-i\varphi_i(z)} = \dot{\eta} \eta + i\dot{\varphi}_i \eta^2$ y, análogamente, $\dot{C}_i^* C_i = \dot{\eta} \eta - i\dot{\varphi}_i \eta^2$ se obtiene que:

$$\begin{aligned} S_L &= \int dz \left\{ \sum_i \frac{1}{2} i [\dot{\eta} \eta + i\dot{\varphi}_i \eta^2 - \dot{\eta} \eta + i\dot{\varphi}_i \eta^2] - H \right\} \\ &= \int dz \left\{ - \sum_i \eta^2 \dot{\varphi}_i - H \right\}. \end{aligned}$$

En el límite continuo, $a^2 \sum_i \rightarrow \int_{\Omega}$ y

$$S_L = \int dz \left\{ \int_{\Omega} d^2 x \left(- \frac{\partial \varphi}{\partial z}(\mathbf{x}, z) \frac{\eta^2}{a^2} - H \right) \right\},$$

y sustituyendo la ecuación 6.5.6

$$\begin{aligned} S_L &\stackrel{a \ll 1}{\approx} \int dz \int_{\Omega} d^2 \mathbf{x} \left\{ - \frac{\eta^2(z)}{a^2} \frac{\partial \varphi}{\partial z}(\mathbf{x}, z) + [\eta^2(z) A_2 + \eta^4 B_1] (\vec{\nabla} \varphi)^2 \right\} \\ (6.5.8) \quad &+ O(a)^3 \end{aligned}$$

NOTA 6.5.5. Nótese que el factor $\frac{\eta^2}{a^2}$ es convergente cuando $a \rightarrow 0$ ya que $\frac{\eta^2}{a^2} \stackrel{z \gg 1}{\approx} \frac{\eta_0^2}{a^2} = \frac{P}{N^2 a^2} = \frac{P}{L^2} < \infty$, donde se ha tenido en cuenta la expresión 6.3.1. También es convergente cuando $D \rightarrow \infty$ después de ser integrado $\int_{\Omega} d^2 x \frac{\eta^2}{a^2} \approx D^2 \frac{P}{D^2} = P < \infty$, donde D define el tamaño del dominio Ω , tal y como hemos visto en 5.2.12.

Por lo tanto, el lagrangiano para las excitaciones de más baja energía es:

$$(6.5.9) \quad \mathcal{L} = - \frac{\eta^2(z)}{a^2} \frac{\partial \varphi}{\partial z}(\vec{x}, z) + [\eta^2 A_2 + \eta^4 B_1] (\vec{\nabla} \varphi)^2 + O(a)^3$$

Vamos a obtener las ecuaciones de movimiento para las excitaciones de más baja energía. Tal y como se muestra en el apartado F.1 del apéndice F tomando variaciones respecto a φ se obtiene:

$$-2 \frac{1}{a^2} \eta \dot{\eta} + 2(\eta^2 A_2 + \eta^4 B_1) \nabla^2 \varphi = 0.$$

Si ahora tenemos en cuenta que asintóticamente, $z \gg 1$, se cumple que $\dot{\eta} \approx 0$ debido a la dominancia de fase, entonces obtenemos:

$$\boxed{\nabla^2 \varphi = 0}$$

dado que $\rho_s = -\eta_0^2 A_2 - \eta_0^4 B_1 \neq 0$.

También se prueba en el apartado F.1 del apéndice F que tomando variaciones respecto a η se obtiene:

$$-\frac{2}{a^2} \eta \dot{\varphi} + (2\eta A_2 + 4\eta^3 B_1) (\vec{\nabla} \varphi)^2 = 0$$

Nótese que hemos tomado variaciones respecto a η porque ésta es variable con z , pese a la hipótesis de invariancia de fase. Como en cualquier caso asintóticamente se cumple que $\eta \stackrel{z \gg 1}{\approx} \eta_0$, tenemos:

$$-\frac{1}{a^2} \dot{\varphi} \approx -(A_2 + 2\eta_0^2 B_1) (\vec{\nabla} \varphi)^2 \Rightarrow \boxed{+\dot{\varphi} = \kappa (\vec{\nabla} \varphi)^2}$$

donde $\boxed{\kappa \equiv a^2 (A_2 + 2\eta_0^2 B_1)}$. Nótese que $\kappa = -a^2 \frac{1}{2\eta_0} \frac{\partial \zeta_s}{\partial \eta_0}$ involucra a L_r y T_r .

Por lo tanto, las ecuaciones de movimiento para las excitaciones son:

$$(6.5.10) \quad \boxed{\nabla^2 \varphi = 0 \quad \text{and} \quad \dot{\varphi} = \kappa (\vec{\nabla} \varphi)^2}$$

Tal y como se demuestra en el apartado F.2 del apéndice F, se puede obtener el mismo resultado razonando del modo similar a como se hizo para obtener el hamiltoniano 6.5.6 para simplificar las ecuaciones de movimiento 6.4.4.

6.5.3. Solución de las ecuaciones de movimiento. Las ecuaciones de movimiento para las excitaciones 6.5.10 son válidas asintóticamente ($z \gg 1$) debido a que las fluctuaciones de amplitud son mucho menores que las de fase. Además, dichas ecuaciones se han obtenido en el límite continuo ($a \ll 1$). Solucionando dichas ecuaciones obtendremos cómo se comporta la fase asintóticamente en el límite continuo. Estas ecuaciones admiten diferentes tipos de soluciones, pero nos vamos a centrar en aquellas que dan lugar a ondas de espín de tipo excitación topológica, en el sentido de que la fase varía continuamente en periodos de $k2\pi$, $k \in \mathbb{Z}$. Dejamos otro tipo de soluciones para estudios posteriores. Este tipo de soluciones de las ecuaciones de movimiento 6.5.10 tienen la forma:

$$(6.5.11) \quad \boxed{\varphi(\mathbf{x}, z) = \Delta\mu z + \mathbf{p}\mathbf{x}} \quad \text{y} \quad \boxed{\Delta\mu = \kappa \mathbf{p}^2}$$

con $\Delta\mu \in \mathbb{R}$ y $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^2$. Basta con notar que $\vec{\nabla} \varphi = \mathbf{p}$, $\nabla^2 \varphi = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \varphi = \vec{\nabla} \cdot \mathbf{p} = 0$ y que $\dot{\varphi} = \Delta\mu = \kappa \mathbf{p}^2 = \kappa (\vec{\nabla} \varphi)^2$. Nótese que $\Delta\mu$ no tiene que ver con el incremento en μ introducido en 6.4.4 para absorber los términos de autointeracción. La cantidad $\Delta\mu$ representa una variación sobre la constante de propagación μ de la solución antiferromagnética o ferromagnética sobre la que se está calculando la excitación. Veamos que asintóticamente estas soluciones tienden a ondas de Bloch no lineales de pseudomomento \mathbf{p} y constante de propagación $\mu + \Delta\mu$. Para ello vamos a obtener la versión discreta de 6.5.11 para una excitación sobre una solución antiferromagnética (en lo que sigue no vamos considerar excitaciones sobre soluciones ferromagnéticas). En la nota 6.5.3, se demuestra que $\Delta_{\hat{n}} \varphi = (\vec{\nabla} \varphi \cdot \hat{n}) + O(a)^2$ y consecuentemente

$\Delta_{\hat{n}}\varphi_{\hat{j}} \approx \vec{\nabla}\varphi\hat{n} = \mathbf{p}\hat{n}$. Por tanto, considerando la ecuación 6.4.11, la fase de una excitación sobre una solución antiferromagnética cumple que:

$$\boxed{\varphi_{\hat{j}} = \varphi_{\hat{i}} + \pi d_n - \mathbf{p}\hat{n}}$$

donde, como anteriormente, $\hat{n} = (\hat{j} - \hat{i})a$, $\hat{n} = a(j_x - i_x, j_y - i_y) = a(n_x, n_y)$ y $d_n = (n_x + n_y)$. Finalmente, se puede expresar la fase en la celda \hat{j} -ésima en función de la fase en la celda $\hat{0}$ -ésima a partir del valor de \mathbf{p} . Basta con tomar $\hat{i} = 0$ en la anterior ecuación:

$$(6.5.12) \quad \boxed{\varphi_{\hat{j}} = \varphi_{\hat{0}} + \pi(j_x + j_y) - a \cdot \hat{j}\mathbf{p}}$$

Por tanto las excitaciones sobre un estado antiferromagnético tienen asintóticamente la forma $\phi(\mathbf{x}) = \sum_j \eta_0(\mu') e^{i\varphi_{\hat{0}} + \pi(j_x + j_y) - a \cdot \hat{j}\mathbf{p}} W_j$ con constante de propagación igual a $\mu + \Delta\mu$.

Veamos que \mathbf{p} tiene el significado de un pseudomomento lineal. Para ello, suponemos que las condiciones de contorno son periódicas en los extremos del dominio Ω . Se debe cumplir que:

$$\left[\begin{array}{l} \varphi_{(N,0)} = \varphi_{(0,0)} + 2\pi m_x \\ \varphi_{(0,N)} = \varphi_{(0,0)} + 2\pi m_y \end{array} \right],$$

con $m_{x,y} \in \mathbb{Z}$. En el caso de excitaciones sobre el estado antiferromagnético, si comparamos con la ecuación 6.5.12 tenemos que $j_x = N$, $j_y = 0$ en el primer caso y $j_x = 0$, $j_y = N$ en el segundo, con lo que se obtiene:

$$\left. \begin{array}{l} \varphi_{(N,0)} = \varphi_{(0,0)} + \pi N - p_x N a = \varphi_{(0,0)} + 2\pi m_x \\ \varphi_{(0,N)} = \varphi_{(0,0)} + \pi N - p_y N a = \varphi_{(0,0)} + 2\pi m_y \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} ap_x = \pi - \frac{2\pi m_x}{N} \\ ap_y = \pi - \frac{2\pi m_y}{N} \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{a\mathbf{p} = \mathbf{p}_\pi - \frac{2\pi}{N}\mathbf{m}}$$

donde $\mathbf{p}_\pi \equiv (\pi, \pi)$ y $\mathbf{m} = (m_x, m_y)$. Como la fase del estado fundamental antiferromagnético cumple con la definición 6.4.10, la periodicidad impone que N sea par, luego se puede expresar como $N = 2\bar{N}$ con $\bar{N} \in \mathbb{N}$. Esto permite expresar $a\mathbf{p}$ de otro modo:

$$a\mathbf{p} = \frac{(N\mathbf{p}_\pi - 2\pi\mathbf{m})}{N} = \frac{1}{\bar{N}} [(2\pi\bar{N}, 2\pi\bar{N}) - 2\pi(m_x, m_y)] =$$

$$= \frac{2\pi}{\bar{N}} [(\bar{N}, \bar{N}) - (m_x, m_y)] = \frac{2\pi}{\bar{N}} \left[\left(\frac{N}{2} - m_x, \frac{N}{2} - m_y\right) \right] \Rightarrow$$

$$\boxed{a\mathbf{p} = \frac{2\pi}{N}\bar{\mathbf{m}}}$$

con $\bar{\mathbf{m}} = (\bar{m}_x, \bar{m}_y) = \left(\frac{N}{2} - m_x, \frac{N}{2} - m_y\right)$, o bien,

$$\boxed{\bar{\mathbf{m}} = \frac{N}{2\pi}\mathbf{p}_\pi - \mathbf{m}}$$

Por lo tanto, la fase de las excitaciones en el caso discreto puede escribirse como:

$$(6.5.13) \quad \boxed{\varphi_{\hat{j}} = \varphi_{\hat{0}} + \pi(j_x + j_y) - \frac{2\pi}{N} \bar{\mathbf{m}} \cdot \hat{j} = \varphi_{\hat{0}} + \mathbf{p}_\pi \cdot \hat{j} - \frac{2\pi}{N} \bar{\mathbf{m}} \cdot \hat{j}}$$

o bien, teniendo en cuenta que $\bar{\mathbf{m}} = \frac{N}{2\pi} \mathbf{p}_\pi - \mathbf{m}$, la anterior ecuación se puede escribir como:

$$\boxed{\varphi_{\hat{j}} = \varphi_{\hat{0}} + \frac{2\pi}{N} \mathbf{m} \cdot \hat{j}}$$

Nótese que $\bar{\mathbf{m}}$ vale $(0, 0)$ para el estado antiferromagnético y va creciendo para excitaciones mayores, mientras que \mathbf{m} no tiene este sentido. Veremos la interpretación de \mathbf{m} más adelante.

Tal y como definimos más arriba una solución estática tiene la forma $\phi_s(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} u_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x})$ y por lo tanto cumple que $\frac{\partial \phi_s}{\partial z} = 0$. Para las excitaciones se cumple que $\phi_s(\mathbf{x}) = e^{i\Delta\mu z} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} u_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x})$ ya que su fase se expresa como $\varphi(\mathbf{x}, z) = \Delta\mu z + \mathbf{p}\mathbf{x}$. Luego cumplen que $\frac{\partial \phi_s}{\partial z} = \Delta\mu$. Es decir, son soluciones estacionarias de la ecuación:

$$[L_0 + L_1] \phi = (\Delta\mu + \mu) \phi.$$

Así pues podemos obtener predicciones para $\Delta\mu$ y consecuentemente para las energías de las excitaciones. Dado que $\Delta\mu_{\bar{\mathbf{m}}} \simeq \kappa \mathbf{p}^2$ y considerando las expresiones de \mathbf{m} y $\bar{\mathbf{m}}$ para el caso antiferromagnético se puede expresar la variación $\Delta\mu$ sobre la constante de propagación μ de la solución antiferromagnética en función de \mathbf{p} como:

$$(6.5.14) \quad \boxed{\Delta\mu_{\bar{\mathbf{m}}} \simeq \kappa \mathbf{p}^2 = \frac{\kappa}{a^2} \left(\frac{2\pi}{N}\right)^2 \bar{\mathbf{m}}^2} \quad \text{o} \quad \boxed{\Delta\mu_{\mathbf{m}} \simeq \frac{\kappa}{a^2} \left(\frac{2\pi}{N}\right)^2 \left(\frac{N}{2\pi} \mathbf{p}_\pi - \mathbf{m}\right)^2}$$

Por otra parte, introduciendo las expresiones de \mathbf{m} y $\bar{\mathbf{m}}$ en 6.5.6 se obtiene:

$$\begin{aligned} E_{\bar{\mathbf{m}}} &\simeq E_0 + \int_{\Omega} d^2x \zeta_s \mathbf{p}^2 = E_0 + \zeta_s D^2 \left(\frac{2\pi}{N}\right)^2 \frac{1}{a^2} \bar{\mathbf{m}}^2 = \\ &= E_0 + 4\pi^2 \zeta_s \left(\frac{N}{2\pi} \mathbf{p}_\pi - \mathbf{m}\right)^2 = E_{\mathbf{m}}, \end{aligned}$$

en el caso antiferromagnético (se ha tenido en cuenta que $D^2 = N^2 a^2$).

OBSERVACIÓN 6.5.6. Para que el hamiltoniano sea negativo y las excitaciones tengan una energía mayor que la del estado fundamental antiferromagnético, debe cumplirse que $\zeta_s < 0$. Como vimos en el estudio del modelo xy , en la ref. [224] se demostró que L_{ij} es negativo y para obtener que las energías se ordenan adecuadamente fue necesario invertir el signo del hamiltoniano (véase nota 6.4.9). En la expresión de la rigidez ζ_s 6.5.7 se observa que su signo es el mismo que L_{ij} y por lo tanto la elección de los signos es la correcta.

OBSERVACIÓN 6.5.7. En el caso antiferromagnético $\bar{\mathbf{m}}$ tiene el sentido de un vector de excitación, ya que cuanto mayor es $|\bar{\mathbf{m}}|$ mayor es la energía. Además, en este caso, la variable \mathbf{m} juega el papel de la variable pseudomomento lineal entero \mathbf{m}

introducida en el capítulo anterior, por lo que la denominaremos carga topológica o pseudomomento lineal entero. Esta cantidad presentaba una cota máxima según el teorema 5.2.13. Vamos a obtener de otro modo la cota máxima para $\bar{\mathbf{m}}$ y, consecuentemente, para \mathbf{m} . Como φ_i es una variable angular, $\bar{\mathbf{m}}$ es equivalente a $\bar{\mathbf{m}} \mp \frac{N}{\pi} \mathbf{p}_\pi$, ya que ambos vectores dan lugar a la misma solución $\phi_s(\mathbf{x}, z) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} u_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x})$ y, por tanto, en la ecuación 6.5.13 se verifica que:

$$\varphi'_j = \varphi_0 + \mathbf{p}_\pi \hat{j} - \frac{2\pi}{N} (\bar{\mathbf{m}} \mp \frac{N}{\pi} \mathbf{p}_\pi) \cdot \hat{j} = \varphi_j \pm 2\mathbf{p}_\pi \hat{j} = \varphi_j \pm 2\pi(j_x + j_y) = \varphi_j.$$

Los mismos argumentos pueden aplicarse a \mathbf{m} . En consecuencia, E y $\Delta\mu$ son funciones periódicas de \bar{m}_x y \bar{m}_y (o de m_x y m_y) con periodo N . Esto es consistente con los resultados del capítulo anterior respecto a este tipo de soluciones estacionarias. Por lo tanto,

$$E(m_x \mp N, m_y \mp N) = E(m_x, m_y) \quad \text{y} \quad \Delta\mu(m_x \mp N, m_y \mp N) = \Delta\mu(m_x, m_y).$$

Igualmente, E y $\Delta\mu$ son funciones periódicas de \bar{m}_x y \bar{m}_y con periodo N :

$$E(\bar{m}_x \mp N, \bar{m}_y \mp N) = E(\bar{m}_x, \bar{m}_y) \quad \text{y} \quad \Delta\mu(\bar{m}_x \mp N, \bar{m}_y \mp N) = \Delta\mu(\bar{m}_x, \bar{m}_y).$$

Vamos a definir E y $\Delta\mu$ en el intervalo de \mathbf{m} :

$$\boxed{-\frac{N}{2} \leq m_x, m_y \leq \frac{N}{2}}$$

Como $\mathbf{m} = (m_x, m_y) = (\frac{N}{2} - \bar{m}_x, \frac{N}{2} - \bar{m}_y)$, esto significa que $\bar{\mathbf{m}}$ está definida en el intervalo:

$$\boxed{0 \leq \bar{m}_x, \bar{m}_y \leq N}$$

Además, en el apéndice G se demuestra que tanto la energía como la variación del autovalor, $\Delta\mu$, dependen del módulo de \mathbf{m} , es decir, podemos escribir:

$$\begin{aligned} E_m &= E_0 + 4\pi^2 \zeta_s \left[\frac{N}{2\pi} \mathbf{q}_\pi - \mathbf{m} \right]^2 \\ \Delta\mu_m &= \frac{\kappa}{a^2} \left(\frac{2\pi}{N} \right)^2 \left[\frac{N}{2\pi} \mathbf{q}_\pi - \mathbf{m} \right]^2, \end{aligned}$$

donde ahora \mathbf{m} denota $\mathbf{m} \equiv (|m_x|, |m_y|)$ y $m_{x,y} \in [-\frac{N}{2}, \frac{N}{2}]$.

Si el estado fundamental es ferromagnético, se puede razonar de manera análoga. En este caso la \mathbf{m} juega el papel tanto de carga topológica como de vector de excitación y se obtiene que $\zeta_s > 0$.

6.5.4. Comprobación numérica. En el caso autoenfocante, $F(|\phi|^2) = |\phi|^2$, donde el estado fundamental es de tipo antiferromagnético, el vector carga topológica $\mathbf{m} = (|m_x|, |m_y|)$ juega el papel del pseudomomento lineal entero tal como fue definido en el capítulo anterior. En dicho capítulo se obtuvo, en el marco de las funciones de Bloch no lineales, las cotas para los valores permitidos de \mathbf{m} , es decir, se obtuvo la condición $-\frac{N}{2} \leq m_x, m_y \leq \frac{N}{2}$.

Para el caso presentado en el anterior capítulo elegimos $N = 20$ y, por lo tanto, $-10 \leq m_x, m_y \leq 10$. En adelante vamos a considerar que $m_x = m_y$. Luego

\bar{m}_x	m_x	μ	$\frac{\mu_{\bar{m}_x} - \mu_0}{\mu_{\bar{m}_x} - \mu_0}$	\bar{m}_x^2	error (%)
0	10	-0.13354985633424	0	0	0
1	9	-0.13337851681737	1	1	0
2	8	-0.1328548668358	4.06	4	1.40 %
3	7	-0.13203000824346	8.87	9	1.44 %
4	6	-0.13097684114802	15.02	16	6.14 %

CUADRO 1. Autovalor μ en función del pseudomomento para potencia $P = 4500$ en un sistema con $N = 20$.

\bar{m}_x	m_x	μ_{m_x}	$\frac{\mu_{\bar{m}_x} - \mu_0}{\mu_{\bar{m}_x} - \mu_0}$	\bar{m}_x^2	error (%)
0	15	-0.15227744654643	0	0	0
1	14	-0.15218319759774	1	1	0
2	13	-0.15190375897473	3.96	4	1.00 %
3	12	-0.15144884278230	8.79	9	2.30 %
4	11	-0.15083504526524	15.30	16	4.38 %
5	10	-0.15008415567150	23.27	25	6.69 %

CUADRO 2. Autovalor μ en función del pseudomomento para potencia P constante en un sistema con $N = 30$.

los valores permitidos para $\mathbf{m} = (|m_x|, |m_y|)$, son $\mathbf{m} = (0, 0), \dots, (10, 10)$ y se corresponden con valores del vector de excitación $\bar{\mathbf{m}} = (10, 10), \dots, (0, 0)$, si $m_{x,y} > 0$ y $\bar{\mathbf{m}} = (20, 20), \dots, (10, 10)$, si $m_{x,y} < 0$, ya que $\bar{\mathbf{m}} = \frac{N}{2} - \mathbf{m}$. Nótese que el caso aniferromagnético presenta pseudomomento lineal entero $\mathbf{m} = (10, 10)$, que se corresponde con el vector excitación $\bar{\mathbf{m}} = (0, 0)$.

Utilizando las soluciones estacionarias presentadas anteriormente, vamos a comprobar numéricamente la expresión 6.5.14. Para ello se ha fijado la potencia P y se ha calculado la μ de las soluciones con distinto pseudomomento. Como $m_x = m_y$, podemos escribir:

$$\Delta\mu_{\bar{m}} \simeq \frac{\kappa}{a^2} \left(\frac{2\pi}{N} \right)^2 \bar{\mathbf{m}}^2 = \frac{\kappa}{a^2} \left(\frac{2\pi}{N} \right)^2 (\bar{m}_x^2 + \bar{m}_y^2) = \frac{2\kappa}{a^2} \left(\frac{2\pi}{N} \right)^2 \bar{m}_x^2.$$

Luego, para $\bar{m}_x > 1$, tenemos:

$$(6.5.15) \quad \frac{\Delta\mu_{\bar{m}_x} - \Delta\mu_0}{\Delta\mu_1 - \Delta\mu_0} = \frac{\frac{2\kappa}{a^2} \left(\frac{2\pi}{N} \right)^2 (\bar{m}_x^2 - 0)}{\frac{2\kappa}{a^2} \left(\frac{2\pi}{N} \right)^2 - 0} = \bar{m}_x^2.$$

En el cuadro 1 se presenta el autovalor μ para distintos pseudomomentos lineales enteros a P fija. Se ha obtenido la relación $\frac{\Delta\mu_{\bar{m}_x} - \Delta\mu_0}{\Delta\mu_1 - \Delta\mu_0}$ y, como se observa, se obtiene aproximadamente \bar{m}_x^2 . Además, se aleja tanto más de este resultado cuanto más alejadas están las excitaciones del estado fundamental antiferromagnético.

En el cuadro 2 se presenta el autovalor μ a P fija, para las soluciones estacionarias de distinto pseudomomento de un sistema con $N = 30$, es decir con 30×30 celdas. En este caso la solución antiferromagnética presenta pseudomomento lineal entero $\mathbf{m} = (15, 15)$. Nuevamente, la relación $\frac{\Delta\mu_{\bar{m}_x} - \Delta\mu_0}{\Delta\mu_1 - \Delta\mu_0}$ de aproxima a \bar{m}_x^2 , aumentando el error conforme crece \bar{m}_x .

6.6. Flujo de las soluciones estáticas

En este apartado vamos a definir una variable, el flujo, que nos permitirá entender una diferencia fundamental entre las soluciones ferromagnética o antiferromagnética y el resto de excitaciones. Concluiremos que en la realidad física, es decir, en un dominio finito Ω , sólo las dos primeras son realizables en ausencia de fuentes externas. Sin embargo, es posible simular las excitaciones en un caso realista acoplando el sistema a un campo exterior, tal y como veremos más adelante.

DEFINICIÓN 6.6.1. Se define el *flujo* de una solución con densidad constante como:

$$\mathbf{V}(\mathbf{x}) = \nabla\varphi(\mathbf{x}),$$

es decir, $\mathbf{V} = (V_x, V_y) = (\frac{\partial\varphi}{\partial x}, \frac{\partial\varphi}{\partial y})$.

Nótese que esta cantidad es proporcional al flujo definido como

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \frac{i}{2} (\phi^* \nabla\phi - \phi \nabla\phi^*).$$

Efectivamente, para soluciones con invariancia traslacional de la forma $\phi = \eta_0 e^{i\varphi}$ se cumple que $\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \eta_0^2 \nabla\varphi$, luego $\mathbf{V}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{J}(\mathbf{x})}{\eta_0^2}$.

En adelante, vamos a considerar que la solución está definida en un dominio unidimensional, únicamente para $x \in [-\frac{D}{2}, \frac{D}{2}]$. Los resultados anteriores se aplican a este caso de manera trivial. En estas condiciones, consideremos el modelo *xy* 6.4.9 en el caso unidimensional y teniendo en cuenta que J es una cantidad real y que por tanto podemos escribirlo como³:

$$(6.6.1) \quad H \approx J \sum_{\langle i_x, j_x \rangle} \cos(\varphi_{i_x} - \varphi_{j_x})$$

donde, como antes, $\sum_{\langle i_x, j_x \rangle}$ se extiende únicamente a vecinos próximos, es decir, a celdas contiguas. Si utilizamos la definición 6.6.1 en el hamiltoniano 6.6.1, obtenemos, $\forall i_x$:

$$(6.6.2) \quad V_x = \frac{\partial H}{\partial \varphi_{i_x}} = J \sin(\varphi_{i_x+1} - \varphi_{i_x}) - J \sin(\varphi_{i_x} - \varphi_{i_x-1}).$$

Para una solución estacionaria se cumple que $\frac{\partial H}{\partial \varphi_{i_x}} = 0$, pues no hay radiación fuera del dominio, por lo que:

$$(6.6.3) \quad \sin(\varphi_{i_x+1} - \varphi_{i_x}) = \sin(\varphi_{i_x} - \varphi_{i_x-1}).$$

Denominemos a $\varphi_{i_x+1} - \varphi_{i_x} = \Delta\varphi$. Como sabemos, para las soluciones ferromagnéticas $\Delta\varphi = 0$, para las soluciones antiferromagnéticas $\Delta\varphi = \pi$ y, en general, para una excitación de pseudomomento lineal entero m_x es $\Delta\varphi = \frac{2\pi m_x}{N}$.

