

## EL PÉNDULO ELÁSTICO CLÁSICO VISTO COMO UN PROBLEMA CUÁNTICO CRISTALINO

Diego Sanjinés C.<sup>1</sup>

Carrera de Física—U.M.S.A.

### RESUMEN

Se estudia la analogía entre el curioso comportamiento dinámico de un péndulo elástico clásico en la llamada “resonancia 2:1”, y el problema espectral cuántico correspondiente a un electrón cristalino que puede encontrarse en lo que equivaldría ya sea a un estado metálico o a un estado aislante, de acuerdo a la teoría de bandas unidimensional en estado sólido. Ambos problemas, clásico y cuántico, pueden describirse bajo un mismo formalismo matemático, que comprende el estudio de la ecuación de Mathieu y sus propiedades analíticas. Como resultado de esta investigación teórica, se encontró que el fenómeno clásico de la “resonancia 2:1” corresponde a un nivel energético prohibido (brecha), lo que implica que el electrón cristalino se encontraría en un estado aislante. En ausencia de esta “resonancia”, el electrón se encontraría en un estado metálico.<sup>(2)</sup>

### 1. INTRODUCCIÓN

El péndulo elástico clásico puede considerarse, en el caso más simple, como un sistema mecánico con dos grados de libertad,  $r$  y  $\phi$  (Fig.1), de tal forma que ambas variables dependen del tiempo simultáneamente. La oscilación correspondiente a  $r(t)$  puede referirse como “modo longitudinal” (o elástico), mientras que la oscilación correspondiente a  $\phi(t)$  será referida como “modo pendular” (o angular). Generalmente, para un valor arbitrario de la masa  $m$ , se encuentra que el péndulo elástico oscila en el modo longitudinal si es excitado inicialmente en ese modo, por ejemplo, a través de las condiciones iniciales

$$r(0) = r_0 + mg/K + \Delta r, \quad \dot{r}(0) = 0, \quad (1)$$

$$\phi(0) \cong 0 \text{ } ^{(3)}, \quad \dot{\phi}(0) = 0,$$

así como también oscila en el modo pendular si es excitado inicialmente en ese modo, por ejemplo, a través de las condiciones iniciales

$$r(0) = r_0 + mg/K, \quad \dot{r}(0) = 0, \quad (2)$$

$$\phi(0) = \phi_0, \quad \dot{\phi}(0) = 0.$$

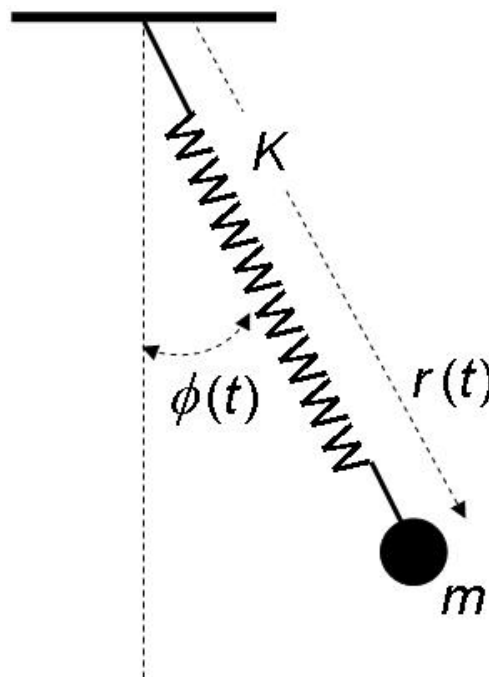


Figura 1. Péndulo elástico en régimen de pequeñas oscilaciones con grados de libertad  $r(t)$  y  $\phi(t)$ .

Sin embargo, para ciertos valores particulares de  $m$ , se da la curiosa condición de que el modo inicialmente longitudinal pasa a ser completamente pendular después de un número de oscilaciones, regresando nuevamente al modo longitudinal. Este comportamiento se repite en forma alternada mientras se va disipando la energía inicial del sistema. Formalmente se dice entonces que para aquellos valores particulares de  $m$ , los modos longitudinal y pendular se acoplan y la energía total del sistema pasa de manera alternada de un modo a otro.

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

<sup>2</sup> La analogía entre los problemas clásico y cuántico tal como se presenta en este trabajo, reviste un interés pedagógico sin un mayor compromiso con predicciones físicas experimentales, en vista de las restricciones teóricas del modelo usado, por ejemplo, la teoría de bandas en una dimensión.

<sup>3</sup> Esta aproximación se refiere a la imposibilidad física real de lograr que el sistema comience a oscilar en forma *exactamente* vertical, lo que tendrá implicaciones relevantes más adelante.

La primera vez que este fenómeno llamó la atención del autor fue en ocasión de un experimento sencillo de laboratorio básico [1] en el que se trata de determinar la constante elástica de un resorte por el método estático y por el método dinámico. Luego de un análisis bibliográfico, se constató que el fenómeno en cuestión ha sido desde hace tiempo un motivo de atención por parte de la comunidad científica. De acuerdo a la bibliografía consultada, el estudio de este fenómeno se remonta desde 1933 [2] hasta trabajos exhaustivos recientes en 2002 [3]. En este periodo, existe una gran cantidad de trabajos que abordan el “extraño” comportamiento del péndulo elástico como una motivación para estudios de gran profundidad en el campo de los sistemas dinámicos. Debe señalarse que en el trabajo reciente de Lynch [3], este autor sugiere una conexión novedosa entre el péndulo elástico y un modelo simple de balance atmosférico, logrando así conectar, de una manera rigurosa, dos problemas físicos de áreas diferentes. Otros artículos como los de Olsson [4], Cayton [5] y Falk [6], son muy pedagógicos y accesibles. En este trabajo se propone otra conexión conceptual, muy interesante y nada trivial, entre otras dos áreas de la física típicamente independientes: los sistemas dinámicos clásicos y la teoría espectral cuántica. Como un antecedente útil para este propósito, se acudirá a una interpretación de la ecuación unidimensional de Schrödinger como un problema dinámico clásico [7], de donde se puede adaptar algunos resultados en lo que sigue.

## 2. EL PÉNDULO ELÁSTICO

La energía cinética de la masa  $m$  en la Fig.1 es

$$T = \frac{1}{2}m (\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2), \quad (3)$$

mientras que la energía potencial  $V$  comprende los términos de energía elástica y energía gravitacional:

$$V = \frac{1}{2}K (r - r_0)^2 - mgr \cos \phi. \quad (4)$$

Las ecuaciones de movimiento se obtienen a partir del formalismo lagrangiano donde  $L = T - V$ :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0, \quad (5)$$

con las variables  $q = r$  y  $q = \phi$ . Aplicando (5) a cada variable, se obtiene el sistema acoplado de ecuaciones no-lineales

$$\ddot{r} - r\dot{\phi}^2 + \alpha r - \beta = 0, \quad (6)$$

$$r\ddot{\phi} + 2\dot{r}\dot{\phi} + g\phi = 0. \quad (7)$$

Para obtener las anteriores ecs. (6) y (7) se supuso la aproximación para pequeñas oscilaciones:  $\sin \phi \cong \phi$ ,  $\cos \phi \cong 1$ , y se definió  $\alpha \equiv K/m$ ,  $\beta \equiv \alpha r_0 + g$ . La simulación numérica de las soluciones de las ecuaciones

(6) y (7) debe reproducir los aspectos cualitativos esenciales del fenómeno de transferencia de energía entre los modos de oscilación longitudinal y pendular. Para ello, investiguemos cuál debe ser el valor particular de la masa  $m$  para el que ocurre dicho fenómeno. Un criterio intuitivo muy sencillo que nos permitirá calcular esa masa es la siguiente condición de resonancia: en cada medio periodo  $T_p$  del modo pendular permítase solamente un número entero  $n$  de periodos  $T_r$  del modo longitudinal, de tal forma que cuando la masa  $m$  se encuentre en los puntos de retorno de su recorrido pendular, coincida con las mismas condiciones iniciales de su oscilación longitudinal. Lo anterior se traduce como  $T_p = 2nT_r$ , donde  $T_p = 2\pi\sqrt{r/g}$  y  $T_r = 2\pi\sqrt{m/K}$ . Combinando las anteriores ecuaciones se obtiene el cociente entre la longitud  $r$  del resorte cargado con la masa  $m$  en su extremo y la longitud  $r_0$  de relajamiento del resorte (sin carga):

$$\frac{r}{r_0} = \frac{4n^2}{4n^2 - 1}. \quad (8)$$

Para el caso de  $n = 1$ , se obtiene  $r/r_0 = 4/3$ , o bien, en términos de las frecuencias angulares,  $\omega_r = 2\omega_p$ . Esta es justamente la condición que debe encontrar la masa  $m$ : ser tal que el cociente de las longitudes del resorte cargado y sin carga sea  $4/3$ , o bien, que la frecuencia natural del modo longitudinal sea el doble de la del modo pendular. Por esta razón, el fenómeno de transferencia de energía entre ambos modos de oscilación puede ser referido como “sistema masa-resorte  $4/3$ ”, o —como es usual en la literatura— “resonancia  $2:1$ ”. A fin de simular numéricamente el sistema de ecuaciones (6) y (7), elijamos las condiciones iniciales (1) para las que el sistema está excitado en el modo longitudinal:

$$\begin{aligned} r(0) &= (\gamma + 1)r_0 + 0,02, & \dot{r}(0) &= 0, \\ \phi(0) &= 0,017, & \dot{\phi}(0) &= 0, \end{aligned} \quad (9)$$

donde  $r$  se mide en metros y  $\phi$  en radianes; además, se definió  $\gamma \equiv r/r_0 - 1$ , de tal forma que la condición de resonancia corresponda a  $\gamma = 1/3$ . El ángulo inicial  $\phi(0) = 1^\circ \cong 0,017$  rad se eligió así para representar una típica desviación vertical muy pequeña al momento de iniciar el modo longitudinal. La interpretación física sugerida es que dicha desviación vertical insignificante se va ampliando a medida que ocurren las oscilaciones longitudinales, siempre que el sistema obedezca la condición de resonancia  $\gamma = 1/3$ . De otra forma, la desviación vertical nunca se amplificó y el sistema permanecerá en el modo longitudinal. Si esta interpretación física es correcta, entonces debe ser posible verificar que, aunque haya resonancia, si  $\phi(0) = 0$ , no habrá desviación vertical alguna que se pueda amplificar (este sería el modo *estrictamente* longitudinal).

En efecto, la simulación numérica mostrada en la Fig.2(a) verifica la predicción señalada para  $\gamma = 1/3$  con la condición inicial (9); se observa claramente la transición entre los modos longitudinal y pendular después

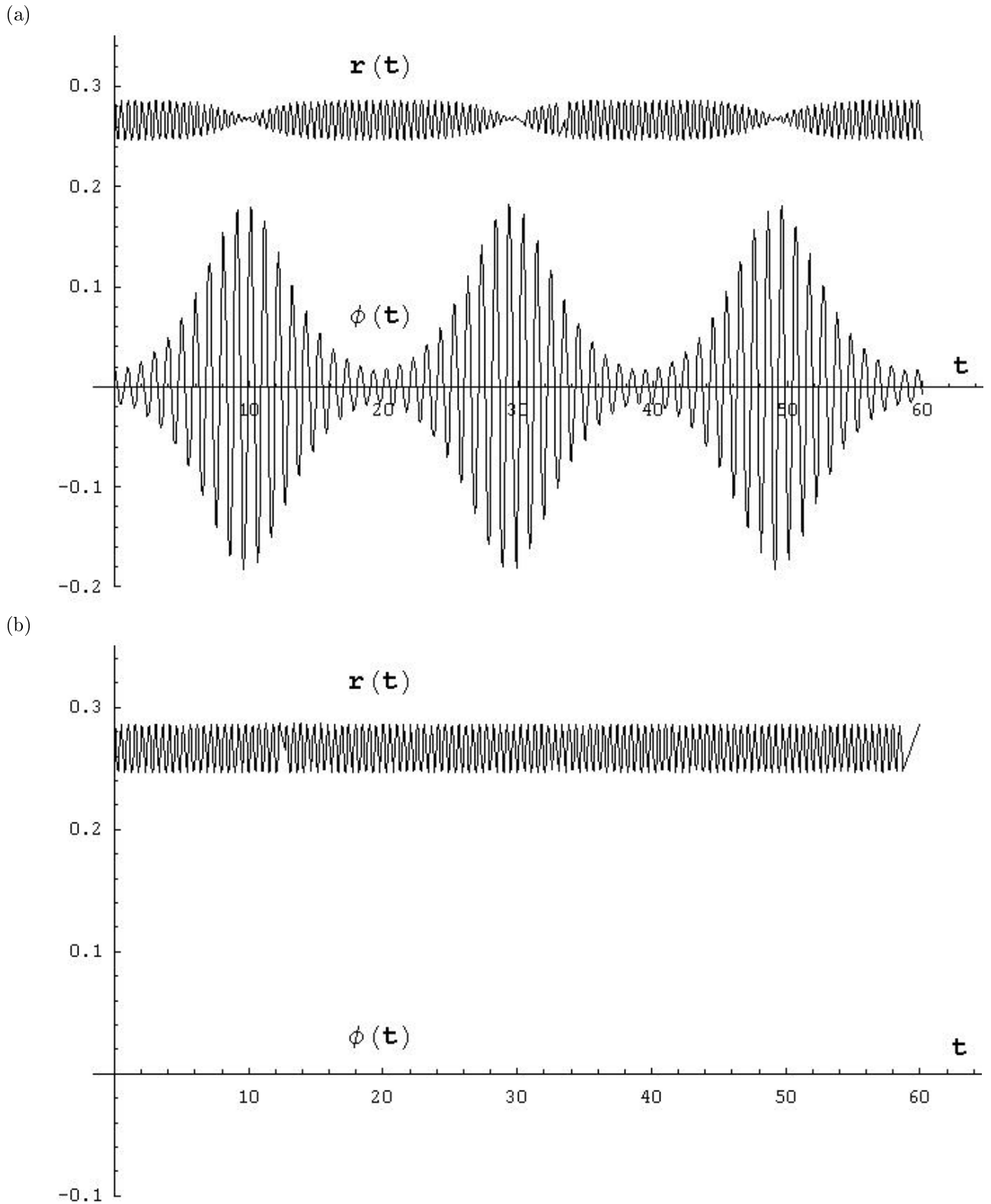
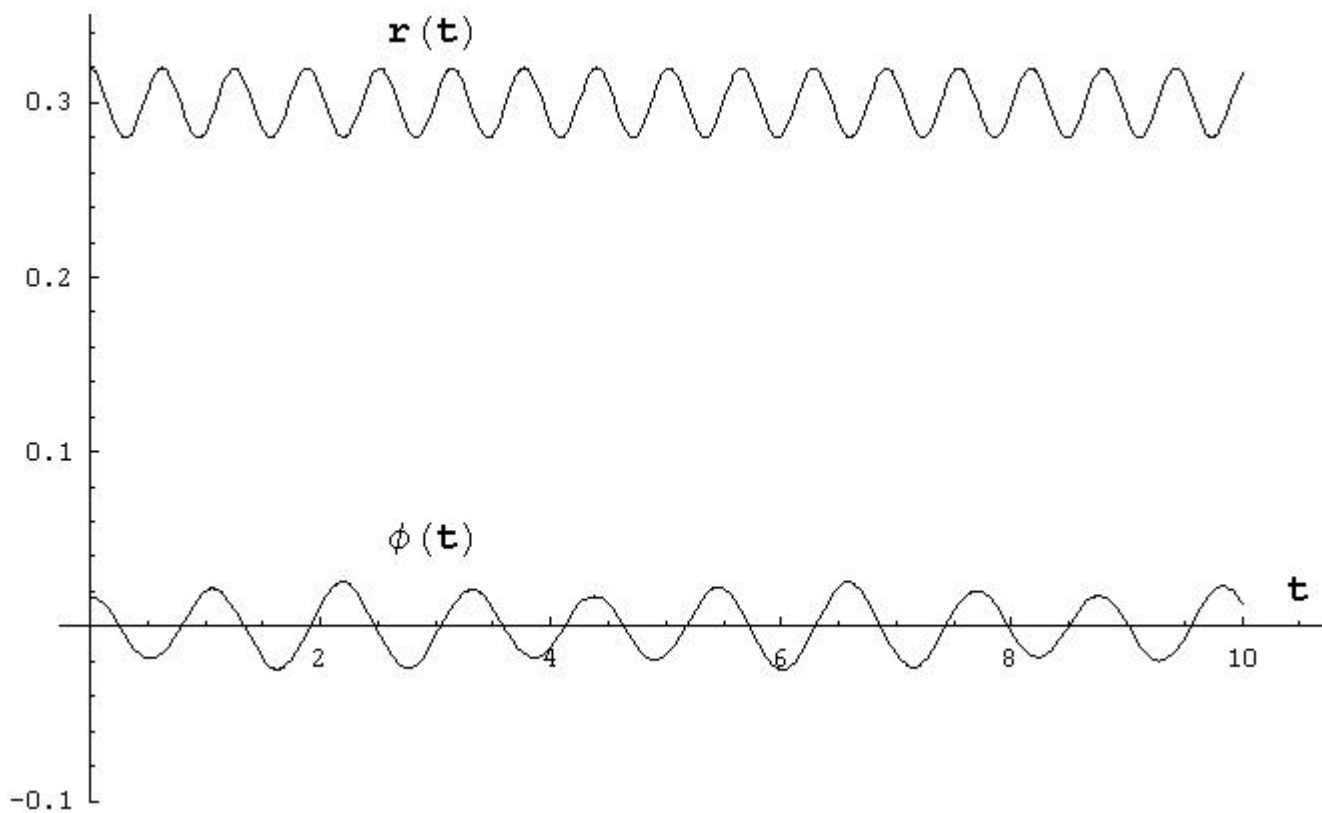


Figura 2. Soluciones numéricas del sistema de ecuaciones (6) y (7). En (a), (c) y (d) las condiciones iniciales están dadas por (9) con valores  $\gamma = 1/3, 1/2, 1/4$  respectivamente, donde  $\gamma = 1/3$  es la condición de resonancia que permite la transición entre los modos longitudinal y pendular. En (b) se tiene en particular  $\phi(0) = 0$  y  $\gamma = 1/3$ , por lo que —aunque haya condición de resonancia— el modo de oscilación permanece en un régimen *estrictamente* longitudinal, i.e.,  $\phi(t) = 0$ . En (c) y (d) los modos también son longitudinales, pero  $\phi(t) \cong 0$  se considera como una pequeña perturbación.

(c)



(d)

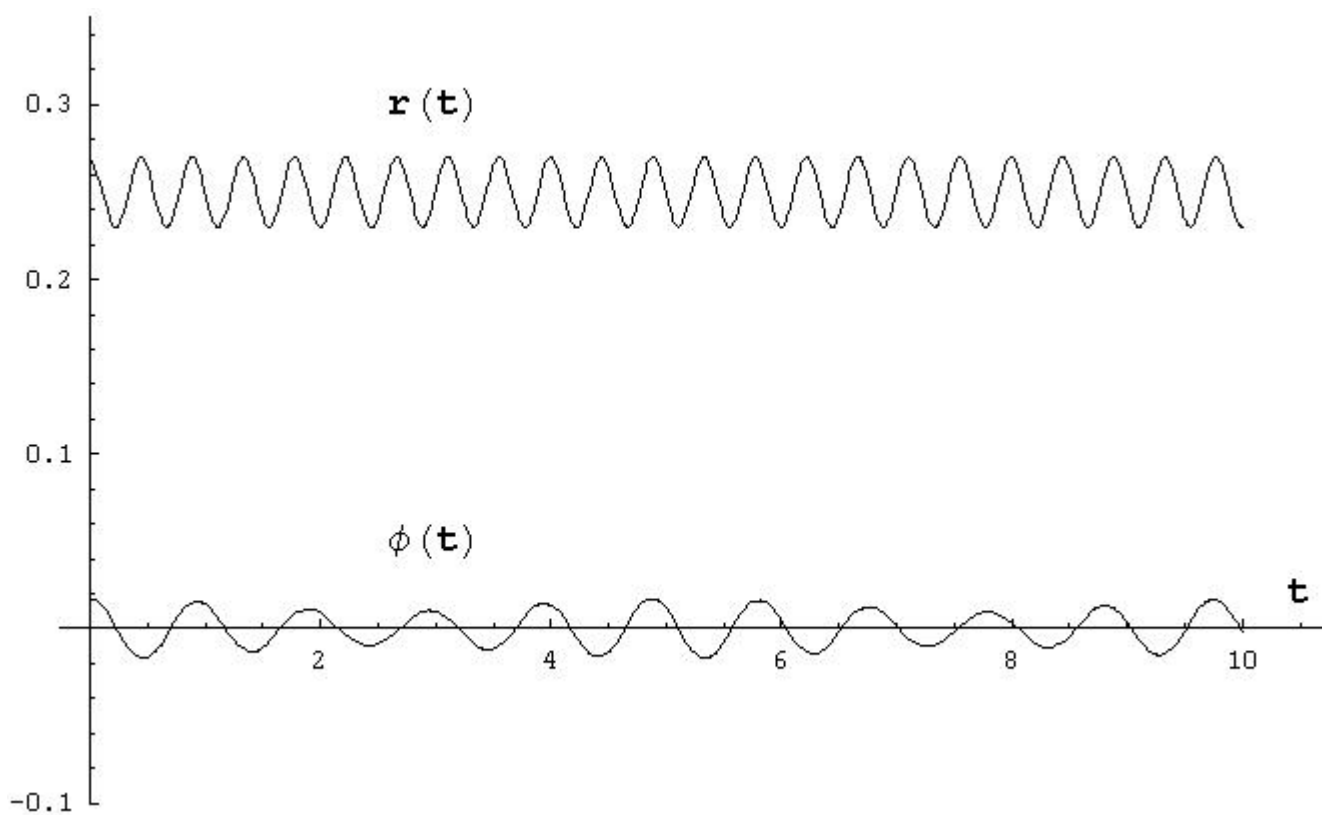


Figura 2. Continuación.

de unas 10 oscilaciones. En la Fig.2(b), debido a que  $\phi(0) = 0$  *exactamente*, no existe una transición entre modos de oscilación, permaneciendo el sistema en el modo *estrictamente* longitudinal. En las Figs.2(c) y (d) se eligió  $\gamma = 1/2$  y  $\gamma = 1/4$  respectivamente, por lo que en ambos casos el modo de oscilación permanece longitudinal aunque se haya elegido  $\phi(0) = 0,017$  rad, es decir, la pequeña desviación vertical no se amplifica pues no se da la condición de resonancia. Así, las oscilaciones pendulares permanecen como pequeñas perturbaciones del modo longitudinal.

Desde el punto de vista de la teoría de sistemas dinámicos, el fenómeno referido en este trabajo corresponde a la llamada “resonancia paramétrica” [8], cuyas características están relacionadas con las propiedades matemáticas de la ecuación de Mathieu. Para ver el origen de esta ecuación en el caso del péndulo elástico, sigamos el tratamiento de Olsson [4]: se quiere describir la proyección horizontal del movimiento de la masa  $m$ , esto es,  $x(t) = r(t) \cos \phi$ , dentro del régimen de pequeñas oscilaciones válidas tanto para el modo longitudinal, como para el modo pendular, es decir,  $r(t) = r_0 + mg/K + \Delta r(t)$ , con  $\Delta r(t) = a \cos(\omega_r t)$ , donde la amplitud  $a$  es una cantidad pequeña. De esta forma se obtiene la ecuación de movimiento para  $x(t)$ :

$$\ddot{x} + (\omega_p^2 - \lambda a \cos \omega_r t) x = 0, \quad (10)$$

con  $\lambda \equiv \omega_s^2 r_0 / r^2$  ( $\lambda$  *no* es una cantidad pequeña). La ecuación (10) es la ecuación de Mathieu —que es, a su vez, un tipo particular de ecuación de Hill [9] [10]—, cuya principal característica es la de ser una ecuación diferencial homogénea de segundo orden con el coeficiente (de  $x$ ) variable de manera armónica. Como lo muestra Lynch [3], la ecuación de Mathieu (10) se puede obtener a partir del sistema de ecuaciones (6) y (7). La teoría de sistemas dinámicos trata ampliamente sobre las propiedades de (10) en lo que concierne a la estabilidad de su solución  $x(t)$ , esto es, a medida que el tiempo  $t$  “avanza”, el valor de  $x(t)$  puede crecer de manera desacetada (inestabilidad) o permanecer acotado dentro de ciertos límites (estabilidad). La condición de inestabilidad es precisamente  $\omega_r = 2\omega_p$ , lo que indica que la masa del péndulo elástico comenzará a realizar recorridos horizontales cada vez mayores, es decir, pasará del modo longitudinal al modo pendular. Sin embargo, ya que las ecuaciones (6) y (7), y por lo tanto (10), son consistentes con el régimen de pequeñas oscilaciones, la inestabilidad de  $x(t)$  o “resonancia paramétrica” del péndulo elástico no será “explosiva”, por lo que el valor de  $x(t)$  aumentará hasta cierto valor máximo, después de lo cual retornará a valores muy pequeños, de acuerdo a la simulación de la Fig.2(a).

### 3. EL ESPECTRO CUÁNTICO CRISTALINO

Considérese el problema de la dinámica de un electrón en presencia del potencial periódico cristalino

unidimensional  $V(x + L) = V(L)$ , con una constante de red  $L$ . Este puede ser el caso de una hetero-estructura de semiconductores formada por capas alternadas de  $GaAs$  y  $Al_x Ga_{1-x} As$  (con  $x = 0,3$ , por ejemplo), donde la constante  $L$  puede ser del orden de cientos de Å. Desarrollos recientes durante los años 90 han permitido dilucidar la verdadera naturaleza de los fenómenos de transporte eléctrico en dichas hetero-estructuras, de los que la oscilación de Bloch es un ejemplo típico [11] [12] [13]. La ecuación de Schrödinger para una partícula en presencia del potencial periódico  $V(x) = V_0 \cos(2\pi x/L)$  es

$$\partial_x^2 \Psi + (2m/\hbar^2) (E - V_0 \cos \pi x) \Psi = 0, \quad (11)$$

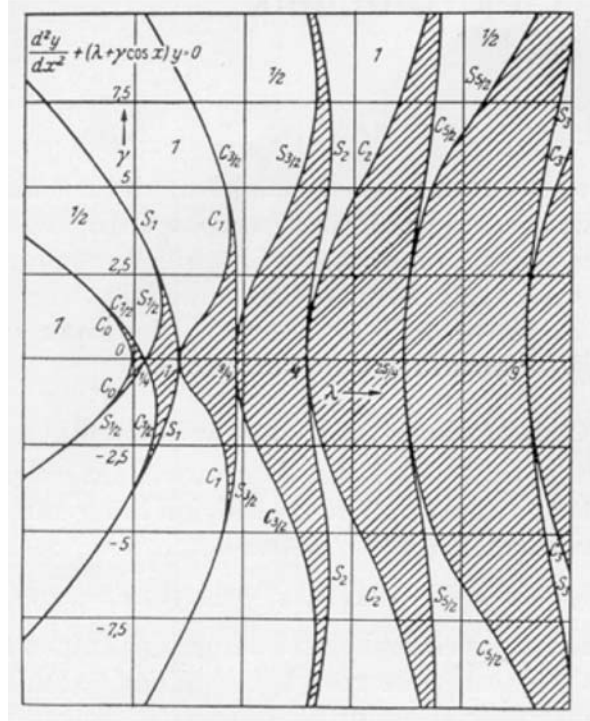
donde no se considera la dependencia de la masa efectiva  $m = m^*$  de la forma explícita de la banda  $\varepsilon(k)$ , i.e.,  $m^* = \hbar^2 (\partial_k^2 \varepsilon(k))^{-1}$ , con una estructura de bandas  $\varepsilon(k)$  que se puede calcular para un modelo dado de hamiltoniano, e.g., el modelo de enlace fuerte (*tight-binding*) [14]. Otro modelo de hamiltoniano puede ser el de BenDaniel-Duke [15] que toma en cuenta la dependencia de la masa efectiva con la posición.

La ecuación de Schrödinger (11) también es un ejemplo de ecuación de Mathieu formalmente análoga a (10) después de identificar las correspondencias entre las variables físicas. Así, (11) también estaría sujeta a una interpretación en términos de “estabilidad”: las únicas soluciones físicamente relevantes de (11) son las funciones de onda  $\Psi(x)$  acotadas, que pueden ser interpretadas en términos de densidades de probabilidad finitas dadas por  $\Psi^* \Psi = |\Psi|^2$ . Tal condición de “estabilidad” se logra al elegir los parámetros adecuados  $E$  y  $V_0$  en (11). El gráfico que muestra los posibles valores del par ordenado  $(E, V_0)$  que conduce a soluciones estables de (11) se denomina “diagrama de Strutt”, y es conocido en el dominio de los sistemas dinámicos desde principios del siglo XX. La Fig.3(a) muestra este diagrama que es formalmente idéntico al de cualquier texto típico, por ejemplo, Bender-Orszag [8]. En este caso, la ecuación de Mathieu es  $y'' + (\lambda + \gamma \cos x)y = 0$ ; así, el diagrama de estabilidad con ejes  $\gamma$  (vertical) y  $\lambda$  (horizontal) muestra las zonas de estabilidad (sombreadas) y las zonas de inestabilidad (sin sombreado). La construcción de este tipo de diagramas es un asunto complejo pues no existe una forma analítica compacta para representar las curvas que definen las zonas de estabilidad. El diagrama de la Fig.3(a) se construyó por zonas específicas en las que se obtiene soluciones particulares de la ecuación de Mathieu por técnicas perturbativas [9]. Sin embargo, existe una forma analítica de obtener, de manera aproximada, las zonas de la Fig.3(a): el potencial  $V(x') \equiv V_0 \cos(\pi x')$  con  $x' \equiv 2x/L$  en (11) se puede *segmentar* como

$$\begin{aligned} V(x') &= V_0, & x' &\in [0, 1); \\ V(x') &= -V_0, & x' &\in [1, 2). \end{aligned} \quad (12)$$

Con este potencial constante por tramos, se aplica la teoría de estabilidad de sistemas dinámicos [7] a fin

(a)



(b)

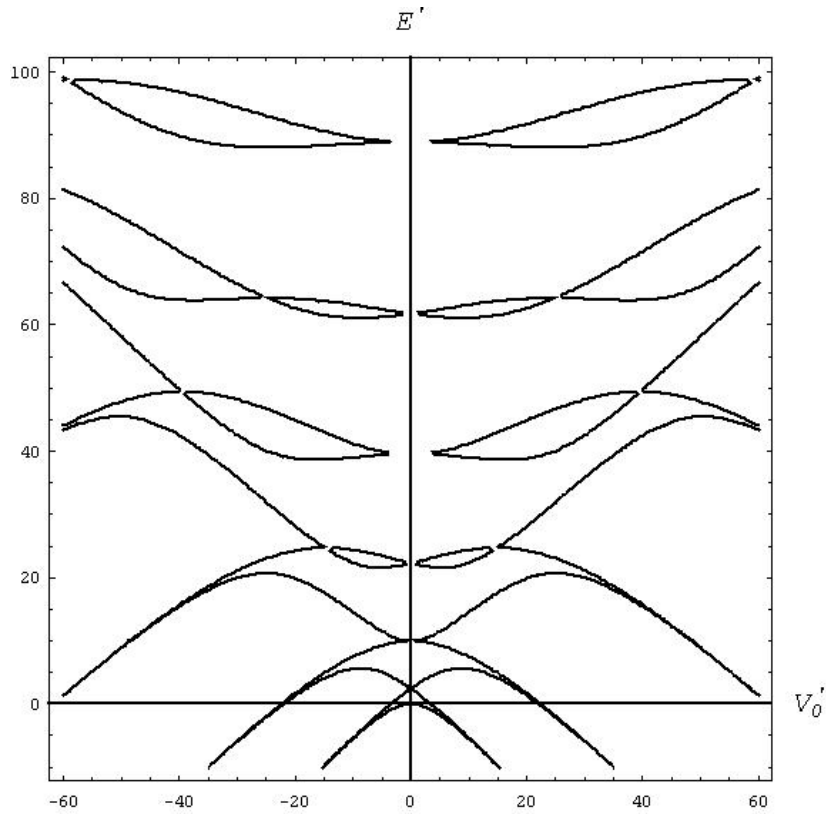


Figura 3. (a) Diagrama de Strutt para la ecuación de Mathieu  $y'' + (\lambda + \gamma \cos x)y = 0$ , donde las regiones sombreadas corresponden a los parámetros  $\lambda$  y  $\gamma$  que conducen a un régimen *estable* de la solución  $y(x)$  de dicha ecuación. En (b) se muestra el diagrama de estabilidad correspondiente a la ecuación de Schrödinger (11) donde el potencial  $V_0 \cos \pi x$  se segmentó de acuerdo (12), aproximándolo así por un modelo de Krönig-Penney. La similitud entre las primeras dos “lenguas” de estabilidad en torno al origen de coordenadas en ambos gráficos (después de rotar (a)  $\pi/2$  en sentido antihorario) es suficientemente buena para el propósito de este trabajo.

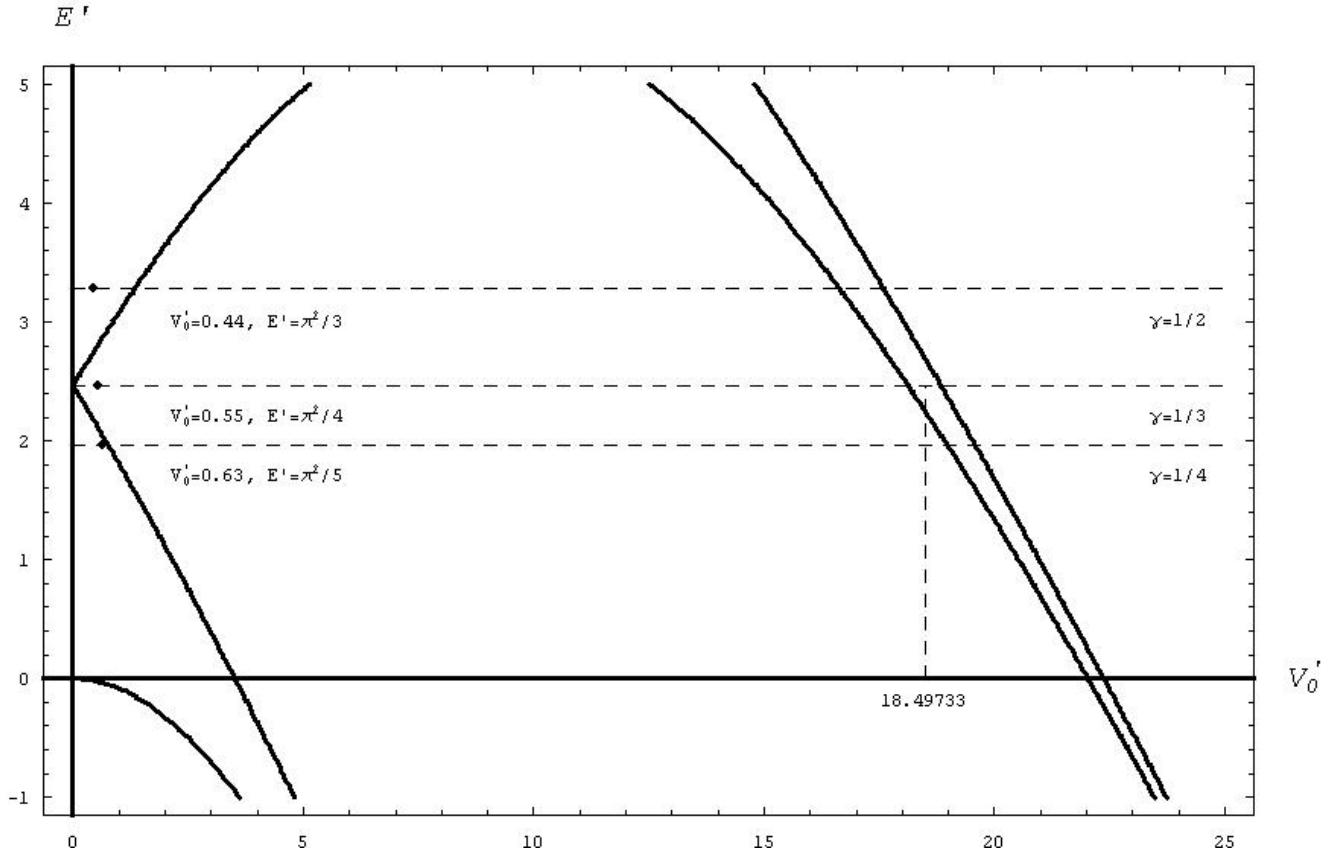


Figura 4. Ampliación de la Fig.3(b) mostrando el detalle de la región en torno a  $E' = (\pi/2)^2$  y valores pequeños de  $V_0'$ . Las líneas horizontales segmentadas representan (de arriba hacia abajo) a los valores del parámetro “clásico”  $\gamma$  de las Figs.2(c), (a), (d); dichos valores corresponden, en el problema cuántico, a los puntos mostrados: el primero y el tercero reflejan un estado metálico y el segundo un estado aislante.

de obtener la “función traza”  $S(E', V_0')$  dependiente de las variables adimensionales  $E' \equiv (mL^2/2\hbar^2)E$  y  $V_0' \equiv (mL^2/2\hbar^2)V_0$ . El resultado es

$$S(E', V_0') = 2 \cos \sqrt{E' + V_0'} \cos \sqrt{E' - V_0'} - \frac{2E'}{\sqrt{E'^2 - V_0'^2}} \sin \sqrt{E' + V_0'} \sin \sqrt{E' - V_0'} \quad (13)$$

de tal forma que la condición  $S(E', V_0') = \pm 2$  define las curvas separatrices que dividen las zonas de estabilidad de las zonas de inestabilidad (Fig.3(b)). Para los efectos que interesan en este trabajo, los valores de  $E'$  y  $V_0'$  son suficientemente pequeños y comprenden la zona entre las primeras dos “lenguas” cerca del eje vertical. Como se puede ver, en esta zona la similitud entre las Figs.3(a) y (b) (girada esta última  $\pi/2$  en el sentido antihorario) es suficientemente buena. Esto significa que alrededor de  $\gamma = 0$  (Fig.3(a)) las curvas separatrices entre las primeras dos “lenguas” de estabilidad se aproximan a las dos rectas  $\gamma = \pm(2\lambda - 1/2)$ ; si se traslada este resultado a los ejes  $E' - V_0'$  asociados a (11) se obtiene  $E' = (\pi/2)^2 \pm V_0'/2$ . Ello se compara al desarrollo en series de (13) en torno a  $E' = (\pi/2)^2$  y  $V_0' = 0$  que da por resultado la ecuación  $E' = (\pi/2)^2 \pm (2/\pi)V_0' \cong (\pi/2)^2 \pm 0,64V_0'$

para dichas rectas separatrices, y esto es lo que se observa en la Fig. 4.

En la teoría del estado sólido, el potencial constante por tramos dado en (12) constituye el modelo de Krönig-Penney. Al elegir un valor fijo de  $V_0'$  en la Fig.3(b), vemos que existen zonas continuas de valores “permitidos” de  $E'$  para los que se tiene soluciones acotadas de la función de onda cuántica  $\Psi(x)$ ; entre dos zonas “permitidas” están las zonas “prohibidas” de valores de  $E'$ . Esta imagen corresponde justamente al modelo unidimensional de bandas (zonas permitidas) y brechas (zonas prohibidas) usual en los libros de texto (ver, por ejemplo, Mermin-Ashcroft [14] o Gasiorowicz [16]). Formalmente, se dice pues que los valores “permitidos” de  $E$  en (11) constituyen el espectro (o conjunto resolvente) del hamiltoniano cristalino asociado a un potencial periódico.

#### 4. EL PÉNDULO ELÁSTICO CLÁSICO VISTO COMO UN PROBLEMA CUÁNTICO CRISTALINO

En vista de la analogía matemática de los problemas clásico y cuántico ya referidos a través de las ecs.

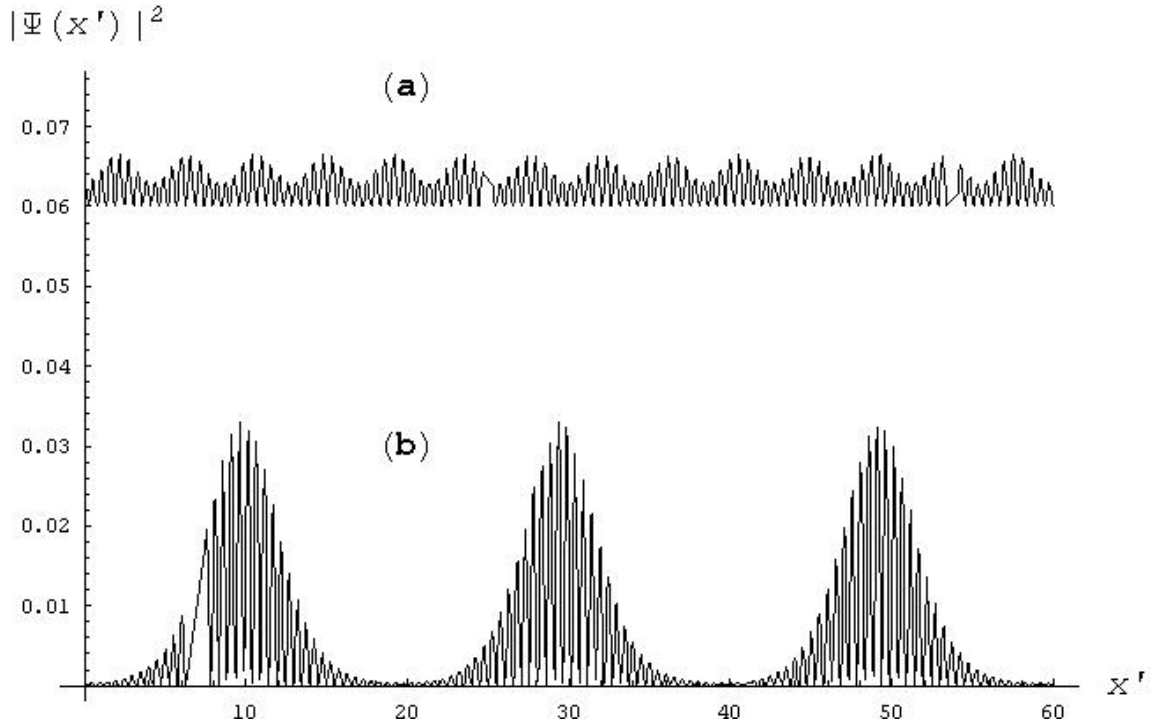


Figura 5. Diagramas de densidad de probabilidad cuántica  $|\Psi(x')|^2$  para: (a) el estado metálico ( $\gamma = 1/2$ ) y (b) el estado aislante ( $\gamma = 1/3$ ) de la Fig.4. Para efectos de comparación con (b), el gráfico en (a) se reescaló según  $0,06 + 10|\Psi(x')|^2$ , pues de otro modo éste es apenas perceptible.

(10) y (11) respectivamente, examinaremos a continuación las consecuencias del fenómeno de resonancia 2:1 del péndulo elástico, en el contexto del problema cuántico cristalino. ¿Qué significa pues la condición de resonancia  $\omega_r = 2\omega_p$  al aplicarse a (11)? Bien, esto se traduce en (11) como un valor de  $E' = (\pi/2)^2 \cong 2,4674$ . Este valor se puede obtener como parte de un resultado más general: de acuerdo a la teoría de sistemas dinámicos [4], las soluciones de (10) son inestables siempre que  $\omega_r = (2/n)\omega_p$  para  $n = 1, 2, 3, \dots$ , lo que traducido al problema cuántico en (11) significa  $E' = (n\pi/2)^2$ . Estos valores de  $E'$  son muy particulares en la Fig.4 pues corresponden a las soluciones de  $S(E', 0) = \pm 2$  de acuerdo a (13), esto es, los puntos de intersección de las “lenguas” de estabilidad con el eje vertical  $V'_0 = 0$ . De acuerdo a Olsson [4], solamente el valor  $n = 1$  tiene sentido físico, por lo que examinaremos la vecindad de la recta  $E' = (\pi/2)^2$  y el eje vertical  $V'_0 = 0$  en la Fig.4; para ello se amplió esta zona de la Fig.3(b).

Recordemos que en la simulación de la Fig.2(a), se tiene  $r(t)$  y  $\phi(t)$  para la condición de resonancia  $\omega_r = 2\omega_p$  o, de manera equivalente,  $\gamma = 1/3$ . A partir de esto, se puede construir la simulación de la proyección horizontal  $x(t) \propto \sin \phi(t)$  en (10) y luego  $x(t)^2 \propto \sin^2 \phi(t)$ . En vista de la analogía entre (10) y (11), el gráfico de  $x^2(t)$  corresponde a la función cuántica de densidad de probabilidad  $|\Psi|^2$ . Esto es lo que se muestra en la Fig.5(b), mientras que en la Fig.5(a) la magnitud de la función  $|\Psi|^2$  nunca crece apreciablemente, y por ello se la tuvo

que ampliar para compararla con (b) en el mismo gráfico. Lo anterior tiene una interpretación física interesante: en la Fig.5(b) se tiene una distribución casi-discreta de zonas de mayor densidad de carga, lo que significa que allí los portadores de carga se localizan y por lo tanto el cristal unidimensional se comportaría como un aislante eléctrico. Esta afirmación obedece a un criterio más bien cualitativo, pues las zonas de mayor densidad de carga eléctrica ( $\rho = -e|\Psi|^2$ ) están claramente separadas entre sí, lo que se puede asociar a una integral de solapamiento muy pequeña y, en consecuencia, a un estado aislante (esto se ilustra muy bien en la deducción de la teoría de bandas a partir del modelo de enlace fuerte [14]). Dichas zonas de localización surgen como resultado de una simulación numérica, en completa consistencia con la condición de resonancia clásica  $\gamma = 1/3$  que corresponde a la recta  $E' = (\pi/2)^2$  en el diagrama de estabilidad de la Fig.4. Como se ve, para valores pequeños de  $V'_0$ , esta recta nunca pasa por bandas o zonas permitidas, por lo que el cristal siempre se comportaría como un aislante eléctrico. El valor  $V'_0 = 0,55$  que se indica en esta figura corresponde al régimen de la Fig.5(b) que sugiere dicho estado aislante. Solamente para este valor particular de  $E'$  independientemente del valor de  $V'_0$  se tendría siempre un estado aislante, mientras que para otros valores de  $E'$ , a medida que  $V'_0$  aumenta, se pasa de un estado metálico a uno aislante. Por otra parte, en la Fig.5(a), se tiene una distribución prácticamente uniforme de la densidad de probabilidad  $|\Psi|^2$ , lo que significa que los portadores de carga están deslocalizados de manera uniforme a lo largo



del cristal, y por lo tanto pueden conducir electricidad. Esto sucede para  $\gamma = 1/2$ , que corresponde a la recta  $E' = \pi^2/3 \cong 3,2898$ . Como se ve en la Fig.4, para valores pequeños de  $V'_0$  dicha recta pasa por una región de estabilidad (banda), lo que significa que el cristal se comportaría como un conductor eléctrico. El valor  $V'_0 = 0,44$  que se indica en esta figura corresponde al régimen de la Fig.5(a) que sugiere dicho estado metálico; consistentemente, vemos que el punto  $V'_0 = 0,44$  se halla dentro de una región de estabilidad. De manera similar, el punto  $E' = \pi^2/5$ ,  $V'_0 = 0,63$ , también refleja un estado metálico que corresponde al modo longitudinal simulado en la Fig.2(d). Un punto en particular que llama la atención en la Fig.4 es  $E' = \pi^2/4$ ,  $V'_0 = 18,49733$ , que al encontrarse dentro de una “lengua” de estabilidad indicaría un estado metálico. Pero este no es el caso, pues dicho punto indicaría que  $r(t) = (r_0 + mg/K)(1 + 2,5 \cos \Omega t)$  en el problema clásico, y ésta no es una solución válida de las ecs. (6) y (7) al no estar comprendida en el régimen de pequeñas oscilaciones, i.e.,  $2,5 |\cos \Omega t|_{max} > 1$  (con  $\Omega$  la frecuencia angular del modo longitudinal).

Desde el punto de vista físico, el conjunto de los valores permitidos de  $E'$  tales que  $|S(E', V'_0)| \leq 2$  en (13) constituyen las bandas o intervalos energéticos que, para los metales, contienen a la energía de Fermi  $\varepsilon_F$ ; ésta se calcula como una función de la densidad de átomos  $n$ . Por otra parte, los intervalos de valores prohibidos de  $E'$  constituyen las brechas (*energy gaps*) de tal forma que para los aislantes, la densidad de átomos  $n$  conduce a un valor correspondiente de  $E'$  que se encuentra dentro de una de estas brechas, siendo el ancho de la brecha suficientemente grande como para inhibir la promoción de portadores entre bandas contiguas, por ejemplo, por absorción de fotones térmicos. Debe aclararse que el modelo de cristal unidimensional supuesto en este trabajo conduce a resultados que pueden ser bastante diferentes de los de un caso real en tres dimensiones; por ejemplo, la energía de Fermi en el modelo unidimensional es proporcional al cuadrado de la densidad lineal de átomos:  $\varepsilon_F \propto n^2$ , mientras que en tres dimensiones se sabe que  $\varepsilon_F \propto n^{2/3}$ , con  $n$  igual a la densidad volumétrica de átomos. No obstante, algunos autores [16] [14] aún consideran que la teoría de bandas en una dimensión es lo suficientemente pedagógica como para dilucidar varios aspectos cualitativos esenciales de la dinámica electrónica en cristales o —recientemente— en hetero-estructuras de semiconductores [11] [12].

Como una conclusión general de este trabajo se puede decir que, dentro de las aproximaciones supuestas, para una densidad lineal de átomos arbitraria  $n$ , cuando crece la altura  $V_0$  de las barreras de potencial en (12) a partir de valores pequeños (Fig.4), entonces generalmente se pasa de un estado metálico a un estado aislante, excepto cuando  $n \propto \sqrt{E'} = \pi/2$ , en cuyo caso siempre se tiene un estado aislante