

# TRANSPORTE DE UN ELECTRÓN CRISTALINO POR EFECTO ACUMULADO DE LOCALIZACIONES ASINTÓTICAS

Diego Sanjinés C.<sup>1</sup>

*Instituto de Investigaciones Físicas  
Universidad Mayor de San Andrés  
Casilla 8635, La Paz - Bolivia*

## RESUMEN

Se estudia el efecto que tiene un campo eléctrico homogéneo con una dependencia temporal (periódica) del tipo “diente de sierra”, sobre la propagación de un electrón cristalino con un hamiltoniano de enlace fuerte. Como resultado de las simulaciones numéricas, se encuentra que durante los primeros instantes el electrón tiende a propagarse en una dirección preferencial del cristal, aunque dicha propagación está acompañada de una dispersión creciente del paquete de ondas electrónico a medida transcurre el tiempo. Sin embargo, al aumentar la frecuencia del campo eléctrico y la pendiente de cada “diente”, se observa un fenómeno muy interesante: en lugar de propagarse de forma unidireccional, el electrón entra en un régimen oscilatorio cuya frecuencia es distinta a la del campo externo; ya que la dispersión del paquete de ondas oscila y está acotada, se puede pensar eventualmente en observar dicho fenómeno en un experimento, al menos durante un lapso corto en el que puedan ocurrir algunas oscilaciones de Bloch completas. Este efecto es inesperado pues cada vez que un “diente” del campo eléctrico actúa sobre el electrón, éste tiene su velocidad orientada en una misma dirección del cristal, por lo que intuitivamente se pensaría en un fenómeno de “resonancia” cuyo efecto sería la propagación unidireccional del electrón. Se puede mostrar analíticamente que bajo ciertas condiciones, el electrón tiende a “sentir” un campo eléctrico promedio estático, cuyo efecto es localizarlo en un régimen oscilatorio que inhibirá su propagación, i.e., no se medirá una corriente neta DC.

## 1. INTRODUCCIÓN

El comportamiento dinámico de un electrón en presencia del potencial periódico de una red cristalina, además del potencial provocado por un campo eléctrico externo arbitrario, es lo que se puede referir en adelante como “el problema de transporte de un electrón cristalino”. Aunque el formalismo teórico desarrollado en este artículo corresponde al problema de una partícula, su generalización para el caso de un flujo de partículas se podría obtener, por ejemplo, a través de la ecuación de continuidad. Ciertamente, a partir de las propiedades dinámicas de un electrón, se puede dilucidar las propiedades macroscópicas de transporte en un cristal, como ser el caso del transporte de corriente eléctrica[1].

Los efectos relevantes en el contexto de este trabajo corresponden a las diferentes formas en que se manifiesta el fenómeno de localización del electrón cristalino, esto es, el movimiento (que puede ser periódico) del electrón en una región finita o localizada del cristal (por lo que no habría corriente eléctrica directa o corriente DC); dicho movimiento está determinado por la posición

y velocidad medias del paquete de ondas electrónico, así como por su “ancho” o desplazamiento cuadrático medio definido en el sentido usual de la varianza (cf. sección 2). El fenómeno de localización en presencia de un campo eléctrico estático y homogéneo, es conocido como oscilación de Bloch (OB), y —aunque fue predicho[2] bajo la suposición de un modelo semiclásico en 1928— solamente a partir de los años 80 se comprendió que se trata de un fenómeno cuántico[1]; la observación experimental directa de la OB como un desplazamiento periódico de carga eléctrica en una superred de semiconductores (SSL) se verificó recién en el año 1997[3]. Teóricamente se ha sugerido la posibilidad de observar el fenómeno de localización dinámica[4], que ocurriría en presencia de un campo eléctrico homogéneo con una dependencia temporal armónica. Otra forma de localización que ha sido propuesta recientemente[5] es aquella que se puede denominar *localización asintótica*, pues correspondería al régimen oscilatorio de un electrón en presencia de un campo eléctrico homogéneo cuya magnitud crece linealmente con el tiempo; en estas circunstancias, como se verá en la sección 2, el electrón se localizaría a una cierta distancia efectiva  $D$  a partir de su posición inicial, a través de una serie de oscilaciones con una amplitud

<sup>1</sup>Email: sanjines@fiums.a.edu.bo

que decrece como función inversa del tiempo. De aquí la denominación de *localización asintótica*.

En este trabajo se examinará algunos de los efectos teóricos y numéricos que tendría el someter a un electrón a una secuencia de localizaciones asintóticas como consecuencia de la aplicación de un campo eléctrico externo homogéneo con una dependencia temporal del tipo “diente de sierra”, esto es, un campo eléctrico periódico donde cada periodo de tiempo consiste de una rampa que induce al electrón a localizarse; luego el campo se apaga súbitamente y el proceso de localización se repite. Así, se esperaría que el electrón “avance” en una sola dirección dando lugar a una corriente DC, y constituyendo por lo tanto un mecanismo efectivo de propagación por el que el electrón se ve impedido de retornar a su posición original<sup>2</sup>. Sin embargo, ya que este es un proceso físico cuántico y debe por lo tanto describirse a través de la ecuación de Schrödinger, se sabe —de acuerdo a la teoría de sistemas dinámicos bajo la acción de potenciales periódicos[6]— que las soluciones para este tipo de sistemas físicos suelen (bajo ciertas condiciones) ser periódicas y estar acotadas, lo que implicaría la localización del electrón y por lo tanto no habría corriente DC.

Esta cuestión se investigará a través de cálculos analíticos y simulaciones numéricas de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, de acuerdo al algoritmo pseudo-espectral, que ha sido estudiado exhaustivamente y puesto a prueba en una serie de casos relevantes[5][7]. En la sección 2 a continuación se presenta el modelo físico del problema a tratar y la interpretación fasorial; en la sección 3 se presenta el formalismo de la localización asintótica; en la sección 4 se presenta los resultados importantes de este trabajo concernientes al efecto acumulado que provoca una secuencia de localizaciones asintóticas; finalmente, en la sección 5 se resume los aspectos relevantes de todo el trabajo.

Vale la pena mencionar que, aunque los efectos debidos a un campo “diente de sierra” son ampliamente conocidos en áreas tales como la electrónica, no ocurre lo mismo en el dominio de la dinámica de electrones cristalinos, cuyo tratamiento estricto corresponde al de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, con un hamiltoniano que usualmente es de enlace fuerte (*tight-binding*)[8]. Se sabe (cf. Alekseev[9], por ejemplo), que aún el uso de dicho modelo (hamiltoniano) en un tratamiento semiclásico —a través de la ecuación de balance— conduce a la predicción de una corriente DC como resultado de la aplicación de un campo externo AC.

## 2. EL MODELO FÍSICO Y LA INTERPRETACIÓN FASORIAL

El modelo físico supuesto para este tipo de problema estará representado por el hamiltoniano de enlace fuerte de una sola banda, con interacciones a primeros vecinos y en una dimensión,

$$H = T(p) + V(x, t), \quad (1)$$

donde

$$T(p) = -2A \cos(ap) \quad (2)$$

es la “energía cinética” o “energía de banda” dependiente del momentum cristalino  $p$ , con  $A$  el elemento de salto (*hopping*) del electrón entre sitios vecinos de la red que están separados por una constante de red  $a$ . La energía potencial  $V(x, t)$  en  $H$  describe el efecto sobre el electrón de cualquier fuerza externa que no es intrínseca a la red, mientras que los efectos debidos al potencial periódico atómico ya están incorporados en  $T(p)$ . Este es el modelo físico que usualmente representa a la dinámica electrónica en sistemas tales como heteroestructuras de semiconductores[10] (que comprenden a las SSL), donde el electrón se transporta bajo el efecto de algún campo eléctrico externo a lo largo del material a través del mecanismo de salto entre sitios vecinos de la red. En este caso, la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$H\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (3)$$

es la función de onda electrónica  $\Psi(x, t)$  que se expande en un conjunto completo de funciones de Wannier de una sola banda  $\Phi(x - ma)$  localizadas alrededor del sitio  $m$  de la red cristalina, esto es,

$$\Psi(x, t) = \sum_m C_m(t) \Phi(x - ma), \quad (4)$$

donde la suma abarca a todos los sitios atómicos de una red cristalina infinita ( $-\infty < m < \infty$ ). Ya que las funciones de Wannier  $\Phi$  son estacionarias y están fuertemente localizadas, los coeficientes  $C_m(t)$  dependientes del tiempo describen el *perfil* o curva envolvente de la función de onda  $\Psi(x, t)$  cuando ésta se evalúa en cada sitio de la red, por lo que los  $C_m(t)$  representan la evolución del electrón cristalino. En efecto, los principales parámetros de dicha evolución son la posición media  $z(t)$  del paquete de ondas definida por

$$z(t) = \langle m \rangle = \sum_m m |C_m(t)|^2, \quad (5)$$

y el “ancho”  $w^2(t)$  o desplazamiento cuadrático medio del paquete de ondas definido por

$$w^2(t) = \langle m^2 \rangle = \sum_m m^2 |C_m(t)|^2. \quad (6)$$

Como ya se mostró en trabajos anteriores[5][7], para el caso particular de un potencial lineal  $V(x, t) = \alpha(t)x$

<sup>2</sup>El modelo físico comprendido en este trabajo no incluye efectos disipativos debidos —por lo general— a dispersión fonónica o por electrones térmicos o por impurezas de la red, que impiden al electrón completar la OB.

asociado a un campo eléctrico externo homogéneo, los coeficientes  $C_m(t)$  obedecen la ecuación de evolución iterativa

$$C_p^{n+1} = \sum_m C_m^n e^{-ia(m+p)(\alpha_{n+1}+\alpha_n)\lambda/2} i^{m-p} J_{m-p}(\tau), \quad (7)$$

donde  $C_m^n = C_m(n\Delta t)$ ,  $\alpha_n = \alpha(n\Delta t)$ ,  $\tau = 2A\Delta t = 4A\lambda$ . En este trabajo se eligió, por comodidad, trabajar en las unidades físicas denominadas “atómicas” (cf., por ejemplo, Yoshida[11]) donde  $\hbar = 1$ ,  $M$  (masa del electrón)=1,  $e$  (carga del electrón)=1 y  $a$  (constante de red)=1. La fórmula (7) representa pues el valor que toma el coeficiente  $C_p^{n+1}$  después de un instante  $\Delta t$  como función de todos los coeficientes  $C_m^n$  en el instante inmediato anterior. Así, el proceso de evaluar (7) en forma iterativa comienza a partir del paquete electrónico inicial definido por los coeficientes  $C_m^0$ ; luego, al establecer la dependencia temporal específica del potencial lineal  $V(x, t)$  a través de  $\alpha(t)$ , se puede conocer el valor de los coeficientes  $C_m^n$  para un instante arbitrario  $t = n\Delta t$ . De esta manera se calcula entonces los parámetros relevantes (5) y (6) necesarios para describir la dinámica electrónica.

Ciertamente, la fórmula recursiva (7) no sería muy útil de no ser que para ciertos casos, como el de un campo eléctrico homogéneo de la forma  $E(n\Delta t) = \alpha(n\Delta t)$ , la ec. (7) se puede resolver de manera exacta para obtener  $C_p^n$  como función de los  $C_p^0$  iniciales. Así, en el límite del continuo temporal ( $\Delta t \rightarrow 0$ ,  $n \rightarrow \infty$ , con  $t = n\Delta t$ ) la solución de (7) es:

$$C_p(t) = \sum_m C_m(0) e^{ip[\xi(t)-\eta(t)]} e^{-im\xi(t)} i^{m-p} J_{m-p}(\tau(t)), \quad (8)$$

donde se definió

$$\eta(t) = \int_0^t \alpha(t') dt', \quad (9)$$

$$\tau(t) = \tau(t) e^{i\xi(t)} = u(t) + iv(t), \quad (10)$$

$$u(t) = 2A \int_0^t \cos \eta(t') dt', \quad v(t) = 2A \int_0^t \sin \eta(t') dt'. \quad (11)$$

A partir de las ecs. (8)-(11) se puede mostrar[5] que la posición media del paquete de ondas dada por (5) y su correspondiente velocidad media  $v(t)$  se expresan por

$$z(t) = z(0) - |S_0| \tau(t) \sin[\xi(t) + \theta_0], \quad (12)$$

$$v(t) = v(0) \frac{\sin[\eta(t) + \theta_0]}{\sin \theta_0}, \quad (13)$$

$$v(0) = -2A |S_0| \sin \theta_0, \quad (14)$$

donde se ha supuesto un paquete de ondas inicial representado por los coeficientes  $C_m^0$  tales que

$$|S_0| e^{i\theta_0} \equiv \sum_m (C_{m+1}^0)^* C_m^0. \quad (15)$$

Luego, dado un campo eléctrico homogéneo  $E(t) = \alpha(t)$ , la evolución dinámica del paquete de ondas electrónico se puede representar gráficamente como la evolución del vector  $\tau(t)$  en el plano complejo (o plano de Argand) definido por los ejes  $u$ - $v$  de acuerdo a (10). Esta representación gráfica se denomina “interpretación fasorial” [5] (Fig.1). Así, a medida que varía el tiempo  $t$ , el vector  $\tau(t)$  describe una curva en el plano complejo  $u$ - $v$ , donde los valores medios de la posición  $z(t)$  y velocidad  $v(t)$  quedan determinados de manera única por las propiedades geométricas de dicha curva. Si el electrón tiene una velocidad inicial  $v(0)$ , de acuerdo a (14) existe un ángulo  $\theta_0$  por el que se obtiene el plano rotado  $u'$ - $v'$ . Luego, el desplazamiento del electrón es proporcional a la proyección del vector  $\tau(t)$  a lo largo del eje  $v'$ , mientras que, de acuerdo a (13), la velocidad del electrón resulta ser proporcional a  $\sin[\eta(t) + \theta_0]$ , donde  $\eta(t) + \theta_0$  es el ángulo que forma (en el instante  $t$ ) la recta tangente a la curva generada por  $\tau(t)$  con el eje  $u'$ .

En el caso particular de un campo eléctrico homogéneo y estático ( $E(t) = \alpha$ ) en el que se mueve un electrón cuya velocidad inicial es  $v(0) = 0$ , la curva que describe el vector  $\tau(t)$  en el plano  $u$ - $v$  es una circunferencia de radio  $R = 2a/\alpha$  centrada en el punto  $(0, R)$ . Así, bajo la interpretación fasorial, la dinámica del electrón se traduce en un movimiento circular uniforme que no es otra cosa que la conocida oscilación de Bloch (OB) con amplitud  $R$  y periodo  $\tau_B = 2\pi/\alpha$ .

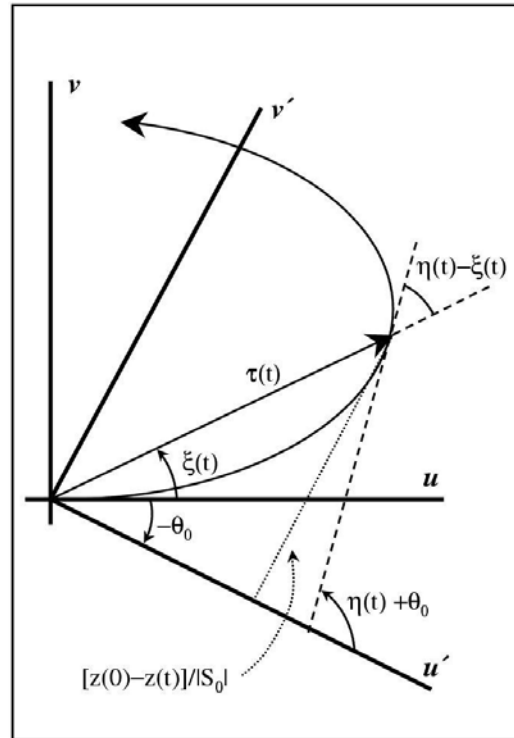


Figura 1. Representación en el plano complejo  $u$ - $v$  de la curva descrita por  $\tau(t)$  de acuerdo a (10). El ángulo  $\theta_0$  corresponde a los ejes rotados  $u'$ - $v'$ , y está relacionado con la velocidad inicial del electrón según (14).

### 3. LOCALIZACIÓN ASINTÓTICA

Cuando el campo eléctrico homogéneo depende del tiempo linealmente como

$$E(t) = \kappa t, \quad (16)$$

entonces el vector  $\tau(t)$  es

$$\tau(t) = 2A\gamma [C(t/\gamma) + iS(t/\gamma)], \quad (17)$$

donde  $\gamma = \sqrt{\pi/\kappa}$ ; los símbolos  $C(t/\gamma)$  y  $S(t/\gamma)$  están relacionados con las integrales de Fresnel[12] como

$$C(x) + iS(x) = \int_0^x \exp\left(i\frac{\pi}{2}y^2\right) dy. \quad (18)$$

Así, la curva descrita por el vector  $\tau(t)$  (aparte de un factor global  $2A\gamma$ ) corresponde a la “espiral de Cornu” o “clotoide”[13] (Fig.2), para la que se verifica el límite asintótico

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |\tau(t)| = \sqrt{2}A\gamma. \quad (19)$$

Debido a la naturaleza geométrica de la espiral de Cornu, se puede inferir el comportamiento dinámico del electrón: a medida que el tiempo transcurre, el campo eléctrico  $E(t) \propto t$  localiza al electrón en un régimen oscilatorio “amortiguado” con periodo y amplitud decrecientes alrededor de la posición final  $z(\infty)$  dada por

$$z(\infty) = z(0) - v_0 \frac{\sin(\theta_0 + \pi/4)}{\sin \theta_0} \sqrt{\frac{\pi}{2\kappa}}. \quad (20)$$

Ya que el valor de  $|\tau(t)|$  permanece acotado de acuerdo al límite asintótico (19), se puede mostrar que el desplazamiento cuadrático medio  $w^2(t)$  en (6) queda asimismo acotado, dando lugar a un régimen dinámico de *localización asintótica* que resulta ser esencialmente diferente de los casos ya conocidos de localización estática y dinámica considerados, por ejemplo, por Dunlap-Kenkre[13].

Este tipo de fenómeno es intuitivamente comprensible, pues ya se sabe que para las OB, la amplitud de cada oscilación es inversamente proporcional a la magnitud del campo eléctrico,  $R \propto \alpha^{-1}$ ; luego, si dicha magnitud crece linealmente con el tiempo, entonces la amplitud de cada “OB instantánea” disminuye como  $t^{-1}$ , localizando así al electrón a una distancia neta  $D = |z(\infty) - z(0)|$  a partir de su posición inicial. La designación de localización asintótica se debe pues al comportamiento  $t^{-1}$  de la amplitud de esta oscilación. Un valor particularmente interesante de la velocidad inicial  $v(0)$  en (14) corresponde a  $\theta_0 = \pi/4$ , pues —como se puede apreciar de las Figs. 1 y 2, así como de (20)—ello implica un desplazamiento máximo

$$D = A|S_0| \sqrt{\frac{2\pi}{\kappa}}, \quad (21)$$

así como un valor mínimo del desplazamiento cuadrático medio  $w^2(\infty)$ . En la Fig.4 se puede ver varias simulaciones numéricas realizadas de manera iterativa con la fórmula pseudo-espectral (7).

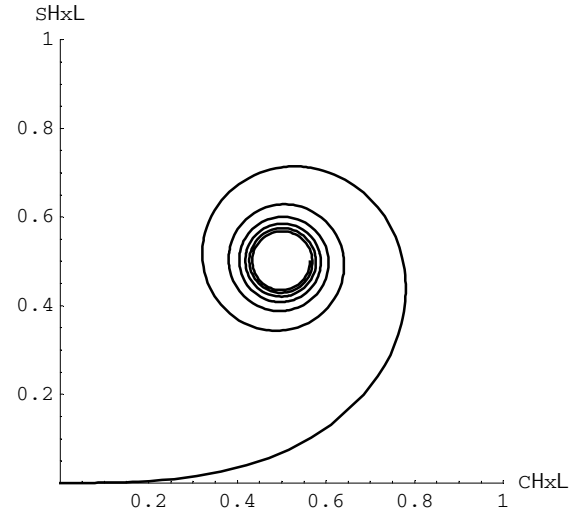


Figura 2. Espiral de Cornu graficada en el plano de Argand de acuerdo a (18) con  $0 < x < 10$ .

### 4. EL EFECTO ACUMULADO DE LOCALIZACIONES ASINTÓTICAS

En vista de lo anterior, surge una posibilidad interesante que es el motivo principal de este trabajo: *¿cuál sería el efecto neto de someter a un electrón a una sucesión de localizaciones asintóticas?* Consideremos que, para lograr tal sucesión, el campo eléctrico correspondiente tendría que depender del tiempo como una función periódica del tipo “diente de sierra”:

$$E(t) = \kappa(t - nT), \quad t \in [nT, (n+1)T], \quad (22)$$

para todo entero  $n$ . La elección del periodo  $T$  debería ser tal que el electrón inicie su movimiento en el intervalo temporal  $[(n+1)T, (n+2)T]$  bajo las mismas condiciones en que se inició en el intervalo inmediato anterior  $[nT, (n+1)T]$ . Así, —a primera vista— podría pensarse que el electrón se transportará en una dirección preferencial del cristal a través de una sucesión de desplazamientos netos de magnitud  $D$  dada por (21). El efecto físico de dicho transporte se manifestaría entonces como una corriente DC. Por otra parte, como se mencionó en la sección 1, de acuerdo a la teoría de los sistemas dinámicos bajo la acción de potenciales periódicos, la solución de la ecuación de Schrödinger (3) bien podría ser periódica y acotada, lo que implicaría localización del electrón y, en consecuencia, ninguna corriente DC.

A fin de investigar esta cuestión, establezcamos las condiciones necesarias para lograr un efecto acumulado de localizaciones asintóticas. Para que el electrón inicie su movimiento en cada periodo  $[nT, (n+1)T]$  con las mismas condiciones que en el periodo inmediato anterior, la velocidad debe cumplir que  $v(T) = v(0)$  en (13), i.e.,  $\sin[\eta(T) + \theta_0] = \sin \theta_0$ , de donde se tiene que  $\eta(T) = 2m\pi$  para todo entero  $m$ . Sustituyendo  $\alpha(t') = E(t') = \kappa t'$  en (9), se obtiene  $\eta(T) = \kappa T^2/2$ , de donde  $T^2 = 4\pi m/\kappa$ . El entero  $m$  representaría al número de “oscilaciones de Bloch” de amplitud decreciente que ocurren a medida

que el electrón tiende a localizarse asintóticamente en cada periodo  $[nT, (n+1)T]$ . Estableciendo arbitrariamente  $m = 36$ , se tiene que

$$T = 12\sqrt{\pi/\kappa}. \quad (23)$$

De esta manera, la función periódica  $E(t)$  en (22) se representa como la serie de Fourier

$$E(t) = \kappa\sigma \left[ \pi - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(nt/\sigma)}{n} \right], \quad (24)$$

donde se definió  $\sigma = T/2\pi = 6/\sqrt{\pi\kappa}$ . En la Fig.3 se puede ver la simulación numérica de  $E(t)$  correspondiente a 30 términos de la suma en (24). Nótese que para cada transición entre un periodo de  $E(t)$  y el siguiente, la función  $E(t)$  exhibe valores ligeramente negativos a través de pendientes muy pronunciadas, lo que se debe ciertamente al truncamiento de la serie de Fourier. Sin embargo, resulta interesante notar la eventual conexión con un teorema reciente debido a Dignam[14] sobre la localización provocada por potenciales eléctricos periódicos: “los únicos campos eléctricos AC que producen localización dinámica exacta nunca pueden ser nulos, por lo que necesariamente son discontinuos allí donde cambian de signo”.

Un caso relevante que se puede explorar de manera analítica corresponde al límite

$$\lim_{T \rightarrow 0, \kappa \rightarrow \infty} T\sqrt{\kappa} = 12\sqrt{\pi}, \quad (25)$$

que representa a una serie muy densa de “dientes de sierra”, donde cada diente tiene una pendiente  $\kappa$  muy pronunciada. En este caso, ya que el desplazamiento neto en (21) varía como  $D \propto 1/\sqrt{\kappa}$ , se podría esperar que ocurra la propagación del electrón cristalino a través de una secuencia continua de desplazamientos  $D$  infinitesimales. Sin embargo, ya que la suma en (24) converge (aunque lentamente), también se podría pensar en la aparición de un campo eléctrico “efectivo” estático  $E^*$  cuyo va-

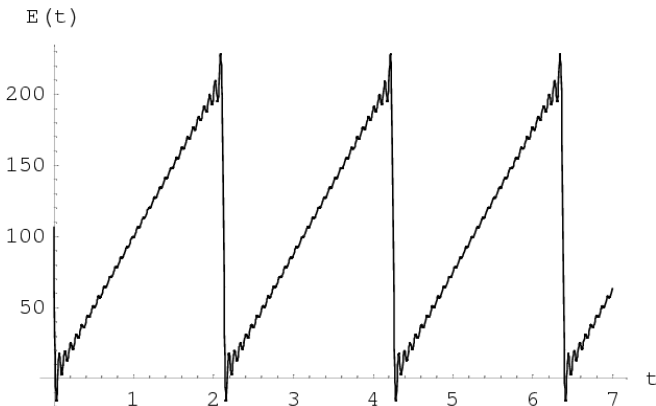


Figura 3. Simulación numérica de  $E(t)$  correspondientes a 30 términos de la suma en (24).

lor se puede calcular como el promedio de  $E(t)$  sobre un periodo  $T$ ,

$$E^* = \frac{1}{T} \int_0^T \kappa t dt = 6\sqrt{\pi\kappa} = \kappa\pi\sigma; \quad (26)$$

el valor así calculado de  $E^*$  corresponde al primer término del desarrollo de Fourier de  $E(t)$  en (24). En este caso, la “presencia” dominante de un campo eléctrico efectivo estático implicaría asimismo un régimen dinámico efectivo de OB con periodo

$$\tau_B^* = \frac{2\pi}{E^*} = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{\pi}{\kappa}}. \quad (27)$$

El resultado de (27) anuncia que la OB efectiva tiene un periodo que disminuye como  $\kappa^{-1/2}$ , esto es, mientras mayor es la pendiente de cada diente de sierra, menor es el periodo de OB.

En la Fig.5 se tiene una secuencia de simulaciones realizadas por medio de la fórmula iterativa pseudo-espectral (7). En todos los casos se muestra  $z(t)$  y  $w^2(t)$  como funciones del tiempo  $t$ . La línea segmentada en el gráfico (a) representa al campo eléctrico  $E(t)$  “diente de sierra”, donde el periodo  $T$  se calculó según (23). En los siguientes gráficos se incrementó el valor de la pendiente  $\kappa$  de cada diente, por lo que el periodo  $T$  es menor. Como se puede ver, en (a) y (b) el electrón se transporta en una dirección preferencial, al menos hasta donde se puede apreciar en estas simulaciones numéricas dados los valores máximos de  $t$  que se eligió en cada caso. En (c) se nota un punto de retorno en el movimiento del electrón; en (d) y (e) ya es evidente que la dinámica electrónica corresponde un régimen oscilatorio cuya amplitud y periodo disminuyen a medida que aumenta  $\kappa$ , en concordancia cualitativa con lo que se esperaría que suceda en presencia de un campo eléctrico estático efectivo; sin embargo, el periodo de esta oscilación no coincide numéricamente con el valor de  $\tau_B^*$  calculado en (27), lo que indica seguramente que en el desarrollo de  $E(t)$  en (24) no solamente el primer término —que coincide con el lado derecho de (26)— es importante para el cálculo de un campo efectivo  $E^*$ , sino que debe tomarse en cuenta más términos. Un cálculo preliminar mostrará la factibilidad de hallar un periodo efectivo  $\tau_B^*$  asociado al régimen oscilatorio inducido por un campo  $E^*$ . Ya que en este régimen oscilan tanto la posición  $z(t)$  como la velocidad  $v(t)$ , entonces se debe cumplir simultáneamente que

$$z(t + \tau_B^*) = z(t), \quad v(t + \tau_B^*) = v(t). \quad (28)$$

De acuerdo a (13), la segunda ecuación (28) implica que

$$\sin(\eta(t + \tau) + \pi/4) = \sin(\eta(t) + \pi/4), \quad (29)$$

lo que ocurre cuando

$$\eta(t + \tau) = \eta(t) + 2m\pi \quad (30)$$

para todo entero  $m$ . De (9) y (24) se calcula  $\eta(t)$  como

$$\eta(t) = \kappa\sigma \left[ \pi t - 4\sigma \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{\sin(nt/2\sigma)}{n} \right)^2 \right]. \quad (31)$$

Sustituyendo (30) en (31) se tiene que

$$\sqrt{\frac{\kappa}{\pi}} \tau_B^* = \frac{m}{3} + \frac{24}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \left[ \sin^2 \left( \frac{n(t + \tau_B^*)}{2\sigma} \right) - \sin^2 \left( \frac{nt}{2\sigma} \right) \right]. \quad (32)$$

Ya que el valor del corchete en (32) está acotado dentro del intervalo  $[-1, 1]$ , entonces la sumatoria en (32) estará asimismo acotada por el valor de la suma

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}, \quad (33)$$

donde  $\zeta(x)$  es la función zeta de Riemann[13]. Ya que el lado izquierdo de (32) *no* depende del tiempo  $t$ , entonces (32) sólo se cumple si

$$\sin \left( \frac{n(t + \tau_B^*)}{2\sigma} \right) = \pm \sin \left( \frac{nt}{2\sigma} \right), \quad (34)$$

es decir, sólo si se verifica

$$\tau_B^* = \frac{2q\pi\sigma}{n} = 12\frac{q}{n} \sqrt{\frac{\pi}{\kappa}}, \quad (35)$$

para enteros arbitrarios  $q, n$  tales que su cociente sea positivo, pues siempre se puede suponer —sin pérdida de generalidad— que  $\tau_B^* > 0$ . Así, (32) queda como

$$\tau_B^* = \frac{m}{3} \sqrt{\frac{\pi}{\kappa}}, \quad (36)$$

lo que, junto a (35), implica que  $36q = nm$ ; eligiendo  $m = 36p$ , se tiene entonces que  $q = np$ , de donde el periodo efectivo de Bloch resulta ser una función del parámetro  $\kappa$  y del entero positivo  $p$ :

$$\tau_B^* = \xi_p(\kappa) = 12p \sqrt{\frac{\pi}{\kappa}}. \quad (37)$$

El resultado predicho por (37), a diferencia del que se obtuvo en (27), es al menos 36 veces mayor que este último, lo que refleja la importancia de los términos que siguen al primero en el desarrollo de  $E(t)$  en (24).

A fin de verificar la ec. (37), obtengamos los cocientes adimensionales

$$\frac{\xi_p(\kappa)}{\xi_{p'}(\kappa')} = \frac{p}{p'} \sqrt{\frac{\kappa'}{\kappa}} \quad (38)$$

para los valores de  $\kappa$  (o  $\kappa'$ ) que varían entre  $\kappa = 1000$  (Fig.5d) y  $\kappa = 5000$  (Fig.5e). Para tal efecto, se elaboró la Fig.6 a través de simulaciones numéricas de (7) con valores de  $\kappa$  equidistantes en incrementos de  $\Delta\kappa =$

666.67. Definiendo  $\kappa_j = 1000 + j\Delta\kappa$  ( $j = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ ) se obtuvo —a partir de los datos de la Fig.6 (junto con las Figs.5d y 5e)—, los 21 cocientes en (38) correspondientes a  $j > j'$ . Dichos cocientes y los valores enteros de  $p$  (o  $p'$ ) que mejor se acomodan en (38) de acuerdo a los resultados numéricos son:

$\frac{\xi_{30}(\kappa_1)}{\xi_{40}(\kappa_0)} = \frac{234}{402}$ ,	$\frac{\xi_{20}(\kappa_2)}{\xi_{40}(\kappa_0)} = \frac{132}{402}$ ,	$\frac{\xi_{16}(\kappa_3)}{\xi_{40}(\kappa_0)} = \frac{93}{402}$ ,
$\frac{\xi_{30}(\kappa_4)}{\xi_{40}(\kappa_0)} = \frac{158}{402}$ ,	$\frac{\xi_{15}(\kappa_5)}{\xi_{40}(\kappa_0)} = \frac{72}{402}$ ,	$\frac{\xi_{12}(\kappa_6)}{\xi_{40}(\kappa_0)} = \frac{53}{402}$ ,
$\frac{\xi_{20}(\kappa_2)}{\xi_{30}(\kappa_1)} = \frac{132}{234}$ ,	$\frac{\xi_{16}(\kappa_3)}{\xi_{30}(\kappa_1)} = \frac{93}{234}$ ,	$\frac{\xi_{30}(\kappa_4)}{\xi_{30}(\kappa_1)} = \frac{158}{234}$ ,
$\frac{\xi_{15}(\kappa_5)}{\xi_{30}(\kappa_1)} = \frac{72}{234}$ ,	$\frac{\xi_{12}(\kappa_6)}{\xi_{30}(\kappa_1)} = \frac{53}{234}$ ,	$\frac{\xi_{16}(\kappa_3)}{\xi_{20}(\kappa_2)} = \frac{93}{132}$ ,
$\frac{\xi_{30}(\kappa_4)}{\xi_{20}(\kappa_2)} = \frac{158}{132}$ ,	$\frac{\xi_{15}(\kappa_5)}{\xi_{20}(\kappa_2)} = \frac{72}{132}$ ,	$\frac{\xi_{12}(\kappa_6)}{\xi_{20}(\kappa_2)} = \frac{53}{132}$ ,
$\frac{\xi_{30}(\kappa_4)}{\xi_{16}(\kappa_3)} = \frac{158}{93}$ ,	$\frac{\xi_{15}(\kappa_5)}{\xi_{16}(\kappa_3)} = \frac{72}{93}$ ,	$\frac{\xi_{12}(\kappa_6)}{\xi_{16}(\kappa_3)} = \frac{53}{93}$ ,
$\frac{\xi_{15}(\kappa_5)}{\xi_{30}(\kappa_4)} = \frac{72}{158}$ ,	$\frac{\xi_{12}(\kappa_6)}{\xi_{30}(\kappa_4)} = \frac{53}{158}$ ,	$\frac{\xi_{12}(\kappa_6)}{\xi_{15}(\kappa_5)} = \frac{53}{72}$ .

Tabla 1

## 5. CONCLUSIONES

Se sometió un electrón cristalino a la acción de un campo eléctrico periódico tipo “diente de sierra”. Se encontró a través de simulaciones numéricas así como de un análisis riguroso, que hay razones por las cuales se puede pensar que el electrón estará localizado en un régimen oscilatorio con periodo efectivo  $\tau_B^*$ , por lo que no habrá una corriente neta DC, como podía ser el caso si uno piensa solamente en el efecto tipo “resonancia”<sup>3</sup> cuando cada rampa o “diente” del campo eléctrico desplaza sucesivamente al electrón una distancia  $D$ . La prueba analítica que muestra la existencia de un campo estático efectivo  $E^*$ , es el conjunto de los cocientes de la Tabla 1, donde el lado izquierdo de cada cociente se calculó de acuerdo a (38) y el lado derecho se obtuvo a partir de simulaciones numéricas de (7). La concordancia entre la ec. (38) y los datos de la Tabla 1 es muy buena y seguramente no hubiera sido posible que surgiera casualmente; por ejemplo, la simulación de la Fig.6(d) para  $\kappa_4$  muestra un periodo efectivo  $\tau_B^*$  que aparentemente “rompe” el carácter monótonamente decreciente

<sup>3</sup>Tal vez sea ilustrativo mencionar que la predicción cuántica de efectos de localización[4] (i.e., inhibición de transporte) en un campo DC-AC de la forma  $E(t) \propto \varepsilon + \alpha \cos \omega t$  ocurre cuando  $\omega_B \neq n\omega$  ( $n$  entero), donde  $\tau_B = eae/h$  es la frecuencia angular de la OB, por lo que es tentador acudir a la imagen intuitiva de relacionar el transporte de corriente con la “condición de resonancia”  $\omega_B = n\omega$ ; obsérvese, sin embargo, que en este caso la frecuencia “natural”  $\omega_B$  es un múltiplo entero de la frecuencia “impulsora”  $\omega$ , y no al revés (tal como ocurre en la teoría usual de los fenómenos de resonancia). De manera muy interesante, cuando  $\varepsilon \rightarrow 0$  y el campo externo es puramente AC, ya no existe una frecuencia “natural” de Bloch ( $\omega_B = 0$ ); en este caso, el electrón se localiza si  $J_0(\alpha/\omega) = 0$ .

de  $\tau_B^*$  como función de  $\kappa$  a medida que ésta aumenta en (37), sin embargo, el valor de  $p = 30$  en (37) da cuenta de dicho comportamiento, pues entre  $\xi_{16}(\kappa_3)$  y  $\xi_{15}(\kappa_5)$  no se puede acomodar ningún índice entero que permita conservar el monotonismo ya referido. Seguramente, el cálculo que permite obtener los valores únicos de  $p$  en (37) está asociado a la verificación de la primera condición en (28), lo que implica integrar (13); este cálculo no sería nada trivial dada de la representación en serie de Fourier (24) y (31). No obstante, en lo que respecta al fenómeno de inhibición del transporte de un electrón cristalino en un campo eléctrico “diente de sierra”, la evidencia numérica de la Tabla 1 puede constituir una buena indicación de la validez de la física que describiría esta clase de fenómenos.

#### REFERENCIAS

- [1] Bouchard A.M., Luban M., *Phys. Rev. B* **52**, 5105 (1995); Ignatov A.A., Romanov Yu., *Sov. Phys. Solid State* **17**, 2216 (1976).
- [2] Bloch F., *Z. Physik* **52**, 555 (1928).
- [3] Lyssenko V. et al., *Phys. Rev. Lett.* **79**, 301 (1997).
- [4] Zhao X., *Phys. Lett. A* **155**, 4, 299 (1991).
- [5] Sanjinés D., Gallinar J.-P., *Phys. Rev. B* **64**, 54301 (2001).
- [6] Magnus W., Winkler S., *Hill's Equation* (Interscience Publishers, New York, 1966).
- [7] Sanjinés D., Gallinar J.-P., *J. Phys.: Cond. Matter* **11**, 3729 (1999).
- [8] Ashcroft N.W., Mermin N.D., *Solid State Physics* (Saunders College, Philadelphia, 1976).
- [9] Alekseev K. et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2669 (1998).
- [10] Leo K., *Semiconductor Sci. Tech.* **13**, 249 (1998).
- [11] Yoshida H., *Phys. Lett. A* **150**, 5 (1990).
- [12] Abramowitz M., Stegun I.A., *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1965).
- [13] Dunlap D.H., Kenkre V.M., *Phys. Rev. B* **34**, 3625 (1986); *Phys. Lett. A* **127**, 438 (1988).
- [14] Dignam M., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 4, 6806 (2002).

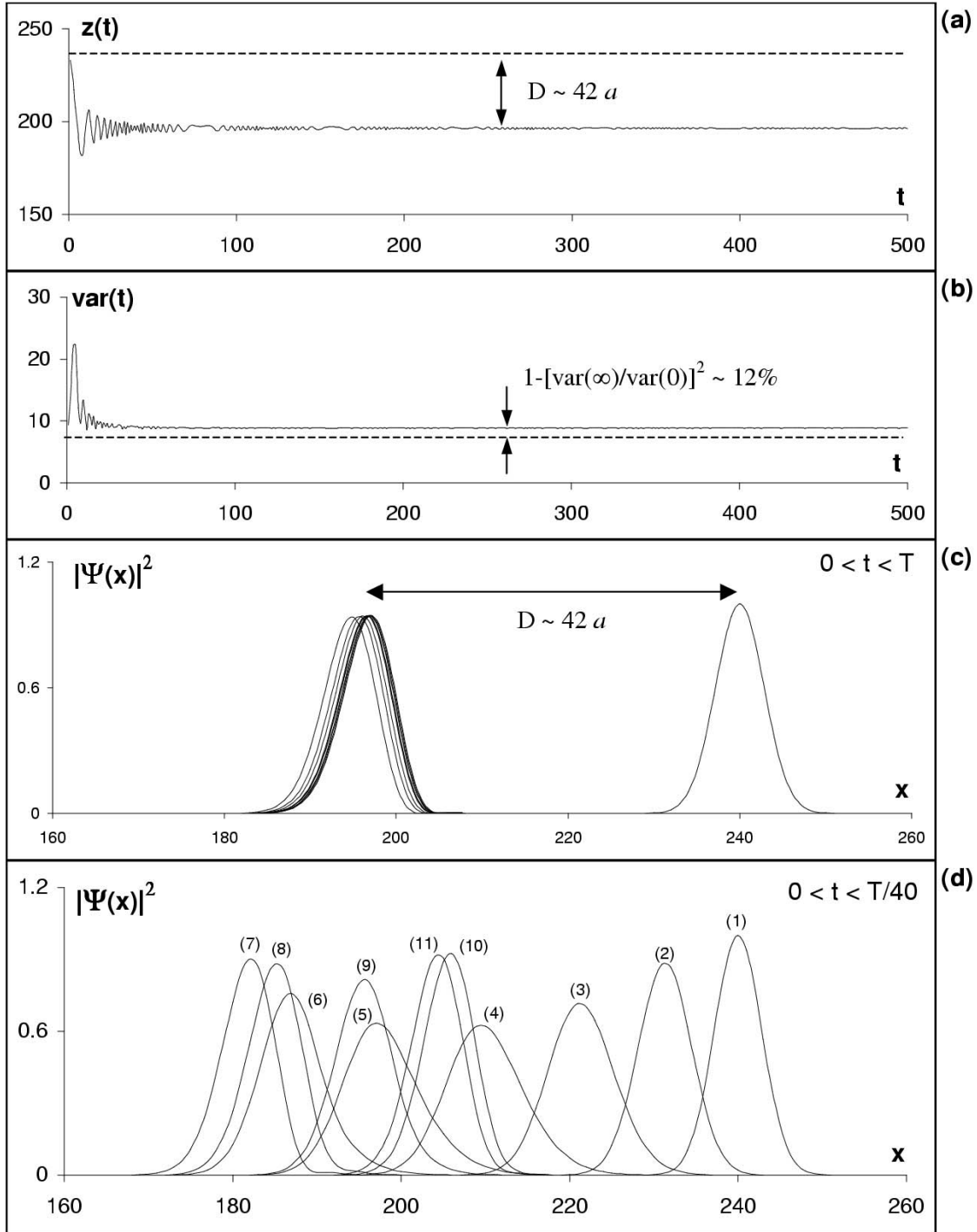


Figura 4. Simulaciones numéricas —de acuerdo a la fórmula iterativa pseudo-espectral (7)— de la dinámica de un paquete de ondas electrónico con velocidad inicial correspondiente a  $\theta_0 = \pi/4$  en (14). El paquete inicial es gaussiano; las unidades de los ejes en todos los casos se eligieron de manera apropiada a cada simulación. En los gráficos (a) y (b) se muestra la posición media  $z(t)$  y la variancia  $var(t) = w^2(t) - z(t)^2$  respectivamente como función del tiempo  $t$ . En los gráficos (c) y (d) se tiene el perfil de la densidad de probabilidad cuántica  $|\Psi(x)|^2$  como función de la posición  $x$ . En (c) se aprecia el fenómeno de localización asintótica para 11 instantes equiespaciados en el intervalo  $[0, T]$ ; en (d) se tiene una secuencia de 11 instantes equiespaciados en el intervalo  $[0, T/40]$  y numerados de manera progresiva, lo que permite observar mejor el proceso de localización asintótica a través de “oscilaciones de Bloch” de amplitud decreciente.



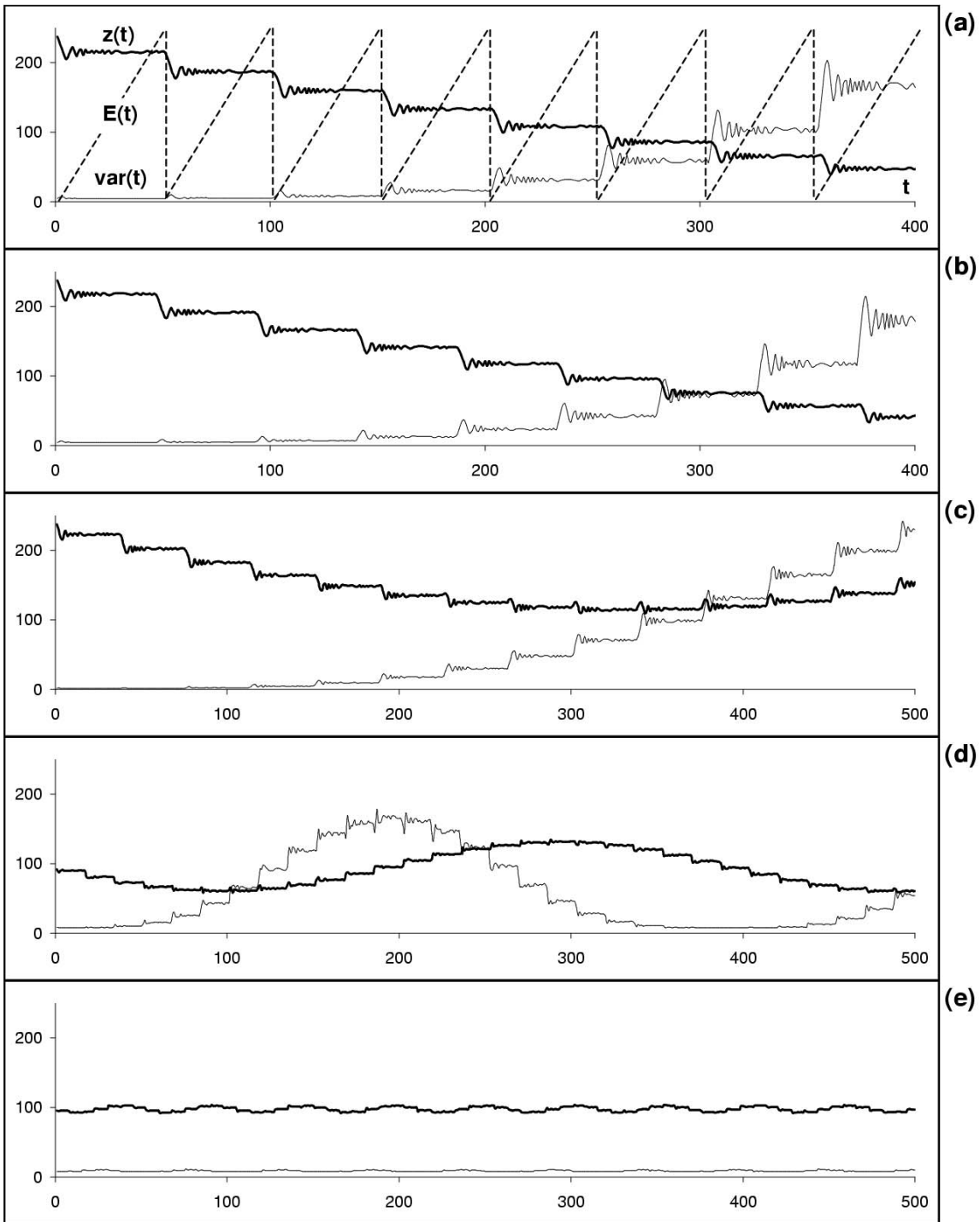


Figura 5. En esta figura se tiene una secuencia de simulaciones para la posición media  $z(t)$  y la varianza  $var(t) = w^2(t) - z(t)^2$  como funciones del tiempo  $t$ . Para  $z(t)$  se utilizó la línea continua gruesa, mientras que para  $var(t)$  se utilizó la línea continua delgada. La línea segmentada en el gráfico (a) representa al campo eléctrico  $E(t)$  “diente de sierra”, donde el periodo  $T$  se calculó según (23). En los siguientes gráficos se incrementó el valor de la pendiente  $\kappa$  de cada diente: (a)  $\kappa = 110$ , (b)  $\kappa = 130$ , (c)  $\kappa = 200$ , (d)  $\kappa = 1000$ , (e)  $\kappa = 5000$ . En (a) y (b) el electrón parece que se transporta en una dirección preferencial; en (c) se nota un punto de retorno en el movimiento del electrón; en (d) y (e) ya es evidente que la dinámica electrónica corresponde un régimen oscilatorio cuya amplitud y periodo disminuyen a medida que aumenta  $\kappa$ , en concordancia cualitativa con lo que se esperaría que suceda en presencia de un campo eléctrico estático efectivo.

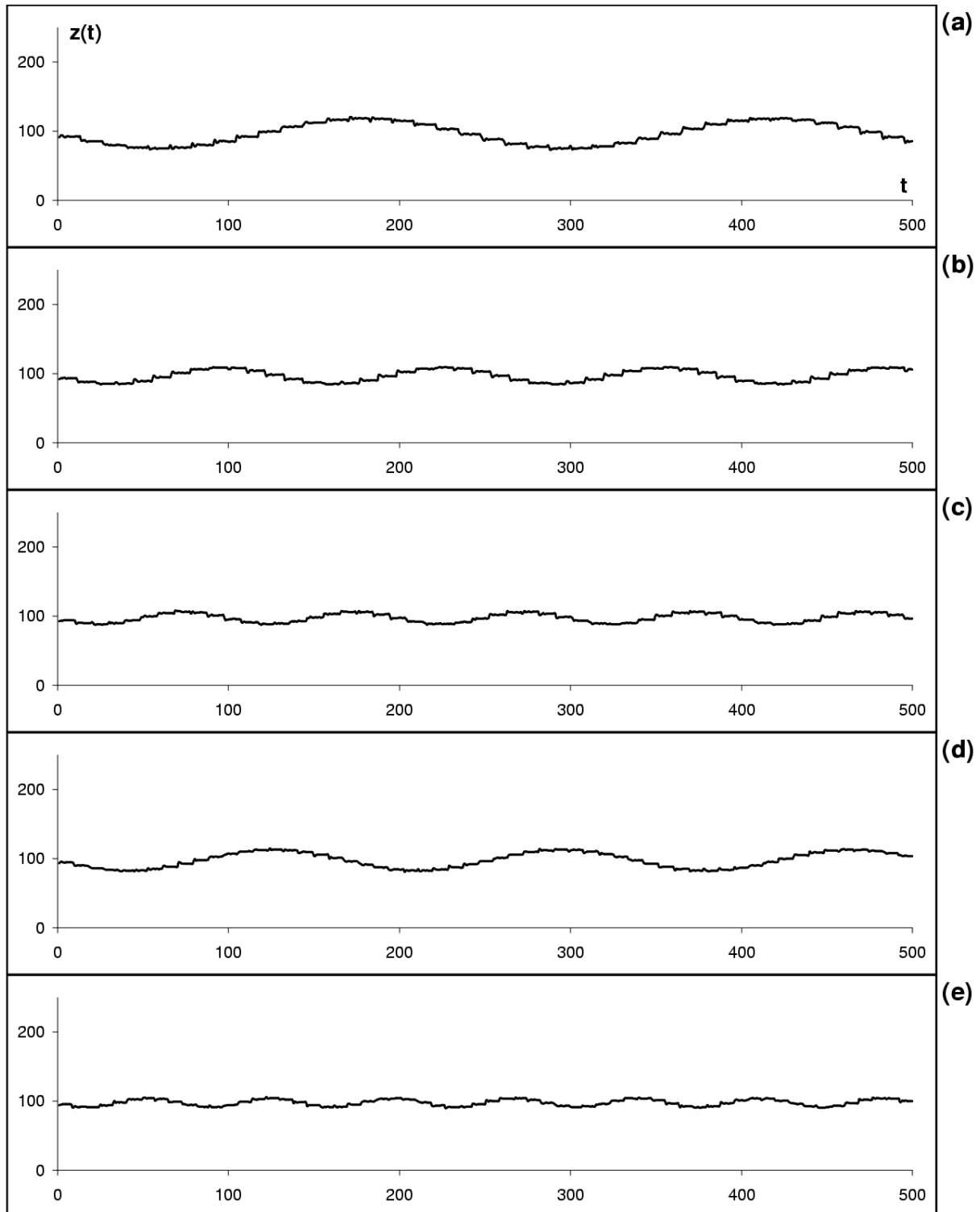


Figura 6. El siguiente conjunto de gráficos representa una “ventana” de valores de  $\kappa$  equidistantes en incrementos de  $\Delta\kappa = 666.67$  entre  $\kappa = 1000$  y  $\kappa = 5000$ , que son los gráficos de las Figs. 5(d) y 5(e). Así, los valores correspondientes de  $\kappa$  son: (a)  $\kappa = 1666.67$ , (b)  $\kappa = 2333.33$ , (c)  $\kappa = 3000$ , (d)  $\kappa = 3666.67$ , (e)  $\kappa = 4333.33$ . El gráfico 6(d) es particularmente curioso, pues “rompe” el carácter monótonamente decreciente del periodo de Bloch efectivo de  $\tau_B^*$  a medida que crece  $\kappa$ , pero los resultados de la Tabla 1 junto con la predicción teórica de la ec. (37) confirman el comportamiento de dicho gráfico.