La condición 6.6.3 se puede cumplir para todas las soluciones si consideramos condiciones de contorno periódicas, y por lo tanto, $\varphi_{0_x} = \varphi_{N_x}$. Sin embargo, en los casos más reales, en los que la solución se encuentra en un dominio cerrado Ω y, por tanto, no podemos considerar condiciones periódicas sino sólo condiciones

³Nótese que $L_{ij} = -J$ y que se invierte el signo del hamiltoniano 6.4.9, en consonancia con la nota 6.4.9.

sobre el valor de la función o de su derivada, esta condición sólo es realizable para las soluciones ferromagnéticas y antiferromagnéticas. En estos casos $\sin(\varphi_{N_x} - \varphi_{N_x-1}) = 0$ o bien $\sin(\varphi_{0_x} - \varphi_{-1_x}) = 0$ en la frontera, dado que en el exterior suponemos que el campo se anula. Debido a estas condiciones en la frontera y a la condición 6.6.3 se cumple que $\sin(\varphi_{i_x+1} - \varphi_{i_x}) = 0, \forall i_x$. Sin embargo, para el resto de excitaciones $\sin(\varphi_{i_x+1} - \varphi_{i_x}) \neq 0$.

Veamos cómo podemos mimetizar las condiciones de contorno periódicas en un contexto físico. Vamos a considerar que el sistema anterior se encuentra acoplado a un campo externo no nulo en las celdas de los extremos del dominio, es decir, en $i_x = 0$ o bien en $i_x = N - 1$, lo cual puede modelizarse mediante el siguiente hamiltoniano:

$$(6.6.4) \quad H = J_{0_x} \mathbf{h}_{0_x} \vec{S}_{0_x} + J_{(N-1)_x} \mathbf{h}_{(N-1)_x} \vec{S}_{(N-1)_x} + \sum_{\langle i_x, j_x \rangle} J \vec{S}_{i_x} \vec{S}_{j_x},$$

donde $\vec{S}_{i_x} = (\cos \varphi_{i_x}, \sin \varphi_{i_x})$, $J_{0_x}, J_{(N-1)_x} \in \mathbb{R}$, $\mathbf{h}_{0_x} = h_0 (\cos \alpha, \sin \alpha)$, $\mathbf{h}_{(N-1)_x} = h_{(N-1)_x} (\cos \beta, \sin \beta)$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Si tenemos en cuenta que todas las cantidades son reales, podemos escribir el anterior hamiltoniano como:

$$\begin{aligned} H &= J_{0_x} h_0 (\cos(\varphi_{0_x} - \alpha)) + J_{(N-1)_x} h_{(N-1)_x} (\cos(\beta - \varphi_{(N-1)_x})) \\ &+ \sum_{\langle i_x, j_x \rangle} J \cos(\varphi_{i_x} - \varphi_{i_x-1}). \end{aligned}$$

Nótese que $J_{0_x} \mathbf{h}_{0_x}$ y $J_{(N-1)_x} \mathbf{h}_{(N-1)_x}$ juegan el papel de \vec{S}_{-1_x} y \vec{S}_{N_x} respectivamente y pueden ser fijados externamente mediante un campo que es no nulo únicamente en las celdas 0_x y $(N-1)_x$. Por lo tanto, si utilizamos la ecuación 6.6.2 en estas celdas se obtiene:

$$\frac{\partial H}{\partial \varphi_{0_x}} = J \sin(\Delta\varphi) - J_{0_x} h_{0_x} \sin(\varphi_{0_x} - \alpha) = 0$$

y

$$\frac{\partial H}{\partial \varphi_{(N-1)_x}} = J_{(N-1)_x} h_{(N-1)_x} \sin(\beta - \varphi_{(N-1)_x}) - J \sin(\Delta\varphi) = 0.$$

De donde se obtienen las siguientes condiciones:

$$(6.6.5) \quad \begin{aligned} \sin(\Delta\varphi) &= \frac{J_{0_x} h_{0_x}}{J} \sin(\varphi_{0_x} - \alpha), \\ \sin(\Delta\varphi) &= \frac{J_{(N-1)_x} h_{(N-1)_x}}{J} \sin(\beta - \varphi_{(N-1)_x}). \end{aligned}$$

Un hamiltoniano como el definido en 6.6.4 da lugar a una ecuación de estados estacionarios de la forma:

$$L(x, |\psi|^2)\psi = \mu\psi + j(x),$$

donde $j(x)$ es una función compleja distinta de cero únicamente en las celdas 0_x y $(N-1)_x$, cuya amplitud $|j(x)| = h_{0_x}$ en la celda 0_x y $|j(x)| = h_{(N-1)_x}$ en la celda $(N-1)_x$, mientras que su fase $\arg(j(x)) = \alpha$ en la celda 0_x y $\arg(j(x)) = \beta$ en la celda $(N-1)_x$, de modo que se cumple con la condición 6.6.5.

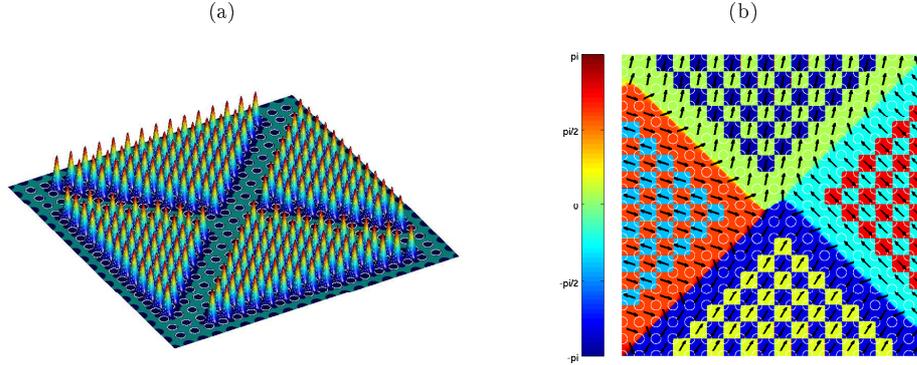


FIGURA 6.7.1. Amplitud (a) y fase (b) de las soluciones con dominios magnéticos. Los máximos de $V(\mathbf{x})$ se han representado mediante círculos blancos. En (b) se han superpuesto flechas que representan la fase en el centro de cada celda, estando el origen de los ángulos en el eje y .

Los resultados anteriores se pueden generalizar fácilmente al caso bidimensional y han sido utilizados en el capítulo anterior para el cálculo numérico de las soluciones estacionarias distintas de las ferromagnéticas o antiferromagnéticas.

6.7. Dominios magnéticos

Finalmente, haciendo uso de los conceptos desarrollados hasta el momento y basándonos en la analogía con los sistemas magnéticos, introduciremos un nuevo tipo de soluciones en donde se puede observar un fenómeno óptico análogo a los dominios magnéticos en materiales magnéticos. En cristales electrónicos con propiedades magnéticas un dominio magnético está caracterizado por una magnetización global común a todos los puntos que lo forman. En medios magnéticos es posible encontrar diferentes regiones en las que aparecen dominios de este tipo. La magnetización en cada uno de estos dominios puede ser completamente distinta a la del resto. Puesto que el hamiltoniano magnético del tipo del encontrado con anterioridad permite la existencia de este tipo de soluciones, es natural preguntarse si es posible obtener soluciones solitónicas con estas características. Efectivamente, estas soluciones son fáciles de calcular en los casos ferromagnético y antiferromagnético. Sin embargo, para las excitaciones sería necesario introducir campos externos no sólo en la frontera del dominio Ω sino también en las fronteras de los dominios magnéticos, pues se deben cumplir las condiciones del anterior apartado. En la figura 6.7.1 se ha representado una solución de este tipo, calculada con el método numérico descrito en el apéndice D, cuando $F(|\psi|^2) = |\psi|^2$ y $V_0 = 2$. Esta solución está formada por cuatro dominios con fases independientes. Dichos dominios tienen forma triangular y están separados entre sí por algunas celdas en las que la amplitud se anula. Dentro de cada dominio la solución es de tipo antiferromagnético. La fase se ha representado no sólo con un código de colores, sino por flechas situadas en el centro de cada celda, con el fin de resaltar el aspecto de los dominios magnéticos. Nótese que la magnetización alternada definida en 6.4.10, $\mathbf{M}_a = \sum_i (-1)^{i_x+i_y} \mathbf{S}_i$,

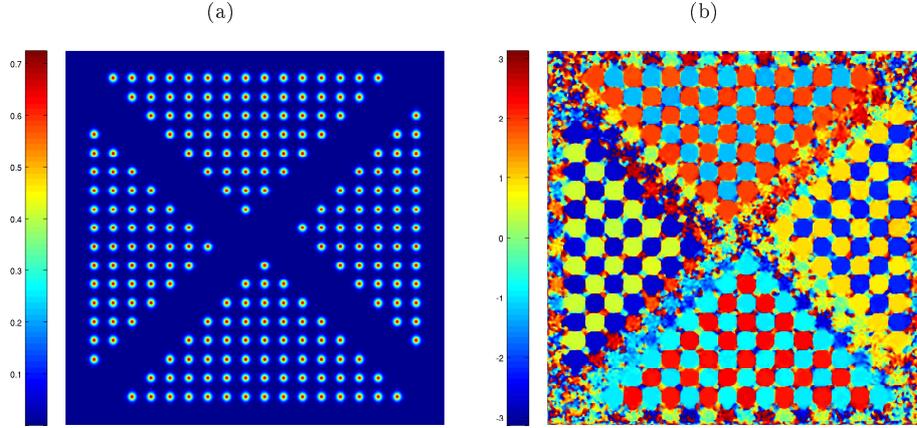


FIGURA 6.7.2. Amplitud (a) y fase (b) de $\phi(\mathbf{x}, z)$ en $z = 900$ la condición inicial es una perturbación de una solución con $\mu = -0,10$ como las presentadas en 6.7.1.

es diferente de cero y distinta en cada dominio. La dirección del vector de magnetización es la misma que la de las flechas utilizadas para representar la fase en cada dominio. Puesto el medio es antiferromagnético, la magnetización ordinaria definida en 6.4.10, $\mathbf{M} = \sum_i \mathbf{S}_i$, se anula exactamente en cada dominio.

Se ha realizado la simulación numérica de la evolución de estas soluciones cuando se perturba del mismo modo en que se hizo en el apartado 5.3.2 del capítulo 5. A lo largo de esta simulación no se ha observado ningún tipo de inestabilización en la amplitud o en la fase, cuando se evoluciona hasta valores de z muy elevados. En la figura 6.7.2 se presenta el campo cuando $z = 900$.

Las soluciones con dominios magnéticos son un primer ejemplo de los resultados y nuevos efectos que se pueden obtener utilizando la analogía, desarrollada en profundidad en el presente capítulo, entre la modelización de la luz en sistemas con invariancia traslacional tipo cristal de luz y los modelos de magnetismo utilizados en estado sólido.

Conclusiones

En la primera parte de la Tesis se han estudiado los solitones cuya amplitud es invariante bajo los elementos de un grupo de simetría rotacional discreta. El resultado básico se ha obtenido utilizando herramientas de la teoría de grupos (teorema 2.2.13) y, alternativamente, mediante la extensión de la teoría de Bloch al caso angular y no lineal (teorema 2.3.2). Gracias a este resultado hemos podido asignar a los distintos solitones con simetría rotacional discreta una cantidad, el pseudomomento angular, la cual nos ha permitido deducir una serie de interesantes resultados. En primer lugar hemos podido establecer algunas condiciones sobre la forma funcional de las soluciones con simetría rotacional discreta (véase el caso 2 en el capítulo 2). Se ha demostrado que el módulo de esta cantidad presenta un valor máximo relacionado con el orden de simetría del grupo (teorema 2.2.22). A continuación hemos visto que los solitones con simetría rotacional discreta pueden agruparse en tres grandes grupos: los solitones tipo fundamental (2.2.31), vórtice (2.2.34) o nodal (2.2.32). Hemos deducido que tanto los solitones tipo fundamental como los nodales se distinguen de los solitones tipo vórtice en que aquellos son necesariamente funciones reales, mientras que estos últimos deben ser funciones complejas (proposiciones 2.2.30 y 2.2.33). Gran parte de estos resultados se han extendido a soluciones con simetría rotacional discreta en medios homogéneos cuya amplitud experimenta un movimiento de rotación, descritas por la ecuación 2.4. A continuación se ha estudiado cual es el comportamiento de la función que describe el solitón cerca del eje de simetría. Se ha deducido que los solitones tipo vórtice presentan necesariamente una singularidad de fase de carga m , donde m es el pseudomomento angular, situada en dicho eje (proposición 2.5.2), mientras que los solitones fundamentales y nodales no presentan ninguna singularidad de fase en este punto (corolarios 2.5.3 y 2.5.4). Posteriormente se ha deducido que esto implica que la vorticidad calculada a lo largo de circuitos en torno a este punto y muy cercanos al mismo es igual a m en el caso de los solitones tipo vórtice (2.6.3 y corolario 2.6.5) y se anula en los otros dos casos (proposiciones 2.6.6, 2.6.9 y corolarios 2.6.7, 2.6.10). Los resultados expuestos hasta este punto permiten catalogar y entender todas las soluciones con simetría rotacional discreta expuestas en la literatura. En el apartado 2.7 se han interpretado las soluciones con simetría rotacional discreta en redes ópticamente inducidas o fibras de cristal fotónico, solitones en redes de Bessel, *necklace beams*, *soliton clusters* o azimutones, en términos de la teoría expuesta.

A continuación se ha intentado explotar esta teoría para predecir otros tipos de solitones. Para ello se han dividido todos los solitones con simetría rotacional discreta en simples o compuestos, según presenten a lo sumo una única singularidad o más de una (definiciones 3.2.1 y 3.4.1). Se ha demostrado que, para las primeras, pseudomomento y vorticidad son indistinguibles (proposición 3.2.3) y que, en

consecuencia, la vorticidad hereda las restricciones sobre el módulo del pseudomomento (teorema 3.2.5). Se han calculado numéricamente solitones de este tipo para todos los pseudomomentos permitidos en sistemas con diferentes simetrías discretas (\mathcal{C}_{2v} , \mathcal{C}_{3v} , \mathcal{C}_{4v} y \mathcal{C}_{6v}). Se ha mostrado que las soluciones obtenidas concuerdan con los resultados anteriores. Adicionalmente, se ha observado que el número de líneas nodales que presentan las soluciones tipo solitón fundamental o nodal están relacionadas con el comportamiento frente a los elementos de reflexión del grupo considerado. A continuación, se han buscado soluciones con estructuras de fase más complicadas, en particular con líneas nodales radiales y angulares. Se ha demostrado que estas últimas aparecen debido a la existencia de una estructura de bandas asociada a la periodicidad del sistema a lo largo de la variable angular. Se han obtenido soluciones en la segunda banda prohibida asociada a la variable angular para todos los pseudomomentos permitidos, las cuales presentan líneas nodales angulares. Finalmente, se ha observado que los solitones en medios periódicos aparecen en las bandas prohibidas (esta vez no a las asociadas a una variable angular, sino lineal), y se han obtenido soluciones en la segunda banda prohibida asociada a esta periodicidad lineal.

Posteriormente se han estudiado las soluciones compuestas. Se ha demostrado que en sistemas con simetría rotacional discreta las posiciones de las singularidades de fase se encuentran restringidas por la simetría. En particular se ha mostrado que las singularidades situadas fuera del eje de simetría aparecen en grupo, y que dada la posición y la fase en una de ellas, se halla determinada la posición y fase en torno al resto de singularidades del mismo grupo (proposición 3.4.8). Se han calculado numéricamente ejemplos de diferentes tipos de solitones compuestos y se ha mostrado que cumplen con todos los resultados teóricos expuestos. Se ha mostrado que para estas soluciones la vorticidad no es igual al pseudomomento. Además se ha introducido el concepto de línea de ruptura y se han conjeturado algunos resultados en relación a su posición, basados en observaciones en los resultados numéricos.

La teoría del pseudomomento angular no sólo ha sido utilizada para estudiar las soluciones estacionarias, sino que se ha utilizado para obtener nuevos resultados relacionados con la dinámica de los solitones. Se ha mostrado que las soluciones no estacionarias cuya amplitud presenta simetría rotacional discreta presentan igualmente pseudomomento angular. Consecuentemente los resultados expuestos son aplicables a soluciones simétricas no estacionarias. Además se ha demostrado que el pseudomomento angular es una cantidad conservada a lo largo de la propagación (teorema 4.3.2). Posteriormente se ha deducido que se pueden hacer predicciones sobre el pseudomomento si la simetría rotacional del sistema cambia a lo largo de la propagación. Se han estudiado dos casos: (i) que la simetría del sistema pase de continua ($\mathcal{O}(2)$) a discreta \mathcal{C}_{nv} (medio descrito por la ecuación 4.4.1) y (ii) que la simetría cambie entre dos grupos de simetría discreta, \mathcal{C}_{nv} y $\mathcal{C}_{n'v}$ (medio descrito por la ecuación 4.4.2). En el primer caso se ha obtenido la regla de transformación entre el momento angular en $\mathcal{O}(2)$ y el pseudomomento angular en \mathcal{C}_{nv} (proposición 4.4.3). En el segundo caso se ha obtenido la regla de transformación entre el pseudomomento en el primer medio con simetría \mathcal{C}_{nv} y el pseudomomento en el segundo medio con simetría $\mathcal{C}_{n'v}$ (proposición 4.4.4), y se ha demostrado que, en este caso, la regla presenta una restricción adicional sobre los posibles valores del pseudomomento en el segundo medio en función de la relación entre los ordenes de

ambos grupos de simetría (observación 4.4.5). Para traducir estas reglas en conclusiones sobre la vorticidad es necesario estudiar el caracter simple o compuesto de la solución a lo largo de la propagación. Si se puede asumir que la solución es de tipo simple, entonces estas reglas son aplicables directamente a la vorticidad. En este caso podemos introducir un álgebra de vorticidad basada en varios tipos de transformaciones de vorticidad, tal y como se introduce en el apartado 4.4.2. Se han presentado ejemplos numéricos de este tipo de transformaciones. Los métodos numéricos utilizados se describen en el apéndice D, donde además se obtiene un método que permite generalizar el método de diferencias finitas a mallados irregulares. Finalmente se ha estudiado la relación entre la vorticidad y el pseudomomento angular en el caso más general de soluciones compuestas. Se ha observado que ambas cantidades se hallan relacionadas a través del número de singularidades de fase encerradas por el circuito a lo largo de cual se calcule la vorticidad (proposición 4.5.3). Se han mostrado ejemplos numéricos en los que se ha comprobado numéricamente esta relación y en los que se observa que las transformaciones de vorticidad se producen mediante la generación de vórtices en el eje de simetría. También se observa que las posiciones de estas singularidades a lo largo de la propagación se hallan relacionadas por las propiedades de simetría, tal y como se predecía en la proposición 3.4.8. Dejamos para trabajos posteriores el estudio de cómo se produce esa transformación de una solución simple con momento o pseudomomento angular bien definido a otra función cuyo número de singularidades desconocemos y de la que sólo conocemos el valor de su pseudomomento angular y, por tanto, sus propiedades de simetría. Estudiaremos también las trayectorias de estas singularidades y cómo se pueden modificar estas trayectorias mediante el uso de distintos medios. Asimismo dejamos para trabajos posteriores el estudio de la relación entre las bandas asociadas a la periodicidad en la variable angular y las bandas asociadas a la periodicidad en variables lineales. Finalmente, dejamos para investigaciones futuras el efecto de la velocidad de rotación de la amplitud de los solitones en las soluciones rotatorias sobre su pseudomomento angular.

En la segunda parte de la Tesis se han estudiado las soluciones no lineales cuya amplitud es periódica, es decir, invariante bajo los elementos de un grupo de simetría traslacional discreta. Se ha obtenido que estas soluciones no lineales también se pueden caracterizar mediante un pseudomomento, en este caso asociado a las coordenadas transversales (véase teorema 5.2.2 y definición 5.2.4). Nuevamente se ha logrado imponer algunas condiciones sobre la forma funcional de estas soluciones, siempre que su amplitud cumpla con la condición de simetría traslacional (teorema 5.2.2). También se han establecido las cotas sobre el valor del pseudomomento lineal (corolario 5.2.13) y se han presentado ejemplos numéricos de soluciones en sistemas periódicos cuadrados con algunos de los pseudomomentos permitidos. A continuación se ha estudiado la dinámica de estas soluciones. Por un lado se ha demostrado que el pseudomomento lineal se conserva a lo largo de la propagación (teorema 5.3.1). Por otro se ha estudiado la estabilidad de estas soluciones en función del pseudomomento (apartado 5.3.2).

La semejanza de estos solitones a un sistema de electrones en un cristal invitaba a ser más ambicioso, extendiendo su estudio más allá de una simple extensión de los resultados obtenidos en el caso de invariancia rotacional. Por lo tanto se ha intentado profundizar en el estudio de ellas utilizando las herramientas del estado sólido y la materia condensada. En primer lugar se ha demostrado que estos solitones

presentan la propiedad fundamental de los sólidos cristalinos, es decir, ordenación de largo alcance. En este sentido, en la sección 6.3 se ha obtenido formalmente las funciones que juegan el papel de la función de onda de los iones en una red (las funciones de Wannier no lineales) y se ha mostrado que se puede escribir la acción (ec. 6.3.2), el hamiltoniano (ec. 6.3.3), las ecuaciones de movimiento (ec. 6.3.4), etc. en términos de una red discreta de coeficientes de idéntico módulo. A continuación se ha dado un paso más, mostrando en el apartado 6.4 que se puede expresar el hamiltoniano, acción, etc. del sistema de manera análoga a como se expresan en el caso de sólidos magnéticos. Y se ha reproducido el modelo xy de este tipo de sistemas (ec. 6.4.9). En este punto es importante determinar cuál es el estado fundamental y cómo se ordenan las excitaciones de éste. Basándonos en el estudio de estabilidad realizado en el apartado 5.3.2 y en el cálculo de los coeficientes, se ha deducido que el estado fundamental es el antiferromagnético. Se ha continuado, pues, estudiando la dinámica de la fase de las excitaciones sobre el estado fundamental. Se han obtenido las ecuaciones que describen las ondas de espín (ecs. 6.5.10) y se han resuelto para las excitaciones (ec. 6.5.11). De este modo se ha vuelto a obtener una cantidad relacionada con el pseudomomento lineal obtenido anteriormente. Además se ha podido obtener una relación entre la constante de propagación asociada al estado fundamental y la de las excitaciones (ec. 6.5.14), la cual se ha podido comprobar numéricamente. En el apartado 6.6 se ha estudiado el concepto de flujo en este tipo de soluciones (véase definición 6.6.1) y cómo interaccionan con un campo externo. La teoría presentada sirve como base para obtener predicciones sobre nuevos efectos, de los que se ha mostrado un ejemplo en el último apartado: las soluciones con dominios magnéticos.

El trabajo realizado está siendo difundido en diversos artículos científicos, algunos de los cuales ya han sido publicados en revistas internacionales de alto índice de impacto. En la ref. [248] se han incluido las demostraciones detalladas de los teoremas de clasificación de las soluciones con simetría rotacional discreta (th. 2.2.13), de valor máximo del pseudomomento angular (th. 2.2.22), de la conservación del pseudomomento angular (th. 4.3.2) y de la regla de paso de m entre medios con distintas simetrías (prop. 4.4.3). También se han incluido los cálculos de soluciones simples con todos los pseudomomentos en C_{4v} y C_{6v} presentados en el capítulo 3. El estudio del comportamiento de las soluciones cerca del eje de simetría rotacional en el caso de vórtices (resultados 2.5.2 y 2.6.3 de los apartados 2.5 y 2.6) será publicado en la ref. [249]. El estudio de las excitaciones angulares en el caso de soluciones tipo vórtice descritas en el apartado 3.3 han sido publicadas en [219]. El estudio del comportamiento de la función cerca del eje de simetría en los casos fundamental y nodal (apartados 2.5 y 2.6), combinado con el estudio del comportamiento de la solución cuando el sistema es también simétrico respecto a las reflexiones y con el estudio de las excitaciones angulares en estos casos (apartado 3.3) se incluirá en la ref. [250]. El estudio de las excitaciones en la segunda banda en medios periódicos se publicará en [251], mientras que su extensión a soluciones tipo vórtice se publicará en [252]. Dado que los sistemas periódicos pueden presentar *defectos*, se está desarrollando el estudio de las soluciones estacionarias no lineales en presencia de estos defectos [253]. Por otra parte, la presencia de bandas angulares asociadas a la simetría rotacional discreta y el pseudomomento angular (véase apartado 2.3) dará lugar al estudio de *gap solitons* angulares [254]. En la ref. [255] se recogerá

el estudio de los *clusters* de vórtices, o soluciones compuestas, desarrollado en el apartado 3.4.

El teorema de valor máximo de la vorticidad (th. 3.2.5) aplicado a fibras de cristal fotónico fue publicado en [216], mientras que la transmutaciones de vorticidad incluidas en la regla 4.4.3 y descritas en el apartado 4.4.2 fueron publicadas en [217], en el caso de inversiones de vorticidad aplicadas a óptica no lineal, y en la ref. [222], en el caso de reducciones e inversiones de vorticidad lineales y aplicadas a condensados de Bose-Einstein. En la ref. [256] se incluirá el estudio de las transformaciones entre medios discretos y se diseñará un dispositivo capaz de controlar la carga topológica a lo largo de la propagación basado en cascadas de interfases entre medios con distinto orden de simetría discreta. En la ref. [257] se incluirá un estudio detallado de generación de singularidades de fase en interfases entre medios con distinta simetría, utilizando conceptos desarrollados en el apartado 4.5. El estudio de las trayectorias de fase en medios formados por secciones alternadas con distintos órdenes de simetría y no-linealidades autoenfocantes o desenfocantes será descrito en [258]. Finalmente, en [259] se recogerá el estudio de las trayectorias de los vórtices generados en interfases entre medios con distintas simetrías en presencia de potenciales de tipo parabólico.

Por otra parte, el estudio de los sistemas formados por solitones con invariancia traslacional también dará lugar a una serie de publicaciones. Entre estas, citamos la ref. [224], en la que se demuestra que en estas condiciones la luz se comporta como un superfluido, y la ref. [260], en la que se estudian las propiedades magnéticas de estos sistemas, tal y como se hizo en el capítulo 6.

Por último, se han realizado contribuciones en el campo de las diferencias finitas generalizadas, tal y como se describe en el apéndice D. En particular se ha demostrado que, en dos dimensiones, la interpolación necesaria para desarrollar estos métodos es factible si la malla se basa en redes de Coattmèlec [245]. Finalmente, en la ref. [244] se desarrolló un método de diferencias finitas generalizadas basado en este tipo de interpolación.

Obtención de las ecuaciones y notación

Con el fin de fijar la notación, vamos a mostrar cómo la ecuación de Schrödinger no lineal puede modelizar el comportamiento de la luz, bajo ciertas hipótesis. La derivación de esta ecuación se puede consultar en libros como [7].

Las ecuaciones de Maxwell se pueden reescribir para el campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{x}, z, t)$ como la siguiente ecuación:

$$(A.0.1) \quad \nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2},$$

donde c es la velocidad de la luz, ε_0 es la permitividad dieléctrica del vacío y \mathbf{P} es la polarizabilidad. Esta ecuación describe el comportamiento en las coordenadas espaciales¹ (\mathbf{x}, z) y el tiempo del campo vectorial \mathbf{E} asociado a una onda electromagnética. Vamos a estudiar la propagación de esta onda en el interior de un medio distinto del vacío. La descripción de la interacción entre el medio y la onda puede involucrar mecanismos físicos complejos, pero de manera efectiva se ha recogido en la variación de la polarizabilidad \mathbf{P} o momento dipolar inducido por el campo electromagnético por unidad de volumen. En el caso lineal esta polarizabilidad puede ser descrita en términos del campo como:

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}, z, t) = \mathbf{P}_L(\mathbf{x}, z, t) = \varepsilon_0 \int \chi^{(1)}(t - t') \mathbf{E}(\mathbf{x}, z, t') dt',$$

donde la constante $\chi^{(1)}$ es la susceptibilidad lineal del medio y donde se ha supuesto que la respuesta del medio es local, es decir, no involucra al campo en otras posiciones del espacio. Sin embargo, en óptica no lineal la respuesta del medio es más complicada, y se modeliza generalizando la anterior ecuación [3]. En este apéndice vamos a tomar la polarizabilidad como $\mathbf{P}(\mathbf{x}, z, t) = \mathbf{P}_L(\mathbf{x}, z, t) + \mathbf{P}_{NL}(\mathbf{x}, z, t)$, donde \mathbf{P}_L se ha expresado en la anterior ecuación y:

$$\mathbf{P}_{NL}(\mathbf{x}, z, t) = \varepsilon_0 \int \int \int \chi^{(3)}(t - t_1, t - t_2, t - t_3) \times \mathbf{E}(\mathbf{x}, z, t_1) \mathbf{E}(\mathbf{x}, z, t_2) \mathbf{E}(\mathbf{x}, z, t_3) dt_1 dt_2 dt_3,$$

donde $\chi^{(3)}$ es el tensor de susceptibilidad de tercer orden, \times representa el producto tensorial y donde de nuevo se supone que la respuesta del medio es local. El tensor de susceptibilidad de segundo orden se puede despreciar en medios centrosimétricos, es decir, en los que exista simetría de inversión [3]. Este tensor es muy relevante, sin embargo, en el estudio de los solitones cuadráticos. Además supondremos que la contribución de tensores de susceptibilidad de mayor orden es despreciable.

¹Escribimos las coordenadas transversales $\mathbf{x} = (x, y)$ y la axial z separadas explícitamente porque vamos a estudiar medios con simetría axial.

Si se supone que la respuesta del medio es instantánea se pueden escribir la susceptibilidad de tercer orden como [7]:

$$\mathbf{P}_{NL}(\mathbf{x}, z, t) = \varepsilon_0 \chi^{(3)} \times \mathbf{E}(\mathbf{x}, z, t) \mathbf{E}(\mathbf{x}, z, t) \mathbf{E}(\mathbf{x}, z, t).$$

Supongamos ahora que la onda electromagnética es *quasi*-monocromática centrada en la frecuencia ω_0 , de modo que podemos escribir el campo eléctrico como:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, z, t) = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{x}} [E(\mathbf{x}, z, t) e^{-i\omega_0 t} + c.c.],$$

donde $\hat{\mathbf{x}}$ es un vector unitario que indica la polarización y $E(\mathbf{x}, z, t)$ es una función compleja con una dependencia suave en t . Supongamos también que el campo mantiene su polarización a lo largo de la propagación en z , es decir, que $\hat{\mathbf{x}}$ es constante. Además, suponemos que \mathbf{P}_{NL} no involucra frecuencias distintas de ω_0 . En estas condiciones se puede escribir:

$$P_{NL}(\mathbf{x}, z, t) \approx \varepsilon_0 \varepsilon_{NL} E(\mathbf{x}, z, t),$$

donde $\varepsilon_{NL} = \frac{3}{4} \chi_{xxxx}^{(3)} |E(\mathbf{x}, z, t)|^2$, según [7], y P_{NL} es ahora una variable escalar. Asimismo se puede escribir $P_L(\mathbf{x}, z, t) = \varepsilon_0 \chi_{xx}^{(1)} E(\mathbf{x}, z, t)$. La parte lineal de la polarizabilidad puede ser reescrita en términos de un índice de refracción lineal n_0 como $n_0 = \Re(\chi_{xx}^{(1)})$ mientras que la parte no lineal de la polarizabilidad da lugar a un índice de refracción $n_{NL} = n_2 |E(\mathbf{x}, z, t)|^2$ donde n_2 se obtiene a partir de $\chi_{xxxx}^{(3)}$. Si el medio no es homogéneo en las variables transversales, tanto $\chi^{(1)}$ como $\chi^{(3)}$ dependerán de \mathbf{x} . Esta dependencia se traducirá en que tanto n_0 como n_2 dependen de \mathbf{x} , es decir, $n_0 = n_0(\mathbf{x})$ y $n_2 = n_2(\mathbf{x})$. Los medios para los que se cumplen estas hipótesis, en particular, que se pueden despreciar todas las susceptibilidades de ordenes mayor a la de tercer orden y que las interacciones no involucran a frecuencias distintas de ω_0 , se conocen como medios Kerr.

Consideremos el caso monocromático, es decir, supongamos que la dependencia del tiempo está completamente definida por ω_0 y por tanto $E(\mathbf{x}, z, t) = E(\mathbf{x}, z)$. En medios con simetría axial, donde el haz de luz se propaga a lo largo del eje z (como, por ejemplo, al caso de fibras ópticas) podemos escribir esta variable como:

$$E(\mathbf{x}, z) = \Psi(\mathbf{x}, z) e^{i\beta_0 z},$$

donde $\beta_0 = k_0 n_0$, $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$, $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega_0}$ y $\Psi(\mathbf{x}, z)$ es la envolvente del haz luminoso. De este modo hemos separado una parte de variación rápida con z en el término $e^{i\beta_0 z}$ de la parte de variación suave $\Psi(\mathbf{x}, z)$.

Introduciendo el campo $E(\mathbf{x}, z)$ en la ecuación A.0.1 y bajo todos los supuestos anteriores se puede obtener la ecuación no paraxial:

$$\frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{x}, z)}{\partial z^2} = - (\nabla_t^2 + k_0^2 n_0^2(\mathbf{x}) + k_0^2 \gamma(\mathbf{x}) |\Psi(\mathbf{x}, z)|^2) \Psi(\mathbf{x}, z),$$

donde $\nabla_t^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ y $\gamma(\mathbf{x})$ se obtiene a partir de $\chi^{(3)}$. Si realizamos un cambio de variables de modo que $(\mathbf{x}', z') = k_0(\mathbf{x}, z)$ podemos escribir la anterior ecuación como:

$$\frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{x}', z')}{\partial z'^2} = - (\nabla_t^2 + n_0^2(\mathbf{x}') + \gamma(\mathbf{x}') |\Psi(\mathbf{x}', z')|^2) \Psi(\mathbf{x}', z').$$

Supongamos además que $\Psi(\mathbf{x}', z')$ varía lentamente con z , de modo que se puede escribir como $\Psi(\mathbf{x}', z') = \phi(\mathbf{x}', z')e^{in_r z'}$, donde fijaremos la constante n_r más adelante. Introduciendo esta expresión para $\Psi(\mathbf{x}', z')$ en la ecuación anterior, y despreciando la derivada de segundo orden de $\phi(\mathbf{x}', z')$, dado que como esta cantidad varía suavemente con z' podemos considerar sólo derivadas de primer orden, se obtiene:

$$2n_r i \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, z)}{\partial z} = -(\nabla_t^2 + (n_0^2(\mathbf{x}) - n_r^2) + \gamma(\mathbf{x})|\phi(\mathbf{x}, z)|^2) \phi(\mathbf{x}, z),$$

donde se han eliminado las primas de las variables espaciales para simplificar la notación. Si escribimos $V(\mathbf{x}) = -(n_0^2(\mathbf{x}) - n_r^2)$, y realizamos el cambio de variable $z'' = \frac{z}{2n_r}$ la anterior ecuación en términos queda:

$$i \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, z'')}{\partial z''} = -(\nabla_t^2 - V(\mathbf{x})) + \gamma(\mathbf{x})|\phi(\mathbf{x}, z'')|^2) \phi(\mathbf{x}, z''),$$

que es la ecuación de Schrödinger no lineal que estudiaremos a lo largo de la Tesis. Tomaremos el valor de n_r de modo que $V(\mathbf{x})$ sea positivo. Por ejemplo, las *fibras de cristal fotónico* son fibras de un material de índice de refracción n_m en las que se han practicado agujeros longitudinalmente de modo que la estructura transversal es una red como las presentadas en las figuras 3.2.1 (c) y (d). En este caso tomaremos n_r igual al del aire, de modo que $V(\mathbf{x})$ sea positivo.

Para medios Kerr autoenfocantes $\gamma(\mathbf{x}) > 0, \forall \mathbf{x}$ mientras que para medios Kerr desenfocantes $\gamma(\mathbf{x}) < 0, \forall \mathbf{x}$. Se puede obtener que la anterior ecuación es válida en medios saturables si la parte no lineal es $\frac{1}{1+s|\phi(\mathbf{x}, z'')|^2}$, con $s \in [0, 1]$ y en sistemas fotorrefractivos la parte no lineal tiene una expresión similar. Por lo tanto, consideraremos en general la ecuación:

$$i \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, z)}{\partial z} = -(\nabla_t^2 - V(\mathbf{x}) + F(\mathbf{x}, |\phi(\mathbf{x}, z)|^2)) \phi(\mathbf{x}, z),$$

donde eliminamos las primas de la variable z para simplificar la notación y donde $F(\mathbf{x}, |\phi(\mathbf{x}, z)|^2)$ puede tomar una de estas formas funcionales o incluso involucrar términos no lineales de órdenes superiores, como en el caso de la no linealidad cúbico-quíntica.

Conceptos previos de teoría de grupos

Los conceptos presentados en la presente apéndice se pueden consultar en libros generalistas sobre teoría de grupos, como los que se recogen en las referencias [218, 229, 230, 231].

DEFINICIÓN B.0.1. Se denomina *grupo* G a un conjunto de elementos a, b, c, \dots y a una ley de composición \circ tal que se satisfacen las siguientes condiciones:

1. Si $a \in G$ y $b \in G$, entonces $a \circ b \in G$
2. La composición es asociativa, es decir, $a \circ (b \circ c) = (a \circ b) \circ c$ si $a, b, c \in G$.
3. El conjunto contiene un elemento *identidad* e , tal que $\forall a \in G$ se cumple $a \circ e = e \circ a = a$.
4. $\forall a \in G$ existe un elemento inverso $b \in G$ tal que $a \circ b = b \circ a = e$. Se denota $b = a^{-1}$.

Se denomina *orden del grupo* g al número de elementos que forman el grupo. El orden del grupo puede ser finito o infinito. Los grupos se denominan *finitos* o *infinitos* según su orden sea finito o infinito. Los grupos infinitos cuyos elementos son funciones continuas de una serie de parámetros se denominan *grupos continuos*.

Nótese que la operación de composición no es en general conmutativa. Los grupos para los que se cumple que $a \circ b = b \circ a$ para todos los elementos del grupo se denominan *grupos abelianos*. Un grupo cuyos elementos son la identidad e y las potencias de un único elemento, es decir, a, a^2, \dots se denomina *grupo cíclico*. Si para algún $p \in \mathbb{N}$ se cumple que $a^p = e$ el grupo será de orden finito. Evidentemente los grupos cíclicos son abelianos.

Sea $a, b \in G$. Al elemento $c = b \circ a \circ b^{-1}$ se le denomina *elemento conjugado* de a . El conjunto de todos los elementos mutuamente conjugados se denomina *clase de conjugación* o simplemente *clase*. Todo grupo de orden finito puede ser descompuesto en clases de elementos conjugados.

Sea G un grupo de orden g . Sea G' un conjunto de $g' < g$ elementos de G . Si todas las combinaciones de composición de los elementos de G' pertenecen a su vez a G , decimos que aquel conjunto es un *subgrupo* de G y lo denotamos como $G' \subset G$.

Un movimiento T en \mathbb{R}^k es una transformación geométrica¹ que asigna a cada $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k$ otro vector $T(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^k$ conservando las distancias entre puntos. Es decir, sean $\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathbb{R}^k$ y $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ la distancia entre ambos vectores, para el movimiento T se cumple que $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = d(T(\mathbf{x}), T(\mathbf{x}'))$. Se puede definir una aplicación lineal o afín asociada a cada movimiento. Los movimientos cumplen que la aplicación inversa de un movimiento es, a su vez, un movimiento y que la aplicación sucesiva o composición de dos movimientos es también un movimiento. Denotaremos la

¹La definición de transformación geométrica de un espacio afín euclideo se puede consultar en cualquier libro de introducción al álgebra lineal. Se especifica aquí la definición de movimiento por claridad.

operación de composición de dos movimientos T y S , simplemente como TS . Es fácil ver que el conjunto de todos los movimientos en el plano forma un grupo bajo la operación de composición. A este grupo se le denomina *grupo de movimientos en el plano* y se denota como $E(\mathbb{R}^2)$.

Por otra parte se pueden obtener las ecuaciones vectoriales de un movimiento T en \mathbb{R}^k . Dichas ecuaciones son de la forma $T(\mathbf{x}) = B + M\mathbf{x}$ donde B es un vector de dimensión k y M es una matriz de dimensión $k \times k$. La aplicación es lineal si B es idénticamente nulo y es una afinidad en otro caso.

Supongamos que $\mathbf{x} = (x, y) \in \mathbb{R}^2$. Cualquier movimiento en el plano se puede construir realizando la composición de los siguientes tres tipos de movimientos:

1. Rotaciones de un ángulo determinado en torno a un eje perpendicular al plano y que lo corta en \mathbf{x}_s . Denotamos este tipo de transformaciones por C_α , donde el ángulo girado es α . Si el ángulo girado es $p\frac{2\pi}{n}$ con $n \in \mathbb{N}$, $p \in \mathbb{N} \cup 0$, denotaremos las rotaciones como C_n^p .
2. Reflexiones en el plano respecto a un eje dado. Denotamos por σ_s este tipo de transformaciones, donde s es el eje respecto al que se realiza la reflexión.
3. Desplazamientos paralelos o traslaciones de todos los puntos una distancia $a \in \mathbb{R}$ determinada una dirección dada por el versor de norma unitaria $\vec{\mathbf{u}}_a$. Los denotaremos como $P_{\mathbf{a}}$ donde $\mathbf{a} = a\vec{\mathbf{u}}_a$.

Las traslaciones son afinidades y cumplen que M es la matriz identidad y B es distinto de cero. Las rotaciones y reflexiones son aplicaciones lineales cuya matriz M tiene una expresión bien conocida. Se denomina *transformaciones fundamentales* a estos tres tipos de transformaciones.

Se denota como $O(2)$ al conjunto de todas las rotaciones posibles en torno a un eje que corta en \mathbf{x}_s y todas las reflexiones en planos que contienen dicho eje. Este grupo es de orden infinito y se demuestra que las matrices asociadas a dichas aplicaciones son todas las matrices reales ortogonales posibles de dimensión $k = 2$ y determinante igual a ± 1 . Se denota como $SO(2)$, o bien $O^+(2)$, al grupo que incluye sólo las rotaciones y los determinantes de las matrices correspondientes son siempre $+1$ (lógicamente las matrices asociadas a reflexiones tienen determinante -1).

En el caso de las rotaciones de ángulo $p\frac{2\pi}{n}$ con $n \in \mathbb{N}$, $p \in \mathbb{N} \cup 0$, se cumple que $C_n^p C_n^q = C_n^{p+q}$ y que $C_n^p C_n^{-p} = C_n^{-p} C_n^p = E$ donde E es la transformación identidad. Nótese también que $C_n^n = E$. Es fácil ver que también se cumple la propiedad asociativa. Luego el conjunto de las rotaciones C_n^p con $p = 1, \dots, n-1$ junto con la identidad es un subgrupo del grupo $O(2)$ de orden $g = n$. Se denota este grupo como C_n , siendo sus elementos $E, C_n^1, \dots, C_n^{n-1}$, y se conoce como *grupo de rotaciones de orden n* . Se dice entonces que el eje de rotación es de orden n .

Es fácil demostrar que la reflexión σ_s junto con E también forman un subgrupo de $O(2)$ de orden $g = 2$.

Asimismo, el conjunto de las rotaciones y las reflexiones forman también un subgrupo de orden finito de $O(2)$. Se denota este grupo como C_{ns} . Si se consideran n reflexiones en n planos que contienen al eje de rotación de orden n y separados un ángulo $\frac{\pi}{n}$ entre sí, el grupo se denomina C_{nv} .

Por último, dado que la aplicación sucesiva de dos traslaciones de distancias d_1 y d_2 es a su vez una traslación de distancia $d_1 + d_2$ y como la composición de una traslación de distancia d_1 y otra de distancia $-d_1$ es la identidad y se cumple la

propiedad asociativa, las traslaciones junto con la identidad E también forman un grupo. En este caso su orden g es infinito.

Sea H una figura en el plano. Un movimiento aplicado a los puntos de H tal que genera una figura H' idéntica a la inicial se denomina *transformación de simetría*. Se conoce como *grupo de simetría de la figura* al conjunto de las transformaciones de simetría de una figura.

Nótese que los movimientos de tipo traslación sólo pueden ser transformaciones de simetría si la figura es infinita. Por lo tanto, el grupo de simetría de una figura finita sólo puede incluir movimientos de rotación y/o reflexiones. Por otra parte, dichos movimientos lineales (rotaciones, reflexiones y rotaciones-reflexiones) dejan fijo al menos un punto de la figura. Por esta razón, los grupos de simetría de figuras finitas se denominan *grupos puntuales*. Dichos grupos son los subgrupos de orden finito del grupo $O(2)$.

Sean G y G' dos grupos distintos de orden g . Se dice que G y G' son *isomorfos* si existe una correspondencia uno a uno entre sus elementos tal que se preservan las operaciones de composición. Asimismo, si existe una correspondencia tal que a cada elemento de G le corresponde un único elemento de G' , pero a cada elemento de G' le corresponden varios elementos del grupo G , y la composición de elementos se mantiene, entonces ambos grupos son *homomorfos*.

Sea $f(\mathbf{x})$ una función definida en \mathbb{R}^2 . Sea T_i una transformación cualquiera perteneciente al grupo de transformaciones G . Se define el operador \mathcal{T}_i como:

$$(B.0.2) \quad \mathcal{T}_i f(\mathbf{x}) = f(T_i^{-1}x),$$

donde T_i^{-1} es el inverso de la transformación. Se demuestra que el conjunto de operadores $\mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2, \dots$ forma un grupo \mathcal{G} que es isomorfo a G bajo la operación de composición de aplicación sucesiva de los operadores.

Se denomina *grupo de simetría de una función* al conjunto de operadores definidos de este modo bajo los que se cumple que:

$$\mathcal{T}_i f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$$

Sea G un grupo de orden finito g . Si el grupo de operadores lineales \mathcal{T} definido en un espacio vectorial L_n de dimensión n , es homomorfo a G entonces se dice que \mathcal{T} es una representación de G . Sea D un conjunto de matrices de la misma dimensión. Si, bajo la operación de composición de producto matricial, forman un grupo homomorfo a G entonces D es una representación matricial de G . Si en el espacio L_n elegimos una base y expresamos los operadores de \mathcal{T} matricialmente, a partir de una representación obtenemos una representación matricial. Denotamos esta representación matricial como $D(\mathcal{T})$. Nótese que para cada elemento de \mathcal{T} obtenemos una matriz. Las matrices correspondientes a distintos elementos del grupo no tienen por qué ser distintas.

Supongamos que en el espacio L_n existe una representación \mathcal{T} del grupo G . Evidentemente, para todo vector $\phi_n \in L_n$ se cumple que $\mathcal{T}_i \phi_n \in L_n$, donde $\mathcal{T}_i \in \mathcal{T}$ es uno de los elementos de \mathcal{T} . Decimos, por lo tanto, que L_n es cerrado o invariante frente a \mathcal{T} . Si elegimos una base de L_n , a partir de \mathcal{T} podemos obtener una representación matricial $D(\mathcal{T})$. Supongamos que en el espacio L_n existe un subespacio L_m , $m < n$, tal que sus elementos son invariantes frente a $D(\mathcal{T})$. Es decir, se cumple que si $\phi_n \in L_m$ entonces $D(\mathcal{T})\phi_n \in L_m$. Entonces decimos que la representación

matricial es *reducible*. En caso contrario decimos que es *irreducible*. Podemos elegir una base en L_m de modo que las matrices de la representación irreducible $D^{(p)}(\mathcal{T})$ sean de dimensión m . Si el grupo es finito y la representación matricial $D(\mathcal{T})$ es reducible, entonces ésta se puede expresar como suma directa de matrices cuya dimensión es la de los subespacios invariantes en los que se puede descomponer L_n . Es decir, si L_n se puede descomponer en k subespacios invariantes, entonces $D(\mathcal{T}) = \sum_{i=1}^k D_{(m_i \times m_i)}^i(\mathcal{T})$, donde el símbolo de sumatorio se refiere a suma directa de matrices y las $D_{(m_i \times m_i)}^i(\mathcal{T})$ son las matrices que actúan en el subespacio invariante i -ésimo de dimensión $m_i < n$. En este caso decimos que la representación $D(\mathcal{T})$ es *totalmente reducible*. En general, pueden haber matrices repetidas en este sumatorio. La dimensión de la representación i -ésima es igual a la dimensión del subespacio invariante correspondiente.

En teoría de grupos se demuestra que el número de representaciones irreducibles posibles de un grupo es igual al número de clases de conjugación de un grupo. Como el número de clases en un grupo de orden finito es a su vez finito, se cumple por lo tanto que su número de representaciones irreducibles distintas también es finito.

Se define carácter $\chi(D(\mathcal{T}))$ de una representación como la traza de la matriz correspondiente, esto es, $\chi(D(\mathcal{T})) = \sum_i D_{ii}(\mathcal{T})$. Es fácil ver que los caracteres de los elementos de la misma clase coinciden.

Sea \mathcal{T} un grupo de operadores de orden g con k clases distintas. Para cada una de las representaciones irreducibles $D_j(\mathcal{T})$, $j = 1, \dots, k$, tenemos g matrices con k caracteres distintos. La variable $j \in \mathbb{Q}$ sirve, por lo tanto, para denotar a cada una de las posibles representaciones irreducibles distintas. A esta variable se la denomina *índice de la representación*.

Además los caracteres de las distintas matrices cumplen ciertas *relaciones de ortogonalidad*, que se pueden consultar en las referencias [218, 229, 230, 231]. Por lo tanto, estos caracteres están completamente determinados para cada una de las matrices de las representaciones irreducibles.

Con todo lo presentado más arriba es útil obtener y presentar la información sobre los grupos de orden finito en tablas de caracteres, donde se representan los caracteres de todas las matrices asociadas a las k clases del grupo de las k representaciones irreducibles. Se pueden consultar estas tablas [218, 229, 230, 231]. Generalmente, se denota con los símbolos A o B a las representaciones unidimensionales y con el símbolo E a las bidimensionales.

En el caso de grupos abelianos, como necesariamente el número de clases es igual al número de elementos del grupo, las representaciones irreducibles deben ser unidimensionales. Por lo tanto, para estos grupos, matriz y carácter coinciden.

El grupo de simetría \mathcal{C}_n es isomorfo a un grupo cíclico de orden n por tanto se cumple que:

$$D(\mathcal{C}_i) = \chi(D(\mathcal{C}_i)) = e^{i\frac{2\pi}{n}l},$$

con $l = 0, \dots, n - 1$ y donde \mathcal{C}_i es alguno de los elementos de \mathcal{C}_n . Es decir, los caracteres coinciden con la raíz l -ésima de la unidad y estos números definen la representación irreducible correspondiente. Sin embargo, el grupo \mathcal{C}_{nv} no es abeliano y contiene $n - 2$ representaciones bidimensionales.

En la figura B.0.1 se presenta, para cada representación irreducible j de los grupos \mathcal{C}_{3v} y \mathcal{C}_{4v} cómo se transforma la función ante los elementos de rotaciones, \mathcal{C}_{nv}^k , del grupo correspondiente. El grupo \mathcal{C}_{3v} presenta una representación irreducible

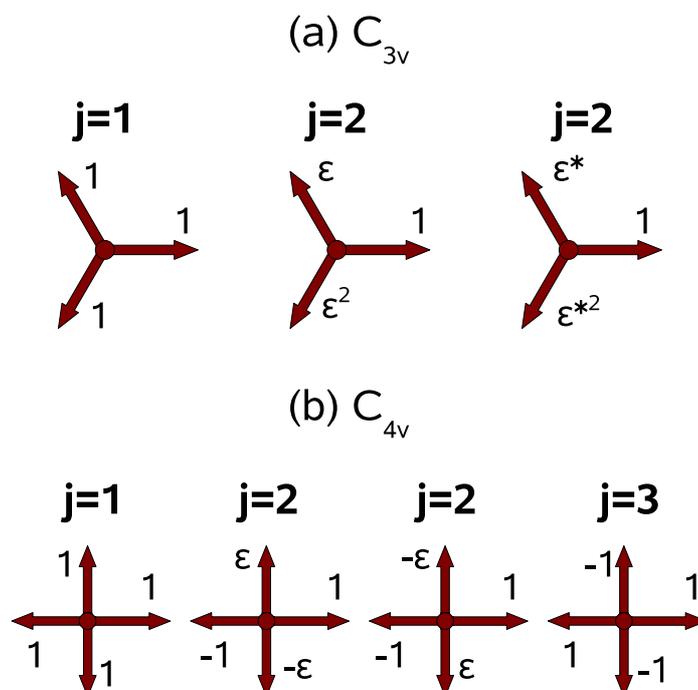


FIGURA B.0.1. Representación de la tabla de caracteres de los grupos (a) C_{3v} y (b) C_{4v} bajo los elementos de rotación del grupo. En (a) $\varepsilon = \exp(i\frac{2\pi}{3})$ y en (b) $\varepsilon = \exp(i\frac{\pi}{2})$.

unidimensional y dos bidimensionales, mientras que C_{4v} presenta dos representaciones irreducibles unidimensionales y dos bidimensionales. Las flechas representan rotaciones del ángulo correspondiente, es decir, $0, \frac{\pi}{3}$ y $\frac{2\pi}{3}$ para C_{3v} o $0, \frac{\pi}{2}, \pi$ y $\frac{3\pi}{2}$ para C_{4v} . Junto a estas se representa el autovalor k que cumple que $C_{nv}^k \psi = k\psi$. Este valor, da idea de cómo se transforma la función ante la acción del elemento del grupo. Para C_{3v} los valores de k son siempre múltiplos de $\varepsilon = \exp(i\frac{2\pi}{3})$, mientras que para C_{4v} los valores de k son siempre múltiplos de $\varepsilon = \exp(i\frac{2\pi}{4})$ (en general son múltiplos de $\varepsilon = \exp(i\frac{2\pi}{n})$). Las representaciones donde $k \neq 1$ para todas las

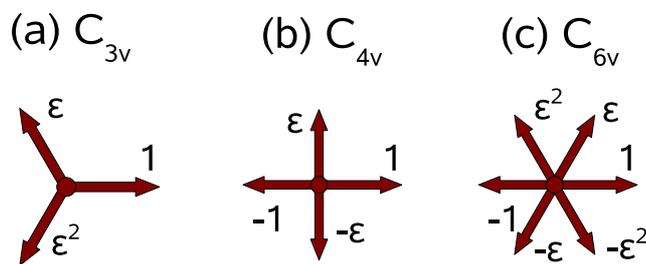


FIGURA B.0.2. Esquema de las representaciones irreducibles para los grupos (a) C_{3v} (b) C_{4v} y (c) C_{6v} . Las flechas representan cada una de las representaciones irreducibles y se representa junto a ellas cómo se comportan ante una rotación de $\frac{2\pi}{n}$, $n = 3, 4, 6$. En (a) $\varepsilon = \exp(i\frac{2\pi}{3})$, en (b) $\varepsilon = \exp(i\frac{\pi}{2})$ y en (c) $\varepsilon = \exp(i\frac{\pi}{3})$.

rotaciones son bidimensionales. En este caso, para los grupos C_3 y C_4 esta representación se comporta como dos representaciones unidimensionales, en las que los correspondientes caracteres son mutuamente conjugados. En el caso C_{3v} y C_{4v} estas aquellas dos representaciones se comportan como una única bidimensional. Para los elementos de rotación las matrices 2×2 correspondientes son diagonales, y en la diagonal presentan los k presentados en la figura para cada rotación. La tabla de caracteres, en este caso, muestra la suma de esta diagonal. En este caso, los elementos de reflexión mezclan ambas funciones, es decir, $\sigma_v \psi = \pm 1 \psi'$ donde ψ y ψ' se transforman frente a las rotaciones con $1, \varepsilon$ y ε^2 o $1, -\varepsilon$ y $-\varepsilon^2$, respectivamente. Por lo tanto, las matrices de dimensión 2×2 asociadas a las reflexiones sólo tienen elementos fuera de la diagonal. En el caso de C_{4v} hay tres representaciones, de las cuales una es bidimensional. Para $j = 1$ la representación se comporta como en el caso de C_{3v} cuando $j = 1$. Como se observa para las funciones de la primera representación el valor de k es siempre la unidad, mientras que en el caso de la segunda representación este valor es $1, \varepsilon$ y ε^2 o bien $1, -\varepsilon$ y $-\varepsilon^2$. En el caso de la tercera representación, todos los autovalores son ± 1 , es decir, puede tomar valores negativos, a diferencia de la primera representación.

En la figura B.0.2 se presenta para los grupos C_{3v} , C_{4v} y C_{6v} cómo se transforma la función ante una rotación de un ángulo igual a $\frac{2\pi}{n}$. En este caso cada flecha representa cómo se comportan las autofunciones pertenecientes a cada una de las representaciones irreducibles. Las representaciones irreducibles unidimensionales se representan mediante flechas horizontales. Es fácil observar que las bidimensionales presentan autovalores mutuamente conjugados. Esta representación utiliza el hecho de que todo grupo de rotaciones de orden n es isomorfo al grupo formado por las raíces n -ésimas de la unidad.

El grupo de traslaciones en el plano P_a y grupo $O(2)$ son grupos abelianos, y por tanto todas sus representaciones irreducibles son unidimensionales.

Sea $\psi(\mathbf{x})$ y $\phi(\mathbf{x})$ dos funciones de $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}$ y $\mathcal{H}(\mathbf{x})$ un operador lineal tal que $\phi(\mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})$. Sea \mathcal{T} un grupo de g operadores que es isomorfo a un grupo T de transformaciones en el plano. Si \mathcal{T}_i , $i = 1, \dots, g$ es un elemento de este grupo, se llama *operador transformado* a $\mathcal{H}'(\mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathcal{T}_i^{-1}\mathbf{x})$. Además se cumple $\forall i$ que

$$\mathcal{H}'(\mathbf{x}) = \mathcal{T}_i \mathcal{H}(\mathbf{x}) \mathcal{T}_i^{-1}.$$

Veamos que la anterior propiedad es cierta. Si aplicamos un elemento de grupo a la función $\phi(\mathbf{x})$ obtenemos $\mathcal{T}_i \phi(\mathbf{x}) = \phi(\mathcal{T}_i^{-1} \mathbf{x}) = \mathcal{T}_i(\mathcal{H}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}))$. Además se cumple que $\phi(\mathcal{T}_i^{-1} \mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathcal{T}_i^{-1} \mathbf{x})\psi(\mathcal{T}_i^{-1} \mathbf{x})$. Por otra parte,

$$\mathcal{T}_i \mathcal{H}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) = \mathcal{T}_i \mathcal{H}(\mathbf{x}) \mathcal{T}_i^{-1} \mathcal{T}_i \psi(\mathbf{x}) = \mathcal{T}_i \mathcal{H}(\mathbf{x}) \mathcal{T}_i^{-1} \psi(\mathcal{T}_i^{-1} \mathbf{x}) = \mathcal{T}_i \phi(\mathbf{x}) = \phi(\mathcal{T}_i^{-1} \mathbf{x}).$$

Luego, necesariamente $\mathcal{T}_i \mathcal{H}(\mathbf{x}) \mathcal{T}_i^{-1} = \mathcal{H}(\mathcal{T}_i^{-1} \mathbf{x})$.

Decimos que un operador es *invariante* si se cumple que $\mathcal{H}(\mathcal{T}_i^{-1} \mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathbf{x})$. Evidentemente, esto implica que $\mathcal{T}_i \mathcal{H}(\mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathbf{x}) \mathcal{T}_i$, es decir, si un operador conmuta con todos los elementos de cierto grupo, decimos que el operador es invariante frente a dicho grupo.

Consideremos la ecuación de autovalores:

$$(B.0.3) \quad \mathcal{H}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) = \mu\psi(\mathbf{x}).$$

Si \mathcal{H} es invariante frente a los elementos de cierto grupo de operadores \mathcal{G} , entonces aplicando un elemento cualquiera $\mathcal{G}_i \in \mathcal{G}$ a la ecuación B.0.3 obtenemos:

$$\mathcal{G}_i \mathcal{H}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) = \mathcal{G}_i \mathcal{H}(\mathbf{x}) \mathcal{G}_i^{-1} \mathcal{G}_i \psi(\mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathbf{x}) \mathcal{G}_i \psi(\mathbf{x}) = \mu \mathcal{G}_i \psi(\mathbf{x}).$$

Por lo tanto, $\mathcal{G}_i \psi(\mathbf{x})$ es también una autofunción con el mismo autovalor. Si este autovalor es no degenerado se cumple que:

$$\mathcal{G}_i \psi(\mathbf{x}) = \lambda \psi(\mathbf{x}).$$

Si es degenerado con multiplicidad ν , se cumple que:

$$\mathcal{G}_i \psi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{\nu} \lambda_i \psi_i(\mathbf{x}).$$

Este resultado sugiere que en el espacio de Hilbert correspondiente, podemos elegir las autofunciones que lo diagonalizan como bases de una representación irreducible, donde los coeficientes $D(\mathcal{G}_i) = \lambda_i$. Esta base es irreducible porque los subespacios de dimensión igual a la multiplicidad del autovalor son invariantes frente a todos los operadores del grupo, que es la condición necesaria para obtener una representación irreducible. Si elegimos, por tanto, la base que diagonaliza el operador obtenemos una matriz *quasi*-diagonal, como las necesarias para obtener representaciones irreducibles.

Además, debido a que, tal y como hemos visto más arriba, el número de representaciones irreducibles de un grupo finito es a su vez finito y podemos caracterizarlas a través de las relaciones de ortogonalidad, podemos obtener expresiones para los coeficientes $D(\mathcal{G}_i)$. Es decir, podremos clasificar las autofunciones del operador como pertenecientes a distintas representaciones irreducibles de índice j del grupo y caracterizarlas a través de los coeficientes correspondientes. Esto permitirá obtener predicciones sobre su forma funcional, ya que deben transformarse según estos coeficientes cuando se apliquen los operadores correspondientes a cada una de las clases del grupo. Finalmente, podremos tener información a priori sobre la dimensión de los subespacios, y por lo tanto sobre la multiplicidad de los autovalores.

Invariancia traslacional, funciones de Bloch y teorema de Bloch

C.1. Teoría de las funciones de Bloch

Los conceptos del presente apéndice se pueden consultar en referencias como [232].

Se llama *red de Bravais* (bidimensional) sobre el plano $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ a todos los puntos $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^2$ que cumplen $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$, con \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 dos vectores no alineados conocidos como vectores primitivos y $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$. Una traslación $P_{\mathbf{R}}$ se obtiene como composición de las traslaciones correspondientes en las direcciones de cada uno de los vectores primitivos de la red, es decir, $P_{\mathbf{R}} = P_{\mathbf{a}_1}^{n_1} P_{\mathbf{a}_2}^{n_2}$, donde $P_{\mathbf{a}_i}^{n_i}$ es la traslación en la dirección de \mathbf{a}_i una distancia $n_i |\mathbf{a}_i|$ con $i = 1, 2$. Supongamos que una figura periódica en el plano determinada por $\mathbf{D}_1 = \bar{n}_1 \mathbf{a}_1$ y $\mathbf{D}_2 = \bar{n}_2 \mathbf{a}_2$, con \bar{n}_1, \bar{n}_2 de modo que $P_{\mathbf{a}_i}^{\bar{n}_i} = P_{\mathbf{a}_i}$, $i = 1, 2$. En este caso el grupo es el producto directo de dos grupos cíclicos en cada una de las direcciones. Nuevamente, las representaciones irreducibles de cada uno de los grupos $\mathcal{P}_{\mathbf{a}_i}$ se definen por los números $e^{i \frac{2\pi}{\bar{n}_i} m_i}$ con $m_i = 0, 1, \dots, \bar{n}_i - 1$ y $i = 1, 2$. Por lo tanto, las representaciones irreducibles del grupo $\mathcal{P}_{\mathbf{R}}$ cumplen que $\mathcal{P}_{\mathbf{R}} \psi = \rho_{\mathbf{R}} \psi$, donde $\rho_{\mathbf{R}}$ es una potencia de:

$$\exp \left(i 2\pi \left(\frac{m_1}{\bar{n}_1} + \frac{m_2}{\bar{n}_2} \right) \right),$$

con lo que la pareja de números m_1, m_2 definen las representaciones irreducibles en este caso.

En una red de Bravais bidimensional definida por los puntos $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$, con vectores primitivos \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 y $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$, se denomina *celda primitiva* a aquella área que trasladada a las posiciones de todos los vectores de la red permite reproducir todo el plano sin superponerse sobre sí misma. Un tipo de celda primitiva es la conocida como *celda de Wigner-Seitz* en torno a un punto de una red de Bravais, a la región del plano que está más cerca de ese punto que de cualquier otro punto de la red.

Consideremos una onda plana $f(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$, donde $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$ se denomina momento lineal. Aquellos vectores \mathbf{k} que dan lugar a ondas planas con la misma periodicidad que la red de Bravais definida por los vectores \mathbf{R} constituyen la *red recíproca*. Por lo tanto, los vectores de la red recíproca cumplen que $e^{i\mathbf{K}(\mathbf{x}+\mathbf{R})} = e^{i\mathbf{K}\mathbf{x}}$ o bien $e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} = 1$. Es fácil ver que estos vectores forman una red de Bravais $\mathbf{K} = \tilde{n}_1 \mathbf{b}_1 + \tilde{n}_2 \mathbf{b}_2$ con $\tilde{n}_1, \tilde{n}_2 \in \mathbb{Z}$ donde los \mathbf{b}_j cumplen que $\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ siendo δ_{ij} la función delta de Kronecker ($\delta_{ij} = 1$ si $i = j$ y $\delta_{ij} = 0$ si $i \neq j$). Sean \mathbf{i} y \mathbf{j} los versores que definen unos ejes cartesianos. Si \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 forman un ángulo α podemos expresarlos como $\mathbf{a}_1 = |\mathbf{a}_1| \mathbf{i}$ y $\mathbf{a}_2 = |\mathbf{a}_2| (\cos \alpha \mathbf{i} + \sin \alpha \mathbf{j})$. Consecuentemente, para que se cumpla la condición

anterior $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{|\mathbf{a}_1|} (\mathbf{i} - \frac{\cos \alpha}{\sin \alpha} \mathbf{j})$ y $\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{|\mathbf{a}_2|} (\frac{1}{\sin \alpha} \mathbf{j})$. Si $\alpha = \frac{\pi}{2}$ y $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$ entonces $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \mathbf{i}$ y $\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \mathbf{j}$.

Se conoce como *primera zona de Brillouin* a la celda de Wigner-Seitz de la red recíproca. Cualquier vector \mathbf{k}' dentro de esta celda se puede expresar como un vector de la primera zona de Brillouin \mathbf{k} más un vector de la red, recíproca es decir, $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{K}$. Si tenemos en cuenta la simetría de esta celda podemos reducir el área necesaria que ofrece todos los valores de \mathbf{k} distintos, es decir, que cualquier vector \mathbf{k}' se puede expresar en función de pseudomomentos sólo de esta área, que se denomina *zona irreducible de Brillouin*.

Se dice que una función de $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}$ es de Bloch si tiene la forma

$$(C.1.1) \quad f(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} u(\mathbf{x}),$$

donde $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^2$, $u(\mathbf{x}) = u(\mathbf{x} + \mathbf{R})$, $\forall \mathbf{R}$ perteneciente a una red de Bravais con vectores primitivos \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 .

TEOREMA C.1.1. *(de Bloch) Los autoestados ψ de un operador de la forma $\Delta + V(\mathbf{x})$ donde Δ es el operador Laplaciano $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ y $V(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x} + \mathbf{R})$, para todos los \mathbf{R} pertenecientes a la red de Bravais, tienen la forma funcional de Bloch.*

COROLARIO C.1.2. *Si ψ cumple condiciones de contorno periódicas en un dominio de lados D_1 y D_2 , es decir, $\psi(x + D_1, y) = \psi(x, y)$ y $\psi(x, y + D_2) = \psi(x, y)$, con $D_1 = N_1 |\mathbf{a}_1|$ y $D_2 = N_2 |\mathbf{a}_2|$, los momentos permitidos están discretizados, están separados un $\Delta \mathbf{k} = \frac{\mathbf{b}_1}{N_1} \frac{\mathbf{b}_2}{N_2}$ y sólo hay momentos distintos en la primera zona de Brillouin.*

Las demostraciones correspondientes se pueden consultar en libros de estado sólido como [232]. La variable p es análoga a un momento lineal, ya que es propia del operador de traslaciones $\mathcal{P}_{\mathbf{R}}$ isomorfo a la transformación $P_{\mathbf{R}}$, definida como $P_{\mathbf{R}} \mathbf{x} = \mathbf{x} + \mathbf{R}$. Por lo tanto, $\mathcal{P}_{\mathbf{R}} f(\mathbf{x}) = f(P_{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{x}) = f(\mathbf{x} - \mathbf{R})$. Sin embargo, como el operador no presenta invariancia traslacional continua, no se puede decir que sea un momento lineal. También se observa que es la extensión del momento lineal en potenciales homogéneos al caso de potenciales periódicos. Consecuentemente, como no se trata realmente de un momento se denomina *pseudomomento lineal*. Los valores de \mathbf{p} siempre se pueden reducir a la primera zona de Brillouin, aplicando los razonamientos sobre \mathbf{k} que hemos realizado anteriormente.

C.2. Elementos de materia condensada

Las funciones y el teorema de Bloch se utilizan, por ejemplo, en el ámbito del estudio de la estructura electrónica de cristales, para representar las funciones de onda de los estados de un sistema que está caracterizado por un operador como el presentado más arriba. En dicho contexto, se intentó relacionar la función de onda global del sistema con las funciones 'atómicas' que describen el comportamiento de cada uno de los electrones en cada una de las celdas individuales. Sin embargo, estas funciones individuales no eran ortogonales entre sí, por lo que no eran adecuadas para descomponer la función de Bloch que describía el sistema. Gregory Wannier [227] encontró la forma de las funciones localizadas en cada uno de las distintas celdas elementales que permitían este tipo de descomposición de la función de onda.

Se denomina *funciones de Wannier* a las funciones de $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}$ definidas a partir del espectro de funciones de Bloch¹:

$$W_\alpha(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}_i} f_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x}).$$

Este tipo de funciones permiten la expresión de una función de Bloch individual como:

$$f_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{\hat{i}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}_i} W_\alpha(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i).$$

Veamos que las funciones de Wannier son ortogonales tal y como se demuestra en [227, 228]:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} d^2 x W_\beta^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) W_\alpha(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) &= \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \int_{\Omega} d^2 x e^{i(\mathbf{p}'\mathbf{x}_j - \mathbf{p}\mathbf{x}_i)} f_{\mathbf{p},\alpha}^*(\mathbf{x}) f_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x}) = \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} e^{i(\mathbf{p}'\mathbf{x}_j - \mathbf{p}\mathbf{x}_i)} \int_{\Omega} d^2 x f_{\mathbf{p},\alpha}^*(\mathbf{x}) f_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{x}) = \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} e^{i(\mathbf{p}'\mathbf{x}_j - \mathbf{p}\mathbf{x}_i)} \delta_{\mathbf{p}',\mathbf{p}} \delta_{\beta\alpha} = \\ &= \frac{\delta_{\alpha\beta}}{N^2} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i)} = \\ &= \left[\begin{array}{l} p_x = \frac{2\pi}{L} n_x \\ p_y = \frac{2\pi}{L} n_y \end{array} \right\} \\ &\quad \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{p}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) = \\ \frac{2\pi}{L} a[n_x(i_x - j_x) + n_y(i_y - j_y)] \end{array} \right\} = \\ &= \frac{\delta_{\alpha\beta}}{N^2} \sum_{n_x, n_y} e^{i\frac{2\pi}{L} a n_x (i_x - j_x)} e^{i\frac{2\pi}{L} a n_y (i_y - j_y)} = \\ &= \frac{\delta_{\alpha\beta}}{N^2} N \delta_{i_x j_x} N \delta_{i_y j_y} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{i_x j_x} \delta_{i_y j_y} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \int_{\Omega} d^2 x W_\beta^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) W_\alpha(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\hat{i}\hat{j}}$$

donde hemos usado las condiciones de normalización de las funciones de Bloch. Por lo tanto, dichas funciones sirven como base para expandir cualquier función definida en Ω :

$$(C.2.1) \quad \phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{\hat{i}, \alpha} C_{\alpha, \hat{i}} W_\alpha(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$$

¹Como consideramos condiciones periódicas basta con considerar el sumatorio de los momentos discretos en la zona de Brillouin irreducible. Si no consideráramos condiciones periódicas tendríamos que definir las mediante la integral en esta zona.

Esta base presenta la ventaja de que si ϕ es una función de Bloch, entonces $C_{\alpha, \hat{i}} = e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}_i}$. Veamos otras posibles normalizaciones. Si tomamos coeficientes $C'_{\alpha, \hat{i}} = N^{-1}C_{\alpha, \hat{i}}$ entonces cualquier función $\phi(\mathbf{x})$ definida en Ω se puede expresar como:

$$(C.2.2) \quad \boxed{\phi(\mathbf{x}) = \sum_{\hat{i}, \alpha} C'_{\alpha, \hat{i}} W_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)}$$

Con esta convención, si ϕ es una función de Bloch, entonces $C'_{\alpha, \hat{i}} = N^{-1}e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}_i}$. Una última posibilidad es, dada una de las funciones de Bloch del espectro, $\phi(\mathbf{x}) = f_{\mathbf{p}, \alpha}(\mathbf{x})$ tomar la función $P(\phi)$ definida como

$$\boxed{P = \int_{\Omega} d^2x \phi^*(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} d^2x f_{\mathbf{p}, \alpha}^*(\mathbf{x}) f_{\mathbf{p}, \alpha}(\mathbf{x})}$$

y definir los coeficientes $C''_{\alpha, \hat{i}} = P^{\frac{1}{2}}C'_{\alpha, \hat{i}}$. Con esta definición de los coeficientes, cualquier función ϕ puede ser expresada como:

$$(C.2.3) \quad \boxed{\phi(\mathbf{x}) = \sum_{\hat{i}, \alpha} C''_{\alpha, \hat{i}} W_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)}$$

Es fácil comprobar que

$$\int_{\Omega} d^2x f_{\mathbf{x}, \alpha}^*(\mathbf{x}) f_{\mathbf{x}, \alpha}(\mathbf{x}) = \frac{P}{N^2} \sum_{\hat{i}, \hat{j}} e^{-i\mathbf{p}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)} \int_{\Omega} W_{\alpha}^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) W_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = P$$

ya que $\int_{\Omega} W_{\alpha}^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) W_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = \delta_{\hat{i}, \hat{j}}$. En este caso, si ϕ es una función de Bloch, entonces $C''_{\alpha, \hat{i}} = N^{-1}P^{\frac{1}{2}}e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}_i}$. En particular, puede tratarse de la función usada para definir P .

Métodos numéricos

D.1. Introducción

La teoría presentada requiere dos tipos de métodos numéricos diferentes: métodos capaces de obtener soluciones aproximadas de las ecuaciones de estados estacionarios como 2.2.1 y métodos capaces de simular la dinámica modelizada por ecuaciones como 4.2.1. En ambos casos hay una extensa literatura disponible. Para estudiar la dinámica el método más extendido es el método de paso dividido (*split-step*) [5] basado en la resolución de las derivadas en el espacio de Fourier y del resto en el espacio de posiciones, utilizando una serie de aproximaciones para poder combinar ambos resultados. En la presente Tesis se ha adaptado el método para poder utilizarlo en mallados con distintos potenciales $V(\mathbf{x})$, incluido algunos con saltos de índice abruptos, los cuales han requerido de una cuidadosa implementación en los bordes de los escalones del potencial. Asimismo se ha programado el método para que calcule durante la evolución distintas variables como la energía, el valor de $\langle \mu \rangle$, la potencia P , el pseudomomento angular o lineal, etc. Todos ellos han sido definidos a lo largo de la Tesis.

Para estudiar las soluciones estacionarias se ha planteado un método convencional de diferencias finitas adaptado al caso no lineal y se ha modificado para poder aplicarlo a dominios no rectangulares y mallados distintos del rectangular, con el fin de poder estudiar una mayor variedad de casos. Este método se describe en los siguientes apartados ya que no es convencional en la literatura y su generalización en términos de mallados y dominios es todavía una cuestión abierta en la investigación de métodos numéricos.

D.2. Método para la ecuación de estados estacionarios

La ecuación de estados estacionarios 2.2.1 suele definirse en $\Omega \equiv \mathbb{R}^2$ utilizando las condiciones de contorno $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(\mathbf{x}) = 0$ y $\lim_{y \rightarrow \pm\infty} \psi(\mathbf{x}) = 0$. Para resolver numéricamente esta ecuación se suele definir \mathbf{x} en un dominio finito y se utilizan otro tipo de condiciones de contorno. En la presente tesis utilizaremos condiciones de contorno nulas en los extremos del dominio, es decir, $\psi(x, \pm L) = \psi(\pm L, y) = 0$.

Supongamos que Ω es un dominio cuadrado de dimensiones $D \times D$, es decir, $\Omega = \{\mathbf{x} / \mathbf{x} \in]-\frac{D}{2}, \frac{D}{2}[\cup]-\frac{D}{2}, \frac{D}{2}[\}$. Sea $N \in \mathbb{N}$. Definamos el espaciado h como $h = \frac{D}{N}$. Construyamos un mallado rectangular sobre Ω cuyos nodos son los puntos de coordenadas $\mathbf{x}_{i,j} = (x_i, y_j)$ donde $x_i = ih$ y $y_j = jh$, con $i = -\frac{N-1}{2}, -\frac{N-1}{2} + 1, \dots, \frac{N-1}{2}$ y $j = -\frac{N-1}{2}, -\frac{N-1}{2} + 1, \dots, \frac{N-1}{2}$ si N es impar. En adelante tomaremos siempre N impar para asegurarnos que tenemos un nodo en $\mathbf{x}_{0,0} = (0, 0)$. Denotaremos como $\psi_{i,j} = \psi(\mathbf{x}_{i,j})$.

Vamos a tomar diferencias centradas para aproximar las derivadas parciales de la ecuación 2.2.1:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \approx \frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{h^2},$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \approx \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{h^2}.$$

El término $V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})$ lo aproximaremos como $V_{ij}\psi_{i,j} = V(\mathbf{x}_{i,j})\psi(\mathbf{x}_{i,j})$ y el término no lineal como $|\psi(\mathbf{x}_{i,j})|^2 \psi(\mathbf{x}_{i,j}) = |\psi_{i,j}|^2 \psi_{i,j}$. Asimismo fijaremos el autovalor μ a un valor arbitrario $\mu \in \mathbb{R}$. Con estas aproximaciones la ecuación diferencial 2.2.1 se transforma en un conjunto de ecuaciones no lineales que para un punto (i, j) interior al dominio tienen la forma:

$$\frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{h^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{h^2} + V_{ij}\psi_{i,j} + |\psi_{i,j}|^2 \psi_{i,j} = \mu\psi_{i,j}.$$

Se debe tener en cuenta que para $\psi_{-\frac{N-1}{2},j}$, $\psi_{\frac{N-1}{2},j}$, $\psi_{i,-\frac{N-1}{2}}$ y $\psi_{i,\frac{N-1}{2}}$ es necesario definir las condiciones de contorno adecuadas. Vamos, por tanto, a analizar por separado los dos tipos de condiciones de contorno nulas, es decir, $\psi(x, \pm L) = \psi(\pm L, y) = 0$ y por lo tanto $\psi_{-\frac{N-1}{2},j} = \psi_{\frac{N-1}{2},j} = \psi_{i,-\frac{N-1}{2}} = \psi_{i,\frac{N-1}{2}} = 0$. El sistema de $(N-2)^2$ ecuaciones no lineales constará de $(N-4)^2$ ecuaciones como la siguiente:

$$(D.2.1) \quad \frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{h^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{h^2} + V_{ij}\psi_{i,j} + |\psi_{i,j}|^2 \psi_{i,j} = \mu\psi_{i,j},$$

para $i = -\frac{N-1}{2} + 2, -\frac{N-1}{2} + 3, \dots, \frac{N-1}{2} - 2$ y $j = -\frac{N-1}{2} + 2, -\frac{N-1}{2} + 3, \dots, \frac{N-1}{2} - 2$. Además tendremos los siguientes cuatro grupos de $N-2$ ecuaciones:

$$\frac{\psi_{-\frac{N-1}{2}+2,j} - 2\psi_{-\frac{N-1}{2}+1,j}}{h^2} + \frac{\psi_{-\frac{N-1}{2}+1,j+1} - 2\psi_{-\frac{N-1}{2}+1,j} + \psi_{-\frac{N-1}{2}+1,j-1}}{h^2} + V_{-\frac{N-1}{2}+1,j}\psi_{-\frac{N-1}{2}+1,j} + \left| \psi_{-\frac{N-1}{2}+1,j} \right|^2 \psi_{-\frac{N-1}{2}+1,j} = \mu\psi_{-\frac{N-1}{2}+1,j},$$

con $j = -\frac{N-1}{2} + 2, -\frac{N-1}{2} + 3, \dots, \frac{N-1}{2} - 2$,

$$\frac{\psi_{i+1,-\frac{N-1}{2}+1} - 2\psi_{i,-\frac{N-1}{2}+1} + \psi_{i-1,-\frac{N-1}{2}+1}}{h^2} + \frac{\psi_{i,-\frac{N-1}{2}+2} - 2\psi_{i,-\frac{N-1}{2}+1} + \psi_{i,-\frac{N-1}{2}+1}}{h^2} + V_{i,-\frac{N-1}{2}+1}\psi_{i,-\frac{N-1}{2}+1} + \left| \psi_{i,-\frac{N-1}{2}+1} \right|^2 \psi_{i,-\frac{N-1}{2}+1} = \mu\psi_{i,-\frac{N-1}{2}+1},$$

con $i = -\frac{N-1}{2} + 2, -\frac{N-1}{2} + 3, \dots, \frac{N-1}{2} - 2$,

$$\frac{-2\psi_{\frac{N-1}{2}-1,j} + \psi_{\frac{N-1}{2}-2,j}}{h^2} + \frac{\psi_{\frac{N-1}{2}-1,j+1} - 2\psi_{\frac{N-1}{2}-1,j} + \psi_{\frac{N-1}{2}-1,j-1}}{h^2} + V_{\frac{N-1}{2}-1,j}\psi_{\frac{N-1}{2}-1,j} + \left| \psi_{\frac{N-1}{2}-1,j} \right|^2 \psi_{\frac{N-1}{2}-1,j} = \mu\psi_{\frac{N-1}{2}-1,j},$$

con $j = -\frac{N-1}{2} + 2, -\frac{N-1}{2} + 3, \dots, \frac{N-1}{2} - 2$ y

$$\frac{\psi_{i+1,\frac{N-1}{2}-1} - 2\psi_{i,\frac{N-1}{2}-1} + \psi_{i-1,\frac{N-1}{2}-1}}{h^2} + \frac{-2\psi_{i,\frac{N-1}{2}-1} + \psi_{i,\frac{N-1}{2}-2}}{h^2} + V_{i,\frac{N-1}{2}-1}\psi_{i,\frac{N-1}{2}-1} + \left| \psi_{i,\frac{N-1}{2}-1} \right|^2 \psi_{i,\frac{N-1}{2}-1} = \mu\psi_{i,\frac{N-1}{2}-1},$$

con $i = -\frac{N-1}{2} + 2, -\frac{N-1}{2} + 3, \dots, \frac{N-1}{2} - 2$. Y por último las siguientes cuatro ecuaciones:

$$\begin{aligned}
& \frac{\psi_{-\frac{N-1}{2}+2, -\frac{N-1}{2}+1} - 2\psi_{-\frac{N-1}{2}+1, -\frac{N-1}{2}+1}}{h^2} + \frac{\psi_{-\frac{N-1}{2}+1, -\frac{N-1}{2}+2} - 2\psi_{-\frac{N-1}{2}+1, -\frac{N-1}{2}+1}}{h^2} \\
& \quad + V_{-\frac{N-1}{2}+1, -\frac{N-1}{2}+1} \psi_{-\frac{N-1}{2}+1, -\frac{N-1}{2}+1} \\
& \quad + \left| \psi_{-\frac{N-1}{2}+1, -\frac{N-1}{2}+1} \right|^2 \psi_{-\frac{N-1}{2}+1, -\frac{N-1}{2}+1} = \mu \psi_{-\frac{N-1}{2}+1, -\frac{N-1}{2}+1}, \\
& \frac{\psi_{-\frac{N-1}{2}+2, \frac{N-1}{2}-1} - 2\psi_{-\frac{N-1}{2}+1, \frac{N-1}{2}-1}}{h^2} + \frac{-2\psi_{-\frac{N-1}{2}+1, \frac{N-1}{2}-1} + \psi_{-\frac{N-1}{2}+1, \frac{N-1}{2}-2}}{h^2} \\
& \quad + V_{-\frac{N-1}{2}+1, \frac{N-1}{2}-1} \psi_{-\frac{N-1}{2}+1, \frac{N-1}{2}-1} \\
& \quad + \left| \psi_{-\frac{N-1}{2}+1, \frac{N-1}{2}-1} \right|^2 \psi_{-\frac{N-1}{2}+1, \frac{N-1}{2}-1} = \mu \psi_{-\frac{N-1}{2}+1, \frac{N-1}{2}-1}, \\
& \frac{-2\psi_{\frac{N-1}{2}-1, \frac{N-1}{2}-1} + \psi_{\frac{N-1}{2}-2, \frac{N-1}{2}-1}}{h^2} + \frac{-2\psi_{\frac{N-1}{2}-1, \frac{N-1}{2}-1} + \psi_{\frac{N-1}{2}-1, \frac{N-1}{2}-2}}{h^2} \\
& \quad + V_{\frac{N-1}{2}-1, \frac{N-1}{2}-1} \psi_{\frac{N-1}{2}-1, \frac{N-1}{2}-1} \\
& \quad + \left| \psi_{\frac{N-1}{2}-1, \frac{N-1}{2}-1} \right|^2 \psi_{\frac{N-1}{2}-1, \frac{N-1}{2}-1} = \mu \psi_{\frac{N-1}{2}-1, \frac{N-1}{2}-1}, \\
& \frac{-2\psi_{\frac{N-1}{2}-1, -\frac{N-1}{2}+1} + \psi_{\frac{N-1}{2}-2, -\frac{N-1}{2}+1}}{h^2} + \frac{\psi_{\frac{N-1}{2}-1, -\frac{N-1}{2}+2} - 2\psi_{\frac{N-1}{2}-1, -\frac{N-1}{2}+1}}{h^2} \\
& \quad + V_{\frac{N-1}{2}-1, -\frac{N-1}{2}+1} \psi_{\frac{N-1}{2}-1, -\frac{N-1}{2}+1} \\
& \quad + \left| \psi_{\frac{N-1}{2}-1, -\frac{N-1}{2}+1} \right|^2 \psi_{\frac{N-1}{2}-1, -\frac{N-1}{2}+1} = \mu \psi_{\frac{N-1}{2}-1, -\frac{N-1}{2}+1}.
\end{aligned}$$

Para poder escribir las anteriores ecuaciones matricialmente utilizaremos un índice contraído k definido como $k = i + \frac{N-1}{2} + (j - 1 + \frac{N-1}{2}) * (N - 2)$, con $i = -\frac{N-1}{2} + 1, \dots, \frac{N-1}{2} - 1$ y $j = -\frac{N-1}{2} + 1, \dots, \frac{N-1}{2} - 1$. Con este índice construyamos el vector $\Psi = [\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{(N-2)^2}]^T$. Ordenando las anteriores ecuaciones de acuerdo con el nuevo índice se obtiene la siguiente ecuación matricial no lineal:

$$A\Psi + B(\Psi)\Psi = \mu\Psi,$$

donde

$$A_{M \times M} = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{\bar{N} \times \bar{N}} & E_{\bar{N} \times \bar{N}} & 0_{\bar{N} \times \bar{N}} & \dots & 0_{\bar{N} \times \bar{N}} & 0_{\bar{N} \times \bar{N}} \\ E_{\bar{N} \times \bar{N}} & \tilde{A}_{\bar{N} \times \bar{N}} & E_{\bar{N} \times \bar{N}} & \dots & 0_{\bar{N} \times \bar{N}} & 0_{\bar{N} \times \bar{N}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0_{\bar{N} \times \bar{N}} & 0_{\bar{N} \times \bar{N}} & 0_{\bar{N} \times \bar{N}} & \dots & E_{\bar{N} \times \bar{N}} & \tilde{A}_{\bar{N} \times \bar{N}} \end{pmatrix},$$

siendo $\bar{N} = (N - 2)$, $M = (N - 2)^2$, \tilde{A} la matriz de tamaño $(N - 2) \times (N - 2)$ siguiente

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} \frac{-2}{h^2} + V_1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & \frac{-2}{h^2} + V_2 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \frac{-2}{h^2} + V_M \end{pmatrix},$$

y $E_{(N-2) \times (N-2)}$ y $0_{(N-2) \times (N-2)}$ las matrices identidad y nula de tamaño $(N-2) \times (N-2)$ respectivamente. Por otra parte, $B(\Psi)$ es la matriz de dimensión $M \times M$ siguiente:

$$B(\Psi) = \begin{pmatrix} |\psi_1|^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & |\psi_2|^2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & |\psi_M|^2 \end{pmatrix}.$$

Si denominamos $F(\Psi) = A + B(\Psi) - \mu E_{M \times M}$ obtenemos

$$F(\Psi)\Psi = 0_M,$$

que puede ser resuelto utilizando los métodos convencionales de resolución de ecuaciones matriciales no lineales, de los que el método más convencional es el método de Newton-Raphson. Para los problemas que se resuelven en la presente Tesis basta con utilizar el método de Newton-Raphson dado que la velocidad de convergencia es lo suficientemente rápida y podemos obtener condiciones iniciales aproximadas a la solución utilizando la forma funcional que obtuvimos en capítulos anteriores mediante consideraciones de teoría de grupos.

D.3. Generalización a mallados y dominios no rectangulares

En ocasiones resulta interesante resolver la ecuación 2.2.1 en dominios no rectangulares y mallados no cuadrados. Los métodos de diferencias finitas generalizados (MDFG) permiten resolver ecuaciones diferenciales lineales en derivadas parciales cuando el mallado, el dominio o ambos son no rectangulares o incluso irregulares [233, 234]. Sin embargo, los MDFG presentan una desventaja fundamental en sus aplicaciones prácticas [235, 236, 237, 238]. En general, es necesario obtener los coeficientes de las fórmulas de diferencias finitas en cada nodo de la red y, bajo ciertas condiciones, para obtener dichos coeficientes se deben resolver sistemas lineales de ecuaciones que involucran matrices singulares o mal condicionadas. En la actualidad hay dos alternativas para superar dicho problema: i) utilizar sistemas de ecuaciones sobredeterminados y una estrategia de promediado [236] o de minimización [239] o ii) tomar sistemas determinados de ecuaciones e imponer una condición geométrica, similar a las utilizadas en los problemas de interpolación polinómica [240, 241], sobre el conjunto de nodos utilizado. La primera estrategia ha sido ampliamente adoptada [242, 243], pero presenta la desventaja de que dificulta el control del orden de aproximación y la estabilidad. La segunda estrategia ha recibido poca atención, debido a que se asumía que la caracterización geométrica se traducía en una fuerte restricción sobre la posición de los nodos que finalmente hacía dicha estrategia inhábil en mallados irregulares.

En [244] se presenta un MDFG basado en imponer ciertas condiciones geométricas sobre el conjunto de nodos utilizado para obtener los coeficientes de la fórmula de diferencias finitas correspondiente a cada nodo del mallado. Estas condiciones geométricas se obtuvieron en [245], y se basan en las *redes de Cotmèlec*, definidas en [246]. Cuando se calculan las derivadas utilizando una red de Coatmèlec se eliminan los problemas de singularidad en el sistema de ecuaciones que permite obtener los coeficientes. Dicho método permite utilizar mallados muy irregulares manteniendo el control sobre el orden de aproximación. En [244] se presenta un

método para generar mallados irregulares con la propiedad de que se satisfagan las condiciones geométricas adecuadas y un algoritmo que permite obtener los coeficientes. El MDFG desarrollado en [244] se basa en la utilización de este método de generación de mallados y del algoritmo de búsqueda de redes de Cotmèlec.

El método introducido en [244] se aplica fácilmente a ecuaciones diferenciales en derivadas parciales no lineales como la ecuación 2.2.1. Para ello se discretiza el operador diferencial siguiendo el método presentado en [244] y se aproxima la función no lineal en cada nodo. Es decir, sea un mallado con N nodos sobre el dominio Ω generados con la estrategia descrita en [244]. Para dicho mallado, escribamos la siguiente ecuación:

$$\tilde{L}\psi + F\psi = 0$$

donde \tilde{L} y ψ son una matriz y el vector de dimensión $N \times N$ y $N \times 1$ y $F = (f(\mathbf{x}_1, |\psi_1|^2), \dots, f(\mathbf{x}, |\psi_N|^2))^T$. La matriz \tilde{L} se construye aplicando el algoritmo descrito en [244] sobre el mallado. Este sistema de ecuaciones no lineales puede ser resuelto con cualquier método convencional, de los que el más sencillo es el método de Newton-Raphson. Las condiciones de contorno consideradas son de tipo Dirichlet, es decir $\psi(\mathbf{x}) = 0, \forall \mathbf{x} \in \delta\Omega$ donde $\delta\Omega$ es la frontera de Ω .

Para ilustrar el método se resolvió la ecuación de estados estacionarios 2.2.1 para un solitón fundamental en diferentes mallados. Los resultados, presentados en [247], mostraron la validez del método en los mallados considerados. En el futuro se aplicará este método en dominios y potenciales lineales $V(\mathbf{x})$ irregulares, de modo que permita modelizar sistemas más próximos a la realidad física.

Hamiltoniano de las excitaciones de baja energía

E.1. Simplificación del término H_0 del hamiltoniano 6.4.5

Vamos a simplificar la siguiente expresión:

$$\cos(\varphi_j - \varphi_i) \stackrel{a \ll 1}{\approx} (-1)^{d_n} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla} \varphi(\vec{x}_i) \cdot \hat{n} \right)^2 \right] + O(\vec{\nabla} \varphi)^4.$$

Utilizando la ecuación 6.5.1 y la notación 6.5.2 podemos escribir, para un \hat{i} cualquiera:

$$\begin{aligned} \sum_j L_{ij} \cos(\varphi_i - \varphi_j) &\approx \sum_{\hat{n}} L_{\hat{n}} (-1)^{d_n} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla} \varphi(\vec{x}_i) \cdot \hat{n} \right)^2 \right] = \\ &= \sum_r \sigma_r \bar{d}_r L_r - \frac{1}{2} \sum_{r,s} \sigma_r \left(\vec{\nabla} \varphi \cdot \hat{n}_s \right)^2 L_r. \end{aligned}$$

Además, para un radio r fijo se cumple que

$$(E.1.1) \quad \sum_s \left(\vec{\nabla} \varphi \cdot \hat{n}_s \right)^2 = a^2 C_r \left(\vec{\nabla} \varphi \right) \left(\vec{\nabla} \varphi \right),$$

donde $C_r = 2kb_r^2$, para un anillo de degeneración $d_r = 4k$, $k \in \mathbb{Z}$ y $|\hat{r}| = b_r a$. Para demostrar este resultado hay que tener en cuenta que:

$$\begin{aligned} \sum_r \left(\vec{\nabla} \varphi \cdot \hat{n}_s \right)^2 &= \sum_r \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} |\hat{r}| \cos(\alpha_r) + \frac{\partial \varphi}{\partial y} |\hat{r}| \sin(\alpha_r) \right)^2 \\ &= \sum_r \left(\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 |\hat{r}|^2 \cos^2(\alpha_r) + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial y} |\hat{r}|^2 \cos(\alpha_r) \sin(\alpha_r) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 |\hat{r}|^2 \sin^2(\alpha_r) \right) \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta la simetría rotacional, para un anillo de degeneración $d_r = 4k$, con $k \in \mathbb{Z}$, hay k puntos de la red situados en ángulos del primer cuadrante, $\alpha_r^1, \dots, \alpha_r^k$, otros k puntos situados en el segundo cuadrante, con ángulos $\alpha_r^1 + \frac{\pi}{2}, \dots, \alpha_r^k + \frac{\pi}{2}$, k puntos situados en el tercer cuadrante, con ángulos $\alpha_r^1 + \pi, \dots, \alpha_r^k + \pi$ y, finalmente, k puntos situados en el cuarto cuadrante, con ángulos $\alpha_r^1 + \frac{3\pi}{2}, \dots, \alpha_r^k + \frac{3\pi}{2}$. Por lo tanto, el anterior sumatorio queda

$$\sum_{i=1}^k \left(\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 |\hat{r}|^2 (2 \cos^2(\alpha_i) + 2 \sin^2(\alpha_i)) + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial y} |\hat{r}|^2 (2 \cos(\alpha_i) \sin(\alpha_i)) \right. \\ \left. - 2 \cos(\alpha_i) \sin(\alpha_i) + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 |\hat{r}|^2 (2 \cos^2(\alpha_i) + 2 \sin^2(\alpha_i)) \right),$$

es decir:

$$\sum_{i=1}^k \left(2 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 |\hat{r}|^2 + 2 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 |\hat{r}|^2 \right) = 2 |\hat{r}|^2 k \left(\vec{\nabla} \varphi \right) \left(\vec{\nabla} \varphi \right).$$

Y, como podemos escribir $|\hat{r}| = b_r a$, se obtiene que $C_r = 2kb_r^2$. Por lo tanto,

$$(E.1.2) \quad \boxed{\sum_j L_{ij} \cos(\varphi_i - \varphi_j) \approx \eta_0^2 \left(+A_1 - a^2 A_2 \left(\vec{\nabla} \varphi \right)^2 \right)}$$

donde $A_1 \equiv \sum_r \bar{d}_r L_r \sigma_r$ y $A_2 \equiv \frac{1}{2} \sum_r L_r C_r \sigma_r$. Por otra parte, nótese que $O(\nabla \varphi) = O(a)$ ya que $\nabla \varphi \approx \frac{1}{a}(\varphi_j - \varphi_i)$.

E.2. Simplificación del término H_1 del hamiltoniano 6.4.5

Vamos a simplificar la ecuación:

$$H_1 \approx -\eta_0^4 \sum_{ij}' \sum_{\hat{n}, \hat{n}'} T_{ij(i+n)(j+n')} (-1)^{d_n+d_{n'}} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla} \varphi(\vec{x}_i) \cdot \hat{n} \right)^2 \right] \\ \cdot \left[1 - \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla} \varphi(\vec{x}_j) \cdot \hat{n}' \right)^2 \right] + O(\nabla \varphi)^4.$$

Operando y absorbiendo todos los términos de orden superior en $O(\nabla \varphi)^4$ obtenemos,

$$H_1 = -\eta_0^4 \sum_{ij}' \sum_{\hat{n}, \hat{n}'} T_{ij(i+n)(j+n')} \\ - \eta_0^4 \sum_{ij}' \sum_{\hat{n}, \hat{n}'} \frac{1}{2} T_{ij(i+n)(j+n')} (-1)^{d_n+d_{n'}} \left\{ \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n} \right)^2 + \left(\vec{\nabla} \varphi_j \cdot \hat{n}' \right)^2 \right\} \\ + O(\nabla \varphi)^4.$$

Denotaremos $\bar{H}_1 = -\eta_0^4 \sum_{ij}' \sum_{\hat{n}, \hat{n}'} T_{ij(i+n)(j+n')}$. En el último término podemos cambiar el índice \hat{j} por el \hat{i} y el índice \hat{n}' por \hat{n} con lo que se obtiene:

$$H_1 = \bar{H}_1 - \eta_0^4 \sum_{ij}' \sum_{\hat{n}, \hat{n}'} \frac{1}{2} T_{ij(i+n)(j+n')} (-1)^{d_n+d_{n'}} \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n} \right)^2 \\ - \eta_0^4 \sum_{ij}' \sum_{\hat{n}, \hat{n}'} \frac{1}{2} T_{ji(j+n')(i+n)} (-1)^{d_n+d_{n'}} \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n} \right)^2 + O(\nabla \varphi)^4.$$

Dado que debido a la invariancia traslacional se cumple que $T_{ji(j+n')(i+n)} = T_{ij(i+n)(j+n')}$, obtenemos:

$$\begin{aligned}
H_1 &= \bar{H}_1 - \eta_0^4 \sum'_{ij} \sum'_{\hat{n}, \hat{n}'} T_{ij(i+n)(j+n')} (-1)^{d_n+d_{n'}} \left(\vec{\nabla} \varphi_{\hat{i}} \cdot \hat{n} \right)^2 + O(\nabla \varphi)^4 \\
&= \bar{H}_1 - \eta_0^4 \sum'_{i\hat{n}} (-1)^{d_n} \left(\vec{\nabla} \varphi_{\hat{i}} \cdot \hat{n} \right)^2 \sum'_{j, \hat{n}'} (-1)^{d_{n'}} T_{ij(i+n)(j+n')} + O(\nabla \varphi)^4 \\
&= \bar{H}_1 - \eta_0^4 \sum'_{i\hat{n}} \sigma_n \left(\vec{\nabla} \varphi_{\hat{i}} \cdot \hat{n} \right)^2 \bar{T}_{i, (i+n)},
\end{aligned}$$

donde $\sigma_n = (-1)^{d_n}$ (véase la notación 6.5.1) y

$$\begin{aligned}
\bar{T}_{i, i+n} &\equiv \sum_{j\hat{n}'} T_{ij(i+n)(j+n')} (-1)^{d_{n'}} = \\
&= \int_{\Omega} d^2 \mathbf{x} \gamma(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{i}}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{i}+\hat{n}}) \left[\sum_{j\hat{n}'} (-1)^{d_{n'}} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{j}}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{j}+\hat{n}'}) \right] \\
&= \int_{\Omega} d^2 \mathbf{x} \gamma(\mathbf{x}) \bar{\gamma}(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{i}}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{i}+\hat{n}}),
\end{aligned}$$

donde $\bar{\gamma}(\mathbf{x}) = \sum_{j\hat{n}'} (-1)^{d_{n'}} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{j}}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{j}+\hat{n}'})$. Veamos que $\bar{\gamma}$ es invariante traslacional, $\bar{\gamma}(\mathbf{x}) = \bar{\gamma}(\mathbf{x} + \mathbf{x}_{\hat{i}})$:

$$\begin{aligned}
\bar{\gamma}(\mathbf{x} + \mathbf{x}_{\hat{i}}) &= \sum_{j\hat{n}'} (-1)^{d_{n'}} W(\mathbf{x} + \mathbf{x}_{\hat{i}} - \mathbf{x}_{\hat{j}}) W(\mathbf{x} + \mathbf{x}_{\hat{i}} - \mathbf{x}_{\hat{j}+\hat{n}'}) \\
&= \sum_{j\hat{n}'} (-1)^{d_{n'}} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{j}-\hat{i}}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{j}+\hat{n}'-\hat{i}}) \\
&= \left[\hat{j}' = \hat{j} - \hat{i} \right] = \sum_{j'\hat{n}'} (-1)^{d_{n'}} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{j}'}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{j}'+\hat{n}'}) = \bar{\gamma}(\mathbf{x}).
\end{aligned}$$

Por lo tanto, si hacemos la transformación $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{x}_{\hat{i}+\hat{n}}$ se obtiene:

$$\bar{T}_{i, i+n} = \int_{\Omega} d^2 \mathbf{x} \gamma(\mathbf{x} + \mathbf{x}_{\hat{i}}) \bar{\gamma}(\mathbf{x} + \mathbf{x}_{\hat{i}}) W(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - (\mathbf{x}_{\hat{i}+\hat{n}} - \mathbf{x}_{\hat{i}})),$$

donde $W(\mathbf{x}) = W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{0}})$. Como $\bar{\gamma}(\mathbf{x} + \mathbf{x}_{\hat{i}}) = \bar{\gamma}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x}_{\hat{i}+\hat{n}} - \mathbf{x}_{\hat{i}} = \mathbf{x}_{\hat{n}}$ y $\gamma(\mathbf{x} + \mathbf{x}_{\hat{i}}) = \gamma(\mathbf{x})$,

$$\bar{T}_{i, i+n} = \int_{\Omega} d^2 \mathbf{x} \gamma(\mathbf{x}) \bar{\gamma}(\mathbf{x}) W(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\hat{n}}) = \bar{T}_n.$$

Por lo tanto:

$$H_1 = \bar{H}_1 - \eta_0^4 \sum_{i, \hat{n}} \sigma_n \left(\vec{\nabla} \varphi_{\hat{i}} \cdot \hat{n} \right)^2 \bar{T}_n + O(\nabla \varphi)^4.$$

Como existe invariancia rotacional, $|\hat{n}| = r$ y podemos escribir \bar{T}_n para las celdas del anillo r -ésimo:

$$H_1 = \bar{H}_1 - \eta_0^4 \sum_i \sum_{r, s} \sigma_r \bar{T}_r \left(\vec{\nabla} \varphi_{\hat{i}} \cdot \hat{n}_s \right)^2 + O(\nabla \varphi)^4,$$

donde nuevamente el índice s recorre las celdas de un mismo anillo. Utilizando la relación E.1.1:

$$\begin{aligned} H_1 &= \bar{H}_1 - \eta_0^4 a^2 \sum_i \sum_r \sigma_r \bar{T}_r C_r \left(\vec{\nabla} \varphi_i \right)^2 + O(\nabla \varphi)^4 \\ &= \bar{H}_1 - \eta_0^4 a^2 \left(\sum_r \sigma_r \bar{T}_r C_r \right) \sum_i \left(\vec{\nabla} \varphi_i \right)^2 + O(\nabla \varphi)^4. \end{aligned}$$

En el límite continuo, $(a^2 \sum_i \rightarrow \int d^2 \mathbf{x})$:

$$H_1 \approx \bar{H}_1 - \eta_0^4 \left(\sum_r \sigma_r \bar{T}_r C_r \right) \int_{\Omega} d^2 x \left(\vec{\nabla} \varphi \right)^2,$$

y, finalmente,

$$(E.2.1) \quad \boxed{H_1 = \bar{H}_1 - \int_{\Omega} d^2 x [\eta_0^4 B_1] \left(\vec{\nabla} \varphi \right)^2}$$

donde $B_1 = \sum_r \bar{T}_r C_r \sigma_r$.

E.3. Simplificación del término H_2 del hamiltoniano 6.4.5

Veamos cómo se puede escribir de manera más sencilla el término:

$$\boxed{H_2 = \eta_0^4 \sum_{ijkl} '(-1)^{d_n + d_{n'}} T_{ijkl} \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n} \right) \left(\vec{\nabla} \varphi_j \cdot \hat{n}' \right) + O(\nabla \varphi)^4}$$

donde $\hat{n} = \hat{k} - \hat{i}$ y $\hat{n}' = \hat{l} - \hat{j}$. Debido a la invariancia traslacional podemos hacer la transformación $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{x}_i$ y se obtiene que :

$$\begin{aligned} T_{ijkl} &= \int d^2 \mathbf{x} \gamma(\mathbf{x}) W(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{j-i}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{k-i}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{l-i}) \\ &= T_{\hat{0}, \hat{j}-\hat{i}, \hat{k}-\hat{i}, \hat{l}-\hat{i}} = T_{\hat{0} \hat{n} \hat{n}' \hat{n}''}, \end{aligned}$$

donde $\hat{n} = \hat{j} - \hat{i}$, $\hat{n}' = \hat{k} - \hat{i}$ y $\hat{n}'' = \hat{l} - \hat{i}$. Expandamos $T_{\hat{0} \hat{n} \hat{n}' \hat{n}''}$ en torno a $\hat{n} = \hat{n}' = \hat{n}'' = \hat{0}$:

$$T_{\hat{0} \hat{n} \hat{n}' \hat{n}''} \approx T_{\hat{0} \hat{0} \hat{0} \hat{0}} + \hat{n} \frac{\partial T}{\partial \hat{n}} \Big|_{\hat{0}} + \hat{n}' \frac{\partial T}{\partial \hat{n}'} \Big|_{\hat{0}} + \hat{n}'' \frac{\partial T}{\partial \hat{n}''} \Big|_{\hat{0}} + O(n, n', n'')^2.$$

Debido a que las celdas son de lado a se cumple que $\hat{n}, \hat{n}', \hat{n}'' = O(a)$, luego:

$$T_{\hat{0} \hat{n} \hat{n}' \hat{n}''} \approx T_{\hat{0} \hat{0} \hat{0} \hat{0}} + O(a),$$

y por lo tanto, $T_{\hat{0} \hat{0} \hat{0} \hat{0}} = T_{iiii} = T$, es decir, es independiente de la celda debido a la invariancia traslacional. Teniendo en cuenta que $O(\nabla \varphi) = O(a)$ y que el término de mayor orden en H_2 es $O(a)^2$, se obtiene que los términos distintos de $T_{\hat{0} \hat{0} \hat{0} \hat{0}}$ contribuyen como $O(a)^3$. Consecuentemente,

$$\begin{aligned}
H_2 &= \eta_0^4 T \sum'_{ijkl} (-1)^{d_n+d_{n'}} \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n} \right) \left(\vec{\nabla} \varphi_j \cdot \hat{n}' \right) + O(a)^3 \\
&= \eta_0^4 T \sum'_{ij} \sum'_{\hat{n}\hat{n}'} (-1)^{d_n+d_{n'}} \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n} \right) \left(\vec{\nabla} \varphi_j \cdot \hat{n}' \right) + O(a)^3 \\
&= \eta_0^4 T \sum_{i\hat{n}} (-1)^{d_n} \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n} \right) \sum_{j\hat{n}'} (-1)^{d_{n'}} \left(\vec{\nabla} \varphi_j \cdot \hat{n}' \right) + O(a)^5.
\end{aligned}$$

Por otra parte, teniendo en cuenta la invariancia rotacional y utilizando la notación introducida en 6.5.1 (en particular recuérdese que $\sigma \equiv (-1)^{d_n}$ y que σ_r es el mismo para todos los vectores \hat{n} del mismo anillo r),

$$\begin{aligned}
\sum_{i\hat{n}} (-1)^{d_n} \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n} \right) &= \sum_{i\hat{n}} \sigma_n \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n} \right) = \sum_i \sum_{r,s} \sigma_r \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n}_s \right) \\
&= \sum_{i,r} \sigma_r \sum_s \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n}_s \right).
\end{aligned}$$

De nuevo, debido a la invariancia rotacional en el anillo r -ésimo, para cada posición s , se cumple que $\hat{n}_s \rightarrow -\hat{n}_s$, con lo que

$$\sum_{i\hat{n}} \sigma_n \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n} \right) = - \sum_{i,r} \sigma_r \sum_s \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n}_s \right),$$

por lo que,

$$\sum_{i\hat{n}} \sigma_n \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n} \right) = - \sum_{i,\hat{n}} \sigma_{\hat{n}} \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n} \right) \Rightarrow \sum_{i,\hat{n}} \sigma_{\hat{n}} \left(\vec{\nabla} \varphi_i \cdot \hat{n} \right) = 0,$$

y consecuentemente:

$$(E.3.1) \quad \boxed{H_2 = 0}$$

Ecuaciones de movimiento de las excitaciones de más baja energía

F.1. Obtención de las ecuaciones de movimiento a partir del lagrangiano

Vamos a obtener las ecuaciones de movimiento para las fluctuaciones en torno a las excitaciones a partir del lagrangiano 6.5.9. Para ello, tomemos en primer lugar variaciones respecto a φ

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} &= -\frac{\eta^2}{a^2} \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla} \varphi} &= 2(\eta^2 A_2 + \eta^4 B_1) \vec{\nabla} \varphi \end{aligned} \right\}$$

y por tanto,

$$\frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla_\alpha \varphi} = -2 \frac{1}{a^2} \eta \dot{\eta} + 2(\eta^2 A_2 + \eta^4 B_1) \nabla^2 \varphi = 0.$$

En segundo lugar, tomemos variaciones respecto a η , ya que ésta es variable con z , pese a la hipótesis de invariancia de fase, tal y como hemos visto más arriba. Se obtiene:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\eta}} &= 0 \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} &= -\frac{2}{a^2} \eta \dot{\varphi} + (2\eta A_2 + 4\eta^3 B_1) (\vec{\nabla} \varphi)^2 \end{aligned} \right\},$$

y entonces,

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\eta}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} = 0 \rightarrow -\frac{2}{a^2} \eta \dot{\varphi} + (2\eta A_2 + 4\eta^3 B_1) (\vec{\nabla} \varphi)^2 = 0.$$

F.2. Simplificación de las ecuaciones de movimiento 6.4.4

Veamos que podemos obtener las ecuaciones de movimiento de las excitaciones de más baja energía a partir de las ecuaciones de movimiento 6.4.4 y utilizando los mismos razonamientos que los utilizados para simplificar el hamiltoniano. Para el primer término se obtiene, utilizando la ecuación 6.5.2:

$$t_1 = \sum_j ' L_{ij} \cos(\varphi'_i - \varphi'_j) \approx -a^2 A_2 (\vec{\nabla} \varphi)^2,$$

donde se ha eliminado A_1 ya que $j \neq i$. Para el segundo término se obtiene:

$$\begin{aligned}
t_2 &= \sum_{jkl} T_{ijkl} \cos(\varphi'_i + \varphi'_j - \varphi'_k - \varphi'_l) = \\
&= \sum_{jkl} T_{ijkl} \left[\cos(\varphi'_i - \varphi'_k) \cos(\varphi'_j - \varphi'_l) - \sin(\varphi'_i - \varphi'_k) \sin(\varphi'_j - \varphi'_l) \right].
\end{aligned}$$

Por un lado,

$$\begin{aligned}
\sum_{jkl} T_{ijkl} \sin(\varphi'_i - \varphi'_k) \sin(\varphi'_j - \varphi'_l) &\approx T \sum_j \sum_{\hat{n}} \sum_{\hat{n}'} (\nabla \varphi_i \hat{n}) (\nabla \varphi_j \hat{n}') = \\
&= \sum_{\hat{n}} (\vec{\nabla} \varphi_i \hat{n}) \sum_{j\hat{n}'} (\vec{\nabla} \varphi_j \hat{n}') = 0,
\end{aligned}$$

ya que $\sum_{j\hat{n}'} (\vec{\nabla} \varphi_j \hat{n}') = 0$, como hemos visto más arriba. Por otro lado,

$$\begin{aligned}
&\sum_{jkl} T_{ijkl} \cos(\varphi'_i - \varphi'_k) \cos(\varphi'_j - \varphi'_l) \\
&\approx \sum_{\hat{n}} (\vec{\nabla} \varphi_i \hat{n}) \bar{T}_n = a^2 \left(\sum_r \bar{T}_r C_r \right) (\vec{\nabla} \varphi)^2 = a^2 B_1 (\vec{\nabla} \varphi)^2.
\end{aligned}$$

Por lo tanto, la ecuación 6.4.4 se expresa, asintóticamente como:

$$-\dot{\varphi} \simeq -a^2 A_2 (\vec{\nabla} \varphi)^2 - 2\eta_0^2 a^2 B_1 (\vec{\nabla} \varphi)^2 = -a^2 [A_2 + 2\eta_0^2 a^2 B_1] (\vec{\nabla} \varphi)^2 \Rightarrow$$

$$\boxed{\dot{\varphi} = a^2 [A_2 + 2\eta_0^2 B_1] (\vec{\nabla} \varphi)^2 = \kappa (\vec{\nabla} \varphi)^2}$$

APÉNDICE G

Dependencia de E y $\Delta\mu$ del módulo de \mathbf{m} .

Si, como hemos visto, $E(\mathbf{m})$ es una función periódica de \mathbf{m} , podemos representar esta relación como se hace en la fig. G.0.1, donde se representa esta relación para la componente x de \mathbf{m} . Evidentemente, los puntos m_x , m'_x y m''_x en la fig. G.0.1 tienen todos la misma energía, $E(m_x) = E(m'_x) = E(m''_x)$. Tal y como se ha tomado m_x , ($m_x \in [-\frac{N}{2}, \frac{N}{2}]$), se cumple que $m'_x = -m_x$, por lo que $E(m_x) = E(-m_x)$. Por otra parte, m''_x es equivalente a m'_x en el intervalo $[-\frac{N}{2}, \frac{N}{2}]$. Se puede razonar del mismo modo con m_y . Por lo tanto,

$$\left. \begin{array}{l} E(m_x, m_y) = E(-m_x, -m_y) \\ \Delta\mu(m_x, m_y) = \Delta\mu(-m_x, -m_y) \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} E(m_x, m_y) = E(|m_x|, |m_y|) \\ \Delta\mu(m_x, m_y) = \Delta\mu(|m_x|, |m_y|) \end{array} \right\}$$

Por lo tanto,

$\begin{aligned} E_m &= E_0 + 4\pi^2\zeta_s \left[\frac{N}{2\pi}\mathbf{q}_\pi - \mathbf{m} \right]^2 \\ \Delta\mu_m &= \frac{\kappa}{a^2} \left(\frac{2\pi}{N} \right)^2 \left[\frac{N}{2\pi}\mathbf{q}_\pi - \mathbf{m} \right]^2 \end{aligned}$	donde	$\begin{aligned} \mathbf{m} &\equiv (m_x , m_y) \\ &\text{y} \\ -\frac{N}{2} &\leq m_x, m_y \leq \frac{N}{2}. \end{aligned}$
---	-------	---

Se ha incluido también $\Delta\mu$, puesto que los razonamientos anteriores son válidos para esta cantidad.

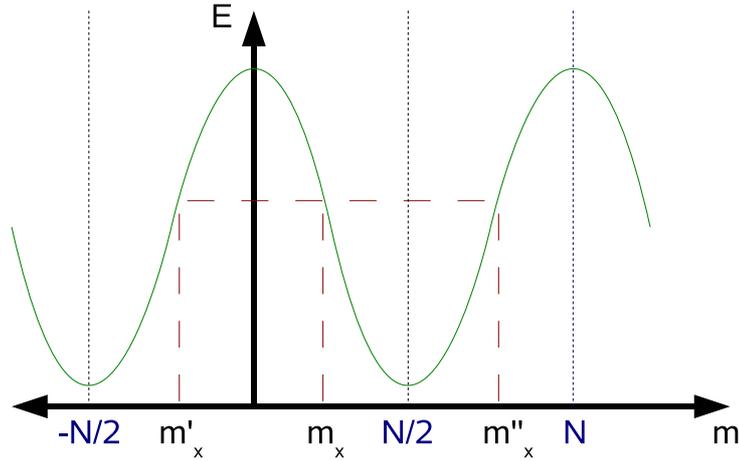


FIGURA G.0.1. Energía en función de la componente del pseudomomento lineal en la dirección x , m_x .

Índice de figuras

- 3.2.1. Potencial con invariancia rotacional discreta $\bar{V}(\mathbf{x})$ con simetría (a) \mathcal{C}_{2v} , (b) \mathcal{C}_{5v} , (c) \mathcal{C}_{4v} y (d) \mathcal{C}_{6v} . Los casos (c) y (d) son, además, periódicos. 63
- 3.2.2. Soluciones simples con simetría \mathcal{C}_{2v} cuando $\mu = 0,06$. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, 1$ se representan en (a) y (c), respectivamente. Los mínimos del potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representan mediante círculos intermitentes de color cyan. En (b) y (d) se representan las fases correspondientes. 64
- 3.2.3. Soluciones simples con simetría \mathcal{C}_{4v} cuando $\mu = 0,04$. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, -2$ se representan en (a), (c) y (e), respectivamente. El potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos de color azul claro. En (b), (d) y (f) se representan las fases correspondientes. 66
- 3.2.4. Soluciones simples con simetría \mathcal{C}_{5v} cuando $\mu = 0,16$. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, -2$ se representan en (a), (c) y (e), respectivamente. Los mínimos del potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos intermitentes de color cyan. En (b), (d) y (f) se representan las fases correspondientes. 67
- 3.2.5. Soluciones simples con simetría \mathcal{C}_{6v} cuando $\mu = -0,06$. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, -2, 3$ se representan en (a), (c), (e) y (g). La función $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos de color azul claro. En (b), (d), (f) y (h) se representan las fases correspondientes. 68
- 3.2.6. Soluciones simples extendidas con simetría \mathcal{C}_{4v} cuando $\mu = -0,02$. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, 2$ se representan en (a), (c) y (e), respectivamente. El potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos de color azul claro. En (b), (d) y (f) se representan las fases correspondientes. 70
- 3.2.7. Relación entre la potencia $P = \int_{\Omega} d\mathbf{x}^2 |\psi|^2$ y el autovalor μ para soluciones como las presentadas anteriormente. En (a) se representa esta relación para soluciones como las de la figura 3.2.2, en (b) para soluciones como las de la figura 3.2.3, en (c) como las de 3.2.4 y (d) como las de 3.2.5. 71
- 3.3.1. Soluciones con líneas nodales angulares con simetría \mathcal{C}_{4v} y $\mu = -0,03$. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, 2$ se representan en (a), (c) y (e), respectivamente. El potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos de color azul claro. En (b), (d) y (f) se representan las fases correspondientes. 74

- 3.3.2. Soluciones con líneas nodales radiales con simetría \mathcal{C}_{4v} cuando $\mu = 0$ y la línea nodal está entre celdas distintas. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, 2$ se representan en (a), (c) y (e), respectivamente. El potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos de color azul claro. En (b), (d) y (f) se representan las fases correspondientes. 77
- 3.3.3. Soluciones con líneas nodales radiales, situadas dentro de la celda con simetría \mathcal{C}_{4v} y $\mu = 0$. La amplitud de las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, 2$ se representan en (a), (c) y (e), respectivamente. El potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos de color azul claro. En (b), (d) y (f) se representan las fases correspondientes. 78
- 3.3.4. Valores de $P = \int |\psi|^2 d\mathbf{x}^2$ para cada autovalor μ para las soluciones con pseudomomento $m = 0, -1, 2$ (a) extendidas presentadas en la Fig. 3.2.6, (b) con líneas nodales radiales en la siguiente celda, (c) soluciones con líneas nodales radiales en la misma celda y (d) solitones dipolares. 79
- 3.3.5. Solución con líneas nodales radiales tipo excitación con $\mu = 0,121$ y pseudomomento $m = 0$. La amplitud y la fase de la solución se representa en (a) y (b), respectivamente. Los mínimos del potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representan mediante círculos intermitentes de color azul claro. 79
- 3.3.6. Curva $P = P(\mu)$ de la solución presentada en la Fig. 3.3.5. 80
- 3.4.1. *Clusters* de vórtices con simetría \mathcal{C}_{4v} y $\mu = 0,02$ con pseudomomento $m = -1$. La amplitud de las soluciones se representa en (a), (b), (e) y (g). El potencial lineal $V(\mathbf{x})$ se representa mediante círculos de color azul claro. En (b), (d), (f) y (h) se representan las fases correspondientes. 83
- 3.4.2. Posiciones de los vórtices y antivórtices en cada una de las soluciones presentadas en 3.4.1. Los vórtices con carga positiva se representan mediante flechas rojas girando en el sentido contrario al de las agujas del reloj, mientras que los antivórtices (carga negativa) se representan mediante flechas azules girando en el sentido de las agujas del reloj. Las flechas azules salientes desde la singularidad representan las líneas de ruptura en los antivórtices y las flechas rojas señalando hacia la singularidad las líneas de ruptura en los vórtices. 84
- 3.4.3. Valores de $P = \int |\psi|^2 d\mathbf{x}^2$ para cada autovalor μ para las cuatro tipos de *clusters* presentados. 86
- 4.4.1. Evolución de $P(z)$ y $\langle \mu(z) \rangle$ con z en el plano $P - \langle \mu \rangle$ para soluciones con condiciones iniciales con $r_0 = 2,1$, $l = +3$ y distintos valores de c . En color negro se representa $P = P(\mu)$ para soluciones estacionarias con $m = -1$. 94
- 4.4.2. Amplitud (a) y fase (b) de la condición inicial con $l = +3$ y amplitud (c) y fase (d) de la solución para $z = 200$ cuando $c = 0,424$ y $r_0 = 2,1$. 95
- 4.4.3. Evolución de $P(z)$ y $\langle \mu(z) \rangle$ con z en el plano $P - \langle \mu \rangle$ para una solución con condición inicial con pseudomomento angular $m = +2$. En color negro se representa $P = P(\mu)$ para soluciones estacionarias con $m' = 0$ en el potencial con simetría \mathcal{C}_{2v} . 96

- 4.4.4. Amplitud (a) y fase (b) de la condición inicial con $m = +2$ y amplitud (c) y fase (d) de la solución con $m' = 0$ para $z = 650$ cuando $c = 1,7$ y $\omega_0 = 1$. 97
- 4.5.1. Simulación de una interfase $\mathcal{O}(2)\text{-}\mathcal{C}_{5v}$ cuando la condición inicial tiene momento angular $l = +4$. En (a), (d) y (g) se representa la fase de la solución para $z = 0, 0,3$ y $0,6$ respectivamente. En (b), (e) y (h) se representa al dual del gradiente de la fase en cada nodo del mallado numérico en los mismos z . En (c), (f) e (i) se representa la fase a lo largo de un circuito ζ que rodea el dominio $\Omega_\zeta = [-0,42, 0,42] \times [-0,42, 0,42]$. 100
- 4.5.2. Simulación de una interfase $\mathcal{O}(2)\text{-}\mathcal{C}_{4v}$ cuando la condición inicial tiene momento angular $l = +4$. En (a) y (d) se representa la fase de la solución para $z = 0,25$ y $0,4$ respectivamente. En (b) y (e) se representa al dual del gradiente de la fase en cada nodo del mallado numérico en los mismos z . En (c) y (f) se representa la fase a lo largo de un circuito ζ que rodea el cuadrado $\Omega_\zeta = [-0,42, 0,42] \times [-0,42, 0,42]$. 101
- 4.5.3. Simulación de una interfase $\mathcal{O}(2)\text{-}\mathcal{C}_{3v}$ cuando la condición inicial tiene momento angular $l = +4$. En (a) y (d) se representa la fase de la solución para $z = 0,2$ y $0,6$ respectivamente. En (b) y (e) se representa al dual del gradiente de la fase en cada nodo del mallado numérico en los mismos z . En (c) y (f) se representa la fase a lo largo de un circuito ζ que rodea el cuadrado $\Omega_\zeta = [-0,42, 0,42] \times [-0,42, 0,42]$. 102
- 4.5.4. Simulación de una interfase $\mathcal{O}(2)\text{-}\mathcal{C}_{2v}$ cuando la condición inicial tiene momento angular $l = +4$. En (a), (d) y (g) se representa la fase de la solución para $z = 0,4, 0,45$ y $0,5$, respectivamente. En (b), (e) y (h) se representa al dual del gradiente de la fase en cada nodo del mallado numérico en los mismos z . En (c), (f) e (i) se representa la fase a lo largo de un circuito ζ que rodea el cuadrado $\Omega_\zeta = [-0,42, 0,42] \times [-0,42, 0,42]$. 103
- 5.2.1. Amplitud (a), fase (b) y representación esquemática de la fase a lo largo de la fila inferior (c) para una solución simétrica con $\mu = -0,01$ y $m_x = m_y = 10$. 112
- 5.2.2. Amplitud (a), fase (b) y representación esquemática de la fase a lo largo de la fila inferior (c) para una solución simétrica con $\mu = -0,06$ y $m_x = m_y = 9$. El valor de la diferencia de fase entre celdas vecinas, $\Delta\varphi = \frac{9}{10}\pi$ se ha representado con la letra t . 113
- 5.2.3. Amplitud (a), fase (b) y representación esquemática de la fase a lo largo de la fila inferior (c) para una solución simétrica con $\mu = 0,03$ y $m_x = m_y = 8$. El valor de la diferencia de fase entre celdas vecinas, $\Delta\varphi = \frac{8}{10}\pi$ se ha representado con la letra t . 114
- 5.2.4. Amplitud (a), fase (b) y representación esquemática de la fase a lo largo de la fila inferior (c) para una solución simétrica con $\mu = 0,03$ y $m_x = m_y = 7$. El valor de la diferencia de fase entre celdas vecinas, $\Delta\varphi = \frac{7}{10}\pi$ se ha representado con la letra t . 115
- 5.2.5. Amplitud (a), fase (b) y representación esquemática de la fase a lo largo de la fila inferior (c) para una solución simétrica con $\mu = 0,02$ y

- $m_x = m_y = 6$. El valor de la diferencia de fase entre celdas vecinas, $\Delta\varphi = \frac{6}{10}\pi$, se ha representado con la letra t . 116
- 5.2.6. Amplitud (a), fase (b) y representación esquemática de la fase a lo largo de la fila inferior (c) para una solución simétrica con $\mu = 0,04$ y $m_x = m_y = 0$. 117
- 5.2.7. Potencia P en función de μ para las soluciones con $m_x = m_y = m = 10, 9, 8, 7, 6$, y 0 . Las líneas verticales en color negro representan el límite inferior y superior de la primera banda permitida. 117
- 5.2.8. Amplitud (a), fase (b) para una solución simétrica con $\mu = -0,01$ y $m_x = m_y = 10$. En (c) se representa las curvas $P = P(\mu)$ de la solución con $V_0 = 0$ y con $V_0 = 2$. Las líneas verticales en color negro representan el límite inferior y superior de la primera banda permitida cuando $V_0 = 2$. 118
- 5.3.1. Evolución de P y $\langle\mu\rangle$ con z en el plano $P - \langle\mu\rangle$, para soluciones con condiciones iniciales ψ_e definidas por los pseudomomentos lineales enteros $m_x = m_y = 10, 9, 8, 7, 6$, y 0 y $\mu = -0,08$. 120
- 5.3.2. Evolución de $\bar{m}_x(z)$ con z para soluciones con condiciones iniciales ψ_e definidas por los pseudomomentos lineales enteros $m_x = m_y = 10, 9, 8, 7, 6$, y 0 y $\mu = -0,08$. 120
- 5.3.3. Evolución de P y $\langle\mu\rangle$ con z en el plano $P - \langle\mu\rangle$, para soluciones con condiciones iniciales ψ_e definidas por los pseudomomentos lineales enteros $m_x = m_y = 10, 9, 8, 7$ y 0 y $\mu = 0,05$. 121
- 5.3.4. Evolución de $\bar{m}_x(z)$ con z para soluciones con condiciones iniciales ψ_e definidas por los pseudomomentos lineales enteros $m_x = m_y = 10, 9, 8, 7$ y 0 y $\mu = 0,05$. 121
- 5.3.5. Amplitud - (a), (c), (e) - y fase - (b), (d), (f) - de $\phi(\mathbf{x}, z)$ en diferentes valores de z cuando la condición inicial es una perturbación de una solución con $\mu = -0,08$ y distintos pseudomomentos lineales. En (a) y (b) se muestra la amplitud y fase cuando $z = 750$ y $m_x = m_y = 0$, en (c) y (d) cuando $z = 1800$ y $m_x = m_y = 6$, y en (e) y (f) cuando $z = 3600$ y $m_x = m_y = 7$. 123
- 5.3.6. Amplitud - (a), (c), (e) - y fase - (b), (d), (f) - de $\phi(\mathbf{x}, z)$ en diferentes valores de z cuando la condición inicial es una perturbación de una solución con $\mu = -0,08$ y distintos pseudomomentos lineales. En (a) y (b) se muestra la amplitud y fase cuando $z = 3000$ y $m_x = m_y = 8$, en (c) y (d) cuando $z = 7200$ y $m_x = m_y = 9$, y en (e) y (f) cuando $z = 7200$ y $m_x = m_y = 10$. 124
- 5.3.7. Amplitud - (a), (c), (e) - y fase - (b), (d), (f) - de $\phi(\mathbf{x}, z)$ en diferentes valores de z cuando la condición inicial es una perturbación de una solución con $\mu = 0,05$ y distintos pseudomomentos lineales. En (a) y (b) se muestra la amplitud y fase cuando $z = 1200$ y $m_x = m_y = 0$, en (c) y (d) cuando $z = 4200$ y $m_x = m_y = 7$, y en (e) y (f) cuando $z = 4200$ y $m_x = m_y = 8$. 125
- 5.3.8. Amplitud - (a), (c), (e) - y fase - (b), (d), (f) - de $\phi(\mathbf{x}, z)$ en diferentes valores de z cuando la condición inicial es una perturbación de una solución con $\mu = 0,05$ y distintos pseudomomentos lineales. En (a) y (b) se muestra la amplitud y fase cuando $z = 7200$ y $m_x = m_y = 9$ y en (c) y (d) para el mismo valor de z y $m_x = m_y = 10$. 126

- 5.3.9. En (a) se representa la evolución de $\bar{m}_x(z)$ con z para soluciones $\phi(\mathbf{x}, z)$ cuando la condición inicial es una perturbación de una solución estacionaria ψ_e con pseudomomento $m_x = m_y = 10$ y distintos valores de μ iniciales, en el caso de $V_0 = 0$. En (b) se representa la evolución de P y $\langle \mu(z) \rangle$ con z en el plano $P - \langle \mu(z) \rangle$ para los mismos casos. 127
- 6.7.1. Amplitud (a) y fase (b) de las soluciones con dominios magnéticos. Los máximos de $V(\mathbf{x})$ se han representado mediante círculos blancos. En (b) se han superpuesto flechas que representan la fase en el centro de cada celda, estando el origen de los ángulos en el eje y . 153
- 6.7.2. Amplitud (a) y fase (b) de $\phi(\mathbf{x}, z)$ en $z = 900$ la condición inicial es una perturbación de una solución con $\mu = -0,10$ como las presentadas en 6.7.1. 154
- B.0.1. Representación de la tabla de caracteres de los grupos (a) \mathcal{C}_{3v} y (b) \mathcal{C}_{4v} bajo los elementos de rotación del grupo. En (a) $\varepsilon = \exp(i\frac{2\pi}{3})$ y en (b) $\varepsilon = \exp(i\frac{\pi}{2})$. 169
- B.0.2. Esquema de las representaciones irreducibles para los grupos (a) \mathcal{C}_{3v} (b) \mathcal{C}_{4v} y (c) \mathcal{C}_{6v} . Las flechas representan cada una de las representaciones irreducibles y se representa junto a ellas cómo se comportan ante una rotación de $\frac{2\pi}{n}$, $n = 3, 4, 6$. En (a) $\varepsilon = \exp(i\frac{2\pi}{3})$, en (b) $\varepsilon = \exp(i\frac{\pi}{2})$ y en (c) $\varepsilon = \exp(i\frac{\pi}{3})$. 170
- G.0.1. Energía en función de la componente del pseudomomento lineal en la dirección x , m_x . 191

Índice de cuadros

1. Autovalor μ en función del pseudomomento para potencia $P = 4500$ en un sistema con $N = 20$. 150
2. Autovalor μ en función del pseudomomento para potencia P constante en un sistema con $N = 30$. 150

Bibliografía

- [1] W. Berkson, Las teorías de los campos de Fuerza. Desde Faraday hasta Einstein. (Alianza editorial, Madrid, 1974).
- [2] J.D. Joannopoulos, R.D. Meade, and J.N. Winn, Photonic crystals. Molding the flow of light. (Princeton University Press, Princeton, 1995).
- [3] R. Boyd, Nonlinear optics. (Academic Press INC., San Diego, 1992).
- [4] D.L. Mills, Nonlinear optics. Basic Concepts. (Springer-Verlag, Heidelberg, 1998).
- [5] G.P. Agrawal, Nonlinear fiber optics. (Academic Press INC., San Diego, 2007).
- [6] S. Trillo and W. Torruellas, Spatial solitons. (Springer-Verlag, Berlin, 2001).
- [7] Y.S. Kivshar and G.P. Agrawal, Optical solitons: From fibers to photonic crystals. (Academic Press INC., San Diego, 2003).
- [8] M. Segev, “*Optical spatial solitons*” *Optical and Quantum Electronics*, **30** 503 (1998).
- [9] G.I. Stegeman and M. Segev, “*Optical spatial solitons and their interactions: Universality and diversity*” *Science*, **286** 1518 (1999).
- [10] Y. Kivshar and G.I. Stegeman, “*Spatial optical solitons. Guiding light for future technologies*” *Optics and Photonics News*, **13** 59 (2002).
- [11] R.Y. Chiao, E. Garmire, and C.H. Townes, “*Self-trapping of optical beams*” *Physical Review Letters*, **13** 479 (1964).
- [12] P.L. Kelley, “*Self-focusing of optical beams*” *Physical Review Letters*, **13** 479 (1964).
- [13] E.L. Dawes and J.H. Marburger, “*Computer studies in self-focusing*” *Physical Review*, **179** 862 (1969).
- [14] J.E. Bjorkholm and A. Ashkin, “*cw Self-focusing and Self-trapping of light in Sodium vapor*” *Physical Review Letters*, **32** 129 (1974).
- [15] V.E. Zakharov and A.B. Shabat, “*Exact theory of two-dimensional self-focusing and one-dimensional self-modulation of waves in nonlinear media*” *Soviet Physics JETP*, **34** 62 (1972).
- [16] J.S. Aitchison, A.M. Weiner, Y. Silberberg, M.K. Oliver, J.L. Jackel, D.E. Leaird, E.M. Vogel, and P.W.E. Smith, “*Observation of spatial optical solitons in nonlinear glass waveguide*” *Optics Letters*, **15** 471 (1990).
- [17] F. Reynaud and A. Barthelemy, “*Optically controlled interaction between two fundamental soliton beams*” *Europhysics Letters*, **12** 401 (1990).
- [18] J.S. Aitchison, A.M. Weiner, Y. Silberberg, D.E. Leaird, M.K. Oliver, J.L. Jackel, and P.W.E. Smith, “*Experimental observation of spatial optical soliton interactions*” *Optics Letters*, **16** 15 (1991).
- [19] J.S. Aitchison, Y. Silberberg, A.M. Weiner, D.E. Leaird, M.K. Oliver, J.L. Jackel, E.M. Vogel, and P.W.E. Smith, “*Spatial optical solitons in planar glass waveguides*” *Journal of the Optical Society of America B*, **8** 1290 (1991).
- [20] A.W. Snyder, D.J. Mitchell, L. Poladian, and F. Ladouceur, “*Self-induced optical fibers: spatial solitary waves*” *Optics Letters*, **16** 21 (1991).
- [21] M. Segev, B. Crosignani, A. Yariv, and B. Fischer, “*Spatial Solitons in photorefractive media*” *Physical Review Letters*, **68** 923 (1992).
- [22] G.C. Duree, Jr., J.L. Shultz, G.J. Salamo, M. Segev, A. Yariv, B. Crosignani, P. Di Porto, E.J. Sharp, and R.R. Neurgaonkar, “*Observation of self-trapping of an optical beam due to photorefractive effect*” *Physical Review Letters*, **71** 533 (1993).
- [23] M. Segev, G.C. Valley, B. Crosignani, P. DiPorto, and A. Yariv, “*Steady-state spatial screening solitons in photorefractive materials with external applied field*” *Physical Review Letters*, **73** 3211 (1994).

- [24] D.N. Christodoulides and M.I. Carvalho, “*Bright, dark, and gray spatial soliton states in photorefractive media*” *Journal of the Optical Society of America B*, **12** 1628 (1995).
- [25] S.R. Singh and D.N. Christodoulides “*Evolution of spatial optical solitons in biased photorefractive media under steady state conditions*” *Optics Communications*, **118** 569 (1995).
- [26] M.-F. Shih, M. Segev, G.C. Valley, G. Salamo, B. Crosignani, and P. Di Porto, “*Observation of two-dimensional steady-state photorefractive screening solitons*” *Electronics Letters*, **31** 826 (1995).
- [27] M.-F. Shih, P. Leach, M. Segev, M.H. Garrett, G. Salamo, and G.C. Valley, “*Two-dimensional steady-state photorefractive screening solitons*” *Optics Letters*, **21** 324 (1996).
- [28] G.C. Valley, M. Segev, B. Crosignani, A. Yariv, M.M. Fejer, and M.C. Bashaw, “*Dark and bright photovoltaic spatial solitons*” *Physical Review A*, **50** R4457 (1994).
- [29] M. Taya, M.C. Bashaw, M.M. Fejer, M. Segev, and G.C. Valley, “*Observation of dark photovoltaic spatial solitons*” *Physical Review A*, **52** 3095 (1995).
- [30] M. Taya, M.C. Bashaw, M.M. Fejer, M. Segev, and G.C. Valley, “*Y-junctions arising from dark-soliton propagation in photovoltaic media*” *Optics Letters*, **21** 943 (1996).
- [31] D. Pelinovsky, A.V. Buryak, and Y.S. Kivshar, “*Instability of solitons governed by quadratic nonlinearities*” *Physical Review Letters*, **75** 591 (1995).
- [32] W.E. Torruellas, Z. Wang, D.J. Hagan, E.W. VanStryland, G.I. Stegeman, Ll. Torner, and C.R. Menyuk, “*Observation of two-dimensional spatial solitary waves in quadratic medium*” *Physical Review Letters*, **74** 5036 (1995).
- [33] R. Schiek, Y. Back, and G.I. Stegeman, “*One-dimensional spatial solitary waves due to cascaded second-order nonlinearities in planar waveguides*” *Physical Review E*, **53** 1138 (1996).
- [34] S.V. Manakov, “*On the theory of two-dimensional stationary self-focusing of electromagnetic waves*” *Sov. Phys. Journal of experimental and Theoretical Physics*, **38** 248 (1974).
- [35] D. N. Christodoulides and R.I. Joseph, “*Vector solitons in birefringent nonlinear dispersive media*” *Optics Letters*, **13** 53 (1988).
- [36] J.U. Kang, G.I. Stegeman, J.S. Aitchison, and N. Akhmediev, “*Observation of Manakov spatial solitons in AlGaAs Planar waveguides*” *Physical Review Letters*, **76** 3699 (1996).
- [37] J.S. Aitchison, D.C. Hutchings, J.M. Arnold, J.U. Kang, G.I. Stegeman, E. Ostrovskaya, and N. Akhmediev, “*Power dependent polarization dynamics of mixed-mode spatial solitary waves in AlGaAs waveguides*” *Journal of the Optical Society of America B*, **14** 3032 (1997).
- [38] M. Mitchell, Z. Chen, M. Shih, and M. Segev “*Self-trapping of partial incoherent light*” *Physical Review Letters*, **77** 490 (1996).
- [39] M. Mitchell and M. Segev, “*Self-trapping of incoherent white light*” *Nature*, **387** 880 (1997).
- [40] D. N. Christodoulides, T. H. Coskun, M. Mitchell, and M. Segev “*Theory of incoherent self-focusing in Biased photorefractive media*” *Physical Review Letters*, **78** 646 (1997).
- [41] M. Mitchell, M. Segev, T.H. Coskun, and D.N. Christodoulides “*Theory of self-trapped spatially incoherent light beams*” *Physical Review Letters*, **78** 4990 (1997).
- [42] Y.S. Kivshar and B. Luther-Davies, “*Dark optical solitons: Physics and applications*” *Physics Reports*, **298** 81 (1998).
- [43] T.H. Coskun, D.N. Christodoulides, Y. Kim, Z. Chen, M. Soljacic, and M. Segev, “*Bright spatial solitons on a partially incoherent background*” *Physical Review Letters*, **84** 2374 (2000).
- [44] G. A. Swartzlander Jr., D.R. Andersen, J.J. Regan, H. Yin, and A.E. Kaplan, “*Spatial dark-soliton stripes and grids in self-defocusing materials*” *Physical Review Letters*, **66** 1583 (1991).
- [45] D.R. Andersen, D.E. Hooton, G.A. Swartzlander, Jr., and A.E. Kaplan, “*Direct measurement of the transverse velocity of dark spatial solitons*” *Optics Letters*, **15** 783 (1990).
- [46] G.R. Allan, S.R. Skinner, D.R. Andersen, and A.L. Smirl, “*Observation of fundamental dark spatial solitons in semiconductors using picosecond pulses*” *Optics Letters*, **16** 156 (1991).
- [47] G. Duree, M. Morin, G. Salamo, M. Segev, B. Crosignani, P. Di Porto, E. Sharp, and A. Yariv, “*Dark photorefractive spatial solitons and photorefractive vortex solitons*” *Physical Review Letters*, **74** 1978 (1995).
- [48] M.D. Iturbe-Castillo, J.J. Sánchez-Mondragón, S.I. Stepanov, M.B. Klein, and B.A. Wechsler, “*(1+1)-dimensional dark spatial solitons in photorefractive Bi₁₂TiO₂₀ crystal*” *Optics Communications*, **118** 515 (1995).

- [49] Z. Chen, M. Mitchell, M. Shih, M. Segev, M. Garret, and G.C. Valley “*Steady-state dark photorefractive screening solitons*” *Optics Letters*, **21** 629 (1996).
- [50] Z. Chen, M. Mitchell, M. Shih, and M. Segev, “*Steady-state photorefractive soliton induced Y-junction waveguides and high-order dark spatial solitons*” *Optics Letters*, **21** 716 (1996).
- [51] Y. Kivshar and E.A. Ostrovskaya, “*Optical vortices: folding and twisting waves of light*” *Optics and Photonics News*, **12** 24 (2001).
- [52] A.S. Desyatnikov, Ll. Torner, and Y.S. Kivshar, “*Optical vortices and vortex solitons*” *Progress in Optics*, **47** 219 (2005).
- [53] J.C. Neu, “*Vortices in complex scalar fields*” *Physica D*, **43** 385 (1990).
- [54] A. W. Snyder, L. Poladian, and D.J. Mitchell, “*Stable black self-guided beams of circular symmetry in a bulk kerr medium*” *Optics Letters*, **17** 789 (1992).
- [55] G. A. Swartzlander Jr. and C.T. Law, “*Optical vortex solitons in Kerr nonlinear media*” *Physical Review Letters*, **69** 2503 (1992).
- [56] C.T. Law and G. A. Swartzlander Jr., “*Optical vortex solitons and the stability of dark soliton stripes*” *Optics Letters*, **18** 586 (1993).
- [57] B. Luther-Davies, R. Powles, and V. Tikhonenko, “*Nonlinear rotation of three-dimensional dark spatial solitons in a Gaussian laser beam*” *Optics Letters*, **19** 1816 (1994).
- [58] V. Tikhonenko, J. Christou, B. Luther-Davies, and Y. S. Kivshar, “*Observation of vortex solitons created by the instability of dark soliton stripes*” *Optics Letters*, **21** 1129 (1996).
- [59] B. Luther-Davies, J. Christou, V. Tikhonenko, and Y. S. Kivshar, “*Optical vortex solitons: experiment versus theory*” *Journal of the Optical Society of America B*, **14** 3045 (1997).
- [60] Z. Chen, M. Segev, D.W. Wilson, R.E. Muller, and P.D. Marker, “*Self-trapping of an optical vortex by use of the bulk photovoltaic effect*” *Physical Review Letters*, **78** 2948 (1997).
- [61] Z. Chen, M. Shih, M. Segev, D.W. Wilson, R.E. Muller, and P.D. Marker, “*Steady-state vortex-screening solitons formed in biased photorefractive media*” *Optics Letters*, **22** 1751 (1997).
- [62] I. Velchev, A. Dreischih, D. Neshev, and S. Dinev, “*Multiple-charged optical vortex solitons in bulk Kerr media*” *Optics Communications*, **140** 77 (1997).
- [63] A.V. Mamaev, M. Saffman, and A.A. Zozulya, “*Decay of high-order optical vortices in anisotropic nonlinear optical media*” *Physical Review Letters*, **78** 2108 (1997).
- [64] V.I. Kruglov, Y.A. Logvin, and V.M. Volkov, “*The theory of spiral laser beams in nonlinear media*” *Journal of Modern Optics*, **39** 2277 (1992).
- [65] J.M. Soto-Crespo, E.M. Wright, and N.N. Akhmediev, “*Recurrence and azimuthal-symmetry breaking of a cylindrical Gaussian beam in saturable self-focusing medium*” *Physical Review A*, **45** 3168 (1992).
- [66] W.J. Firth and D.J. Skryabin “*Optical solitons carrying orbital angular momentum*” *Physical Review Letters*, **79** 2450 (1997).
- [67] D.J. Skryabin and W.J. Firth “*Dynamics of self-trapped beams with phase dislocation in saturable Kerr and quadratic nonlinear media*” *Physical Review E*, **58** 3916 (1998).
- [68] J.M. Soto-Crespo, D.R. Heatley, E.M. Wright, and N.N. Akhmediev, “*Stability of the higher-bound states in a saturable self-focusing medium*” *Physical Review A*, **44** 636 (1991).
- [69] D.E. Edmundson, “*Unstable higher modes of a three-dimensional nonlinear Schrödinger equation*” *Physical Review E*, **55** 7636 (1997).
- [70] J. Atai, Y. Chen, and J.M. Soto-Crespo, “*Stability of three-dimensional self-trapped beams with a dark spot surrounded by bright rings of varying intensity*” *Physical Review A*, **49** R3170 (1994).
- [71] C. Anastassiou, C. Pigier, M. Segev, D. Kip, E.D. Eugenieva, and D.N. Christodoulides, “*Self-trapping of bright beams*” *Optics Letters*, **26** 911 (2001).
- [72] H.A. Haus “*Higher order trapped light beam solutions*” *Applied Physics Letters*, **8** 128 (1966).
- [73] J.P. Torres, J.M. Soto-Crespo, Ll. Torner, and D.V. Petrov, “*Solitary-wave vortices in quadratic nonlinear media*” *Journal of the Optical Society of America B*, **15** 625 (1998).
- [74] D.V. Petrov, Ll. Torner, J. Martorell, R. Vilaseca, J.P. Torres, and C. Cojocar “*Observation of azimuthal modulation instability and formation of patterns of optical solitons in a quadratic nonlinear crystal*” *Optics Letters*, **23** 1444 (1998).
- [75] Ll. Torner and D.V. Petrov, “*Splitting of light beams with spiral phase dislocations into solitons in bulk quadratic nonlinear media*” *Journal of the optical society of America B*, **14** 2017 (1997).

- [76] D.V. Petrov and L.I. Torner, “*Second-harmonic generation by intense beams containing phase dislocations: self-breaking into sets of solitons*” *Optical and Quantum Electronics*, **29** 1037 (1997).
- [77] Z.H. Musslimani, M. Segev, D.N. Christodoulides, and M. Soljacic “*Composite multihump vector solitons carrying topological charge*” *Physical Review Letters*, **84** 1164 (2000).
- [78] J.J. García-Ripoll, V.M. Pérez-García, E.S. Ostrovskaya, and Y.S. Kivshar, “*Dipole-mode vector solitons*” *Physical Review Letters*, **85** 82 (2000).
- [79] J. Yang and D.E. Pelinovsky “*Stable vortex and dipole vector solitons in a saturable nonlinear medium*” *Physical Review E*, **67** 016608 (2003).
- [80] G.D. Montesinos, V.M. Pérez-García, H. Michinel, and J.R. Salgueiro, “*Stabilized vortices in layered Kerr media*” *Physical Review E*, **71** 036624 (2005).
- [81] M. Quiroga-Teixeiro and H. Michinel, “*Stable azimuthal stationary state in quintic nonlinear optical media*” *Journal of the Optical society of America B*, **15** 2004 (1997).
- [82] H. Michinel, J. Campo-Táboas, M.L. Quiroga-Teixeiro, J.R. Salgueiro, and R. García-Fernández, “*Excitation of stable vortex solitons in nonlinear cubic-quintic materials*” *Journal of Optics B: Quantum and semiclassical optics*, **3** 314 (2001).
- [83] V.I. Berezhiani, V. Skarka, and N.B. Aleksic, “*Dynamics of localized and nonlocalized optical vortex solitons in cubic-quintic nonlinear media*” *Physical Review E*, **64** 057601 (2001).
- [84] H. Michinel, J. Campo-Táboas, R. García-Fernández, J.R. Salgueiro, and M.L. Quiroga-Teixeiro, “*Liquid light condensates*” *Physical Review E*, **65** 066604 (2002).
- [85] S. Gatz and J. Herrman, “*Soliton collision and soliton fission in dispersive materials with a linear and quadratic intensity depending refraction index change*” *IEEE Journal of Quantum Electronics*, **28** 1732 (1992).
- [86] A. W. Snyder and A.P. Sheppard, “*Collisions, steering, and guidance with spatial solitons*” *Optics Letters*, **18** 482 (1993).
- [87] V. Tikhonenko, J. Christou, and B. Luther-Daves “*Three dimensional bright spatial soliton collision and fusion in a saturable nonlinear medium*” *Physical Review Letters*, **76** 2698 (1996).
- [88] M. Shih and M. Segev, “*Incoherent collisions between two-dimensional bright steady-state photorefractive spatial screening solitons*” *Optics Letters*, **21** 1538 (1996).
- [89] H. Meng, G. Salamo, M. Shih and M. Segev, “*Coherent collisions of photorefractive solitons*” *Optics Letters*, **22** 448 (1997).
- [90] G.S. García-Quirino, M.D. Iturbe-Castillo, V.A. Vysloukh, J.J. Sánchez-Mondragón, S.I. Stepanov, G. Lugo-Martínez, and G.E. Torres-Cisneros, “*Observation of interaction forces between one-dimensional spatial solitons in photorefractive crystals*” *Optics Letters*, **22** 154 (1997).
- [91] W. Krolikowski and S.A. Holmstrom, “*Fusion and birth of spatial solitons upon collision*” *Optics Letters*, **22** 369 (1997).
- [92] W. Krolikowski, B. Luther-Davies, C. Denz, and T. Tschudi, “*Anihilation of photorefractive solitons*” *Optics Letters*, **23** 97 (1998).
- [93] W. Krolikowski, M. Saffman, B. Luther-Davies, and C. Denz, “*Anomalous interaction of spatial solitons in photorefractive media*” *Physical Review Letters*, **80** 3240 (1998).
- [94] L. Poladian, A.W. Snyder, and D.J. Mitchell, “*Spiralling spatial solitons*” *Optics Communications* **56** 59 (1991).
- [95] D.E. Edmundson and R.H. Enns, “*Fully three-dimensional collisions of bistable light bullets*” *Optics Letters*, **18** 1609 (1993).
- [96] D.E. Edmundson and R.H. Enns, “*Particlelike nature of colliding three-dimensional optical solitons*” *Physical Review A*, **51** 2491 (1995).
- [97] M. Shih, M. Segev, and G. Salamo, “*Three-dimensional spiraling of interacting spatial solitons*” *Physical Review Letters*, **78** 2551 (1997).
- [98] A.S. Desyatnikov and A.I. Maimistov, “*Interaction of two spatially separated light beams in nonlinear Kerr medium*” *Journal of experimental and Theoretical Physics*, **86** 1101 (1998).
- [99] V. Tikhonenko, J. Christou, and B. Luther-Daves “*Spiraling bright spatial solitons formed by the breakup of an optical vortex in a saturable self-focusing medium*” *Journal of the Optical Society of America B*, **12** 2046 (1995).
- [100] M.S. Bigelow, P. Zerom, and R.W. Boyd, “*Breakup of ring beams carrying angular momentum in Sodium Vapor*” *Physical Review Letters*, **92** 083902 (2004).

- [101] L. Allen, M.W. Beijersbergen, R.J.C. Spreeuw, and J.P. Woerdman, “*Orbital angular momentum of light and the transformation of Laguerre-Gaussian laser modes*” *Physical Review A*, **45** 8185 (1992).
- [102] N.B. Simpson, K. Dholakia, L. Allen, and M.J. Padgett, “*Mechanical equivalence of spin and orbital angular momentum of light: an optical spanner*” *Optics Letters*, **22** 52 (1997).
- [103] M. Soljacic, S. Sears, and M. Segev, “*Self-trapping of “necklace” beams in self-focusing Kerr media*” *Physical Review Letters*, **81** 4851 (1998).
- [104] M. Soljacic and M. Segev, “*Self-trapping of “necklace-ring” beams in self-focusing Kerr media*” *Physical Review E* **62** 2810 (2000).
- [105] M. Soljacic and M. Segev, “*Integer and fractional angular momentum borne on self-trapped necklace-ring-beams*” *Physical Review Letters*, **86** 420 (2001).
- [106] V.V. Afanasjev, “*Rotating ring-shaped bright solitons*” *Physical Review E*, **52** 3153 (1995).
- [107] A.S. Desyatnikov and Y. Kivshar, “*Rotating optical soliton clusters*” *Physical Review Letters*, **88** 053901 (2002).
- [108] A.S. Desyatnikov and Y. Kivshar, “*Spatial optical solitons and soliton clusters carrying an angular momentum*” *Journal of Optics B: Quantum and semiclassical optics*, **4** S58 (2002).
- [109] A.S. Desyatnikov, C. Denz, and Y. Kivshar, “*Nonlinear optical beams carrying phase dislocations*” *Journal of Optics: Pure and Applied Optics*, **6** s209 (2004).
- [110] A.S. Desyatnikov, A.A. Sukhorukov, and Y.S. Kivshar, “*Azimuthons: spatially modulated vortex solitons*” *Physical Review Letters*, **95** 203904 (2005).
- [111] B. A. Malomed “*Potential of interaction between two- and three-dimensional solitons*” *Physical Review E*, **58** 7928 (1998).
- [112] A. Maimistov, B. A. Malomed, and A. Desyatnikov, “*A potential of incoherent attraction between multidimensional solitons*” *Physics Letters A*, **254** 179 (1999).
- [113] M.S. Soskin, V.N. Gorshkov, M.V. Vashnetsov, J.T. Malos, and N.R. Heckenberg, “*Topological charge and angular momentum of light beams carrying optical vortices*” *Physical Review A*, **56** 4064 (1997).
- [114] A. Desyatnikov and A.I. Maimistov, “*Conservation of angular momentum for multidimensional optical solitons*” *Quantum Electronics*, **30** 1009 (2000).
- [115] L. Allen, “*Introduction to the atoms and angular momentum of light special issue*” *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, **4** S1 (2002).
- [116] S.M. Barnett, “*Optical angular-momentum flux*” *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, **4** S7 (2002).
- [117] F. Lederer and Y. Silberberg, “*Discrete Solitons*” *Optics and Photonics News*, **13** 48 (2002).
- [118] D.N. Christodoulides, F. Lederer and Y. Silberberg, “*Discretizing light behaviour in linear and nonlinear waveguide lattices*” *Nature*, **424** 817 (2003).
- [119] D. N. Christodoulides and R.I. Joseph, “*Discrete Self-focusing in nonlinear arrays of coupled waveguides*” *Optics Letters*, **13** 794 (1988).
- [120] Y. S. Kivshar, “*Self-localization in arrays of defocussing waveguides*” *Optics Letters*, **18** 1147 (1993).
- [121] Y. S. Kivshar, W. Królikowski, and O.A. Chubykalo “*Dark solitons in discrete lattices*” *Physical Review E*, **50** 5020 (1994).
- [122] A.B. Aceves, C. De Angelis, T. Peschel, R. Muschall, F. Lederer, S. Trillo, and S. Wabnitz, “*Discrete self-trapping, soliton interactions, and beam steering in non-linear waveguide arrays*” *Physical Review E*, **53** 1172 (1996).
- [123] W. Chen and D.L. Mills, “*Gap solitons and the nonlinear optical response of superlattices*” *Physical Review Letters*, **58** 160 (1987).
- [124] Y. S. Kivshar, “*Self-induced gap solitons*” *Physical Review Letters*, **70** 3055 (1993).
- [125] D. Mandelik, H.S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, and J.S. Aitchison, “*Band-Gap structure of waveguide arrays and excitation of Floquet-Bloch solitons*” *Physical Review Letters*, **90** 053902 (2003).
- [126] D. Mandelik, R. Morandotti, J.S. Aitchison, and Y. Silberberg, “*Gap solitons in waveguide arrays*” *Physical Review Letters*, **92** 093904 (2004).
- [127] D. Neshev, A.A. Sukhorukov, B. Hanna, W. Krolkowski, and Y.S. Kivshar, “*Controlled generation and steering of spatial gap solitons*” *Physical Review Letters*, **93** 083905 (2004).
- [128] H.S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, A.R. Boyd, and J.S. Aitchison, “*Discrete spatial solitons in waveguide arrays*” *Physical Review Letters*, **81** 3383 (1998).

- [129] R. Morandotti, U. Peschel, J.S. Aitchison, H.S. Eisenberg, and Y. Silberberg, “*Dynamics of discrete solitons in optical waveguide arrays*” Physical Review Letters, **83** 2726 (1999).
- [130] R. Morandotti, U. Peschel, J.S. Aitchison, H.S. Eisenberg, and Y. Silberberg, “*Experimental observation of linear and nonlinear optical Bloch oscillations*” Physical Review Letters, **83** 4756 (1999).
- [131] T. Pertsch, P. Dannberg, W. Elflein, A. Bräuer, and F. Lederer, “*Optical Bloch oscillations in temperature tuned waveguide arrays*” Physical Review Letters, **83** 4752 (1999).
- [132] H.S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, and J.S. Aitchison, “*Diffraction management*” Physical Review Letters, **85** 1863 (2000).
- [133] R. Morandotti, H.S. Eisenberg, Y. Silberberg, M. Sorel, and J.S. Aitchison, “*Self-focusing and defocusing in waveguide arrays*” Physical Review Letters, **86** 3296 (2001).
- [134] N. K. Efremidis, S. Sears, D. Christodoulides, J.W. Fleischer, and M. Segev “*Discrete solitons in photorefractive optically induced photonic lattices*” Physical Review E, **66** 046602 (2002).
- [135] J.W. Fleischer, T. Carmon, M. Segev, N. K. Efremidis, and D. Christodoulides, “*Observation of discrete Solitons in optically induced real time waveguide arrays*” Physical Review Letters, **90** 023902 (2003).
- [136] J.W. Fleischer, M. Segev, N. K. Efremidis, and D. N. Christodoulides, “*Observation of two-dimensional discrete solitons in optically induced photonic lattices*” Nature, **422** 147 (2003).
- [137] D. Neshev, E. Ostrovskaya, Y. Kivshar, and W. Krolikowski, “*Spatial solitons in optically induced gratings*” Optics Letters, **28** 710 (2003).
- [138] S.F. Mingaleev and Y.S. Kivshar, “*Self-trapping and stable localized modes in nonlinear photonic crystals*” Physical Review Letters, **86** 5474 (2001).
- [139] S.F. Mingaleev and Y.S. Kivshar, “*Long-range interaction and nonlinear localized modes in nonlinear photonic crystals*” Physical Review E **62** 5777 (2001).
- [140] P. Xie, Z.-Q. Zhang, and X. Zhang, “*Gap solitons and soliton trains in finite-sized two-dimensional periodic and quasiperiodic photonic crystals*” Physical Review E **67** 026607 (2003).
- [141] J. Yang and Z.H. Musslimani, “*Fundamental and vortex solitons in a two-dimensional optical lattice*” Optics Letters, **28** 2094 (2003).
- [142] N. K. Efremidis, J. Hudock, D.N. Christodoulides, J.W. Fleischer, O. Cohen, and M. Segev “*Two-dimensional optical lattice solitons*” Physical Review Letters, **91** 213906 (2003).
- [143] Z.H. Musslimani and J. Yang, “*Self-trapping of light in a two-dimensional optical lattice*” Journal of the Optical Society of America B, **21** 973 (2004).
- [144] B.B. Baizakov, B.A. Malomed, and M. Salerno, “*Multidimensional solitons in periodic potentials*” Europhysics Letters, **63** 642 (2003).
- [145] B.B. Baizakov, B.A. Malomed, and M. Salerno, “*Multidimensional solitons in a low-dimensional periodic potential*” Physical Review A, **70** 053613 (2004).
- [146] A. Ferrando, M. Zaccarés, J.A. Monsoriu, D. Binosi, and P. Fernández de Córdoba “*Spatial soliton formation in photonic crystal fibers*” Optics Express, **11** 5 (2003).
- [147] M. Johansson, S. Aubry, Y.B. Gaididei, P.L. Christiansen, and K.O. Rasmussen, “*Dynamics of breathers in discrete nonlinear Schrödinger models*” Physica D, **119** 115(1998).
- [148] B. A. Malomed and P.G. Kevrekidis “*Discrete vortex solitons*” Physical Review E, **64** 026601 (2001).
- [149] P.G. Kevrekidis, B.A. Malomed, A.R. Bishop, and D.J. Frantzeskakis, “*Localized vortices with a semi-integer charge in nonlinear dynamical lattices*” Physical Review E, **65** 016605 (2001).
- [150] P.G. Kevrekidis, B.A. Malomed, and Y.B. Gaididei, “*Solitons in triangular and honeycomb dynamical lattices with the cubic nonlinearity*” Physical Review E, **66** 016609 (2002).
- [151] P.G. Kevrekidis, B.A. Malomed, Z. Chen, and D.J. Frantzeskakis, “*Stable higher-order vortices and quasivortices in the discrete nonlinear Schrödinger equation*” Physical Review E, **70** 056612 (2004).
- [152] M. Johansson, “*Comment on “Localized vortices with a semi-integer charge in nonlinear dynamical lattices”*” Physical Review E, **66** 048601 (2002).
- [153] J. Yang, “*Stability of vortex solitons in a photorefractive optical lattice*” New Journal of Physics, **6** 47 (2004).
- [154] A. Ferrando, M. Zaccarés, P. Fernández de Córdoba, D. Binosi, and J.A. Monsoriu, “*Vortex solitons in photonic crystal fibers*” Optics Express, **12** 5 (2004).

- [155] D. N. Neshev, T.J. Alexander, E. Ostrovskaya, Y. Kivshar, H. Martin, I. Makasyuk, and Z. Chen, “*Observation of discrete vortex solitons in optically induced photonic lattices*” *Physical Review Letters*, **92** 123903 (2004).
- [156] J.W. Fleischer, G. Bartal, O. Cohen, O. Manela, M. Segev, J. Hudock, and D. Christodoulides, “*Observation of Vortex-ring “discrete” solitons in 2D photonic lattices*” *Physical Review Letters*, **92** 123904 (2004).
- [157] J.W. Fleischer, D.N. Neshev, G. Bartal, T.J. Alexander, O. Cohen, E.A. Ostrovskaya, O. Manela, H. Martin, J. Hudock, I. Makasyuk, Z. Chen, D.N. Christodoulides, Y.S. Kivshar, and M. Segev, “*Observation of discrete vortex solitons in 2D photonic lattices*” *Optics and Photonics News*, **15** 30 (2004).
- [158] T.J. Alexander, A.A. Sukhorukov, and Y.S. Kivshar, “*Asymmetric vortex solitons in nonlinear periodic lattices*” *Physical Review Letters*, **93** 063901 (2004).
- [159] J.C. Eilbeck, P.S. Lomdahl, and A.C. Scott, “*The discrete self-trapping equation*” *Physica D*, **16** 318 (1985).
- [160] R.S. MacKay and S. Aubry, “*Proof of existence of breathers for time-reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators*” *Nonlinearity*, **7** 1623 (1994).
- [161] S. Aubry, “*Breathers in nonlinear lattices: existence, linear stability and quantization*” *Physica D*, **103** 201 (1997).
- [162] J. Yang, I. Makasyuk, A. Bezryadina, and Z. Chen “*Dipole and Quadrupole Solitons in Optically Induced Two-Dimensional Photonic Lattices: Theory and Experiment*” *Studies in Applied mathematics*, **113** 398 (2004).
- [163] J. Yang, I. Makasyuk, A. Bezryadina, and Z. Chen, “*Dipole solitons in optically induced two-dimensional photonic lattices*” *Optics Letters*, **29** 1662 (2004).
- [164] A. Ferrando, M. Zacarés, P. Andrés, P. Fernández de Córdoba, and J.A. Monsoriu, “*Nodal solitons and the nonlinear breaking of discrete symmetry*” *Optics Express*, **13** 4 (2005).
- [165] P.G. Kevrekidis, B.A. Malomed, and A.R. Bishop, “*Bound states of two-dimensional solitons in the discrete nonlinear Schrödinger equation*” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **34** 9615 (2001).
- [166] Y.V. Kartashov, A.A. Egorov, Ll. Torner, and D.N. Christodoulides “*Stable soliton complexes in two-dimensional photonic lattices*” *Optics Letters*, **29** 1918 (2004).
- [167] Z. Chen, H. Martin, E.D. Eugenieva, J. Xu, and A. Bezryadina, “*Anisotropic Enhancement of discrete diffraction and formation of two-dimensional discrete soliton trains*” *Physical Review Letters*, **92** 143902 (2004).
- [168] Y.V. Kartashov, V.A. Vysloukh, and Ll. Torner, “*Soliton trains in photonic lattices*” *Optics Express*, **12** 2831 (2004).
- [169] R. Fischer, D. Träger, D.N. Neshev, A.A. Sukhorukov, W. Krolikowsky, C. Denz, and Y. Kivshar, “*Reduced-symmetry Two-dimensional solitons in photonic lattices*” *Physical Review Letters*, **96** 023905 (2006).
- [170] T.J. Alexander and Y.S. Kivshar, “*Soliton complexes and flat-top nonlinear modes in optical lattices*” *Applied Physics B*, **82** 203 (2006).
- [171] T.J. Alexander, E.A. Ostrovskaya, and Y.S. Kivshar, “*Self-trapped nonlinear matter waves in periodic potentials*” *Physical Review Letters*, **96** 040401 (2006).
- [172] C.R. Rosberg, D.N. Neshev, A.A. Sukhorukov, W. Krolikowsky, and Y. Kivshar, “*Observation of nonlinear self-trapping in triangular photonic lattices*” *Optics Letters*, **32** 397 (2007).
- [173] T.J. Alexander, A.S. Desyatnikov, and Y. Kivshar, “*Multivortex solitons in triangular photonic lattices*” *Optics Letters*, **32** 1293 (2007).
- [174] Y.V. Kartashov, V.A. Vysloukh, and Ll. Torner, “*Rotary solitons in Bessel optical lattices*” *Physical Review Letters*, **93** 093904 (2004).
- [175] Y.V. Kartashov, A.A. Egorov, V.A. Vysloukh, and Ll. Torner, “*Rotary dipole-mode solitons in Bessel optical lattices*” *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical optics*, **6** 444 (2004).
- [176] Y.V. Kartashov, A.A. Egorov, V.A. Vysloukh, and Ll. Torner, “*Stable soliton complexes and azimuthal switching in modulated Bessel optical lattices*” *Physical Review E*, **70** 065602 (2004).
- [177] Y. V. Kartashov, V. A. Vysloukh, Ll. Torner, “*Stable Ring-Profile Vortex Solitons in Bessel Optical Lattices*” *Physical Review Letters*, **94** 043902 (2005).

- [178] Y.V. Kartashov, A. Ferrando, A.A. Egorov, and L.I. Torner, “*Soliton topology versus discrete symmetry in optical lattices*” *Physical Review Letters*, **95** 123902 (2005).
- [179] R. Fischer, D.N. Neshev, S. López-Aguayo, A.S. Desyatnikov, A.A. Sukhorukov, W. Krolikowski, and Y. Kivshar, “*Observation of light localization in modulated Bessel optical lattices*” *Optics Express*, **14** 2825 (2006).
- [180] X. Wang, Z. Chen, and P.G. Kevrekidis, “*Observation of discrete solitons and soliton rotation in optically induced periodic ring lattices*” *Physical Review Letters*, **96** 083904 (2006).
- [181] J. Hale and H. Kocak, *Dynamics and Bifurcations*. (Springer-Verlag, New York, 1991)
- [182] O. Manela, O. Cohen, G. Bartal, J. W. Fleischer, and M. Segev, “*Two-dimensional higher-band vortex lattice solitons*” *Optics Letters*, **29** 2049 (2004)
- [183] G. Bartal, O. Manela, O. Cohen, J.W. Fleischer, M. Segev, “*Observation of second-band vortex solitons in 2D photonic lattices*” *Physical Review Letters*, **95** 053904 (2005).
- [184] W.J. Firth and A.J. Scroggie, “*Optical Bullet holes: robust controllable localized states of a nonlinear cavity*” *Physical Review Letters*, **76** 1623 (1996).
- [185] M. Brambilla, L.A. Lugiato, and M. Stefani, “*Interaction and control of optical localized structures*” *Europhysics Letters*, **34** 109 (1996).
- [186] M. Brambilla, L.A. Lugiato, F. Prati, L. Spinelli, and W.J. Firth, “*Spatial soliton pixels in semiconductor devices*” *Physical Review Letters*, **79** 2042 (1997).
- [187] L. Spinelli, G. Tissoni, M. Brambilla, F. Prati, and L.A. Lugiato, “*Spatial soliton pixels in semiconductor microcavities*” *Physical Review A*, **58** 2542 (1998).
- [188] S. Minardi, S. Sapone, W. Chinaglia, and P. Di Trapani, “*Pixellike parametric generator based on controlled spatial-soliton formation*” *Optics Letters*, **25** 326 (2000).
- [189] A. Bramati, W. Chinaglia, S. Minardi, and P. Di Trapani, “*Reconstruction of blurred images by controlled formation of spatial solitons*” *Optics Letters*, **26** 1409 (2001).
- [190] Z. Chen and K. McCarthy, “*Spatial soliton pixels from partially incoherent light*” *Optics Letters*, **27** 2019 (2002).
- [191] J. Petter, J. Schröder, D. Träger, and C. Denz, “*Optical control of arrays of photorefractive screening solitons*” *Optics Letters*, **28** 438 (2003).
- [192] M. Petrovic, D. Träger, A. Strinic, M. Belic, J. Schröder, and C. Denz, “*Solitonic lattices in photorefractive crystals*” *Physical Review E*, **68** 055601 (2003).
- [193] H. Martin, E.D. Eugenieva, Z. Chen, and D.N. Christodoulides, “*Discrete Solitons and soliton-induced dislocations in partially coherent photonic lattices*” *Physical Review Letters*, **92** 123902 (2004).
- [194] D. Neshev, Y. Kivshar, H. Martin, and Z. Chen “*Soliton stripes in two-dimensional nonlinear photonic lattices*” *Optics Letters*, **29** 486 (2004).
- [195] A.S. Desyatnikov, N. Sagemerten, R. Fischer, B. Terhalle, D. Träger, D.N. Neshev, A. Dreischuh, C. Denz, W. Krolikowsky, and Y. Kivshar, “*Two-dimensional self-trapped nonlinear photonic lattices*” *Optics Express*, **14** 2851 (2006).
- [196] D. Träger, R. Fischer, D.N. Neshev, A.A. Sukhorukov, C. Denz, W. Krolikowsky, and Y. Kivshar, “*Nonlinear Bloch modes in two-dimensional photonic lattices*” *Optics Express*, **14** 1913 (2006).
- [197] T. Shi and S. Chi, “*Nonlinear photonic switching by using the spatial soliton collision*” *Optics Letters*, **15** 1123 (1990).
- [198] G.A. Swartzlander Jr., “*Dark-soliton prototype devices: analysis by using direct-scattering theory*” *Optics Letters*, **17** 493 (1992).
- [199] R. McLeod, K. Wagner, and S. Blair, “*(3+1)-dimensional optical soliton dragging logic*” *Physical Review A*, **52** 3254 (1995).
- [200] S. Lan, E. DelRe, Z. Chen, M. Shih, and M. Segev, “*Directional couplers with soliton induced waveguides*” *Optics Letters*, **24** 475 (1999).
- [201] B. Luther-Davies and Y. Xiaoping, “*Waveguides and Y junctions formed in bulk media by using dark spatial solitons*” *Optics Letters*, **17** 496 (1992).
- [202] B. Luther-Davies and X. Yang, “*Steerable optical waveguides formed in self-defocusing media by using dark spatial solitons*” *Optics Letters*, **17** 1755 (1992).
- [203] R. De La Fuente, A. Barthelemy, and C. Froehly, “*Spatial-soliton-induced guided waves in a homogeneous nonlinear Kerr medium*” *Optics Letters*, **16** 793 (1991).
- [204] J. Petter, C. Denz, A. Stepken, and F. Kaiser “*Anisotropic waveguides induced by photorefractive (2+1)D solitons*” *Journal of the Optical Society of America B*, **19** 1145 (2002).

- [205] A.G. Truscott, M.E.J. Friese, N.R. Heckenberg, and H. Rubinsztein-Dunlop, “*Optically written waveguide in an atomic vapor*” *Physical Review Letters*, **82** 1438 (1999).
- [206] J. Christou, V. Tikhonenko, Y. S. Kivshar, and B. Luther-Davies, “*Vortex solitons motion and steering*” *Optics Letters*, **21** 1649 (1996).
- [207] C.T. Law, X. Zhang, and G. A. Swartzlander Jr., “*Waveguiding properties of optical vortex solitons*” *Optics Letters*, **25** 55 (2000).
- [208] C. Bosshard, P.V. Mamyshev, and G.I. Stegeman, “*All-optical steering of dark spatial soliton arrays and the beams guided by them*” *Optics Letters*, **19** 90 (1994).
- [209] W. Królikowski and Y. S. Kivshar, “*Soliton-based optical switching in waveguide arrays*” *Journal of the Optical Society of America B*, **13** 876 (1996).
- [210] C.N. Christodoulides and E.D. Eugeniya, “*Blocking and routing discrete solitons in two-dimensional networks of nonlinear waveguide arrays*” *Physical Review Letters*, **87** 233901 (2001).
- [211] P.R. McIsaac, “*Symmetry-induced modal characteristics of uniform waveguides-I: summary of results*” *IEEE Transactions on microwave theory and techniques*, **23** 421 (1975).
- [212] P.R. McIsaac, “*Symmetry-induced modal characteristics of uniform waveguides-II: theory*” *IEEE Transactions on microwave theory and techniques*, **23** 429 (1975).
- [213] M.J. Steel, T.P. White, C. Martijn de Sterke, R.C. McPhedran, and L.C. Botten, “*Symmetry and degeneracy in microstructured optical fibers*” *Optics Letters*, **26** 488 (2001).
- [214] J.M. Fini, “*Improved symmetry analysis of many-moded microstructure optical fibers*” *Journal of the Optical Society of America B*, **21** 1431 (2004).
- [215] A. Ferrando, “*Discrete-symmetry vortices as Angular Bloch Modes*” *Physical Review E*, **72** 036612 (2005).
- [216] A. Ferrando, M. Zacarés and M-A. García-March, “*Vorticity Cutoff in Nonlinear Photonic Crystals*” *Physical Review Letters*, **95** 043901 (2005).
- [217] A. Ferrando, M. Zacarés and M-A. García-March, J.A. Monsoriu, and P. Fernandez de Córdoba “*Vortex Transmutation*” *Physical Review Letters*, **95** 123901 (2005).
- [218] M. Hamermesh, *Group theory and its application to physical problems.* (Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts, 1964).
- [219] Y. V. Kartashov, A. Ferrando, and M.A. García-March, “*Dipole soliton-vortices*” *Optics Letters*, **32** 2155 (2007).
- [220] L.D. Carr and Ch. W. Clark, “*Vortices in Attractive Bose-Einstein Condensates in Two Dimensions*” *Physical Review Letters*, **97** 010403 (2006)
- [221] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1993).
- [222] V. Pérez-García, M.A. García-March, and A. Ferrando “*Symmetry-assisted vorticity control in Bose-einstein condensates*” *Physical Review A* **75** 033618 (2007).
- [223] A. Bezryadina, D.N. Neshev, A.S. Desyatnikov, J. Young, Z. Chen, and Y. Kivshar, “*Observation of topological transformations of optical vortices in two-dimensional photonic lattices*” *Optics Express*, **14** 8317 (2006).
- [224] A. Ferrando, M.A. García March, and M. Zacarés, “*Superfluid behavior of light in nonlinear periodic media*” *En preparación*
- [225] H. Goldstein, *Mecánica Clásica* (Ed. Reverté, Barcelona, 2000).
- [226] C. Lanczos, *The variational principles of mechanics* (Dover Publications INC., New York, 1986).
- [227] G.H. Wannier, “*The structure of electronic excitation levels in insulating crystals*” *Physical Review*, **52** 191 (1937).
- [228] W. Kohn, “*Analytic properties of Bloch waves and Wannier functions*” *Physical Review*, **115** 809 (1959).
- [229] M.I. Pietrasheñ and Ie.D. Trifonov, *Teoría de grupos. Aplicación a la mecánica cuántica.* (Editorial URSS, Moscú, 2000).
- [230] A.W. Joshi, *Elements of group theory for physicists.* (Collaage Press, University of Beijing, 1982).
- [231] F.W. Byron and R.W. Fuller, *Mathematics of classical and quantum physics.* (Dover publications, General Publishing Company, Mills, Toronto, 1992).
- [232] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid state physics.* (Harcourt College Publishers, Cornell University, 1976)

- [233] R. Von Misses, "On Network methods in conformal mapping and in related problems" Nat. Bur. Stand. Appl. Math. Ser., **18** 1 (1952).
- [234] G.E. Forsythe and W.R. Wasow, Finite-differential methods for partial differential equations (Wiley, New York, 1960).
- [235] P.S. Jensen, "Finite difference techniques for variable grids" Computers and structures, **2** 17 (1972).
- [236] N. Perrone and R. Kao, "A general finite difference method for arbitrary meshes" Computers and structures, **5** 45 (1975).
- [237] V. Girault, "Theory of a finite difference method on irregular networks" SIAM Journal of Numerical Analysis, **11** 260 (1974).
- [238] K.C. Chung, "A generalised finite difference method for heat transfer problems of irregular geometries" Numerical Heat Transfer, **4** 345 (1981).
- [239] T. Liszka, and J. Orkisz, "The finite difference method at arbitrary irregular grids and its application in applied mechanics" Computers and structures, **11** 83 (1981).
- [240] K.C. Chung and T.H. Yao "On lattices admitting unique Lagrange interpolation" SIAM Journal of Numerical Analysis, **14** 735 (1977).
- [241] M. Gasca and J.I. Maeztu, "On Lagrange and Hermite Interpolation in R^k " Numer. Math., **39** 1 (1982).
- [242] L. Gavete, M.L. Gavete, and J.J. Benito, "Improvements of generalized finite difference method and comparison with other meshless method" Applied Mathematical Modelling, **27** 831 (2003).
- [243] J.J. Benito, F. Ureña, and L. Gavete, "Influence of several factors in the generalized finite difference method" Applied mathematical modelling, **25** 1039 (2001).
- [244] M.A. García-March, M. Arevalillo, F.R. Villatoro, F. Giménez, and P. Fernández de Córdoba, P. "A generalized finite difference method using Coatomèlec lattices" enviado a Computer Physics Communications.
- [245] M.A. García-March, F. Giménez, F.R. Villatoro, and P. Fernández de Córdoba, "Unisolvency for Multivariate Polynomial Interpolation in Coatomèlec Configurations of Nodes" enviado a SIAM Journal on Numerical Analysis
- [246] C. Coatomèlec "Approximation et interpolation des fonctions différentiables de plusieurs variables," Ann. Sci. Ecole Norm. Sup., **83** 271 (1966).
- [247] M.A. García-March, M. Zacarés, F. Giménez, A. Ferrando, P. Fernández de Córdoba, and F.R. Villatoro, "A generalized finite difference method for soliton analysis in nonlinear photonic structures" Conference on Recent Advances on Nonlinear Partial Differential Equations and Applications. Toledo, España. Libro de resúmenes, **20** (2006)
- [248] M.A. García-March, A. Ferrando, M. Zacarés, J. Vijande, and L.D. Carr "Angular pseudo-momentum theory for the generalized nonlinear Schrödinger equation in discrete rotational symmetry media" enviado a Physica D.
- [249] A. Ferrando, M.Á. García-March and S. Sahu "Symmetry, winding number and topological charge of vortex solitons in discrete-symmetry media" En preparación.
- [250] M.A. García-March, A. Ferrando, M. Zacarés, D.E. Ceballos, "Theory of angular excitations for single states of the nonlinear Schrödinger equation in discrete symmetry potentials" En preparación.
- [251] M.A. García-March, A. Ferrando, M. Zacarés, and D.E. Ceballos, "Intraband soliton excitations in self-focusing periodic media" En preparación.
- [252] M.A. García-March, A. Ferrando, M. Zacarés, and D.E. Ceballos, "Intraband vortex excitations in self-focusing periodic media" En preparación.
- [253] M. Zacarés, A. Ferrando, G. Renversez, F. Drouart, and M.A. García-March "Donor and acceptor nonlinear modes in photonic crystals" En preparación.
- [254] A. Ferrando, M.A. García-March, and M. Zacarés "Angular gap solitons" En preparación.
- [255] M.A. García-March, A. Ferrando, M. Zacarés, and D.E. Ceballos, "Classification of multi-vortex solitons in discrete symmetry media" En preparación.
- [256] M.A. García-March, A. Ferrando, and M. Zacarés "Topological charge conversor using symmetry control" En preparación.
- [257] J. Vijande, A. Ferrando, M. Zacarés, M.A. García-March, and E. Merino, "Vortex clusterization" En preparación.
- [258] M.A. García-March, A. Ferrando, and M. Zacarés "Nonlinear Management of vortex clusterization" En preparación.

- [259] M.A. García-March, A. Ferrando, and M. Zacarés “*Planetary vortices*” En preparación.
- [260] A. Ferrando, M.A. García-March, M. Zacarés, and P. Fernández de Córdoba “*Photonic magnetism of crystallised light*” En preparación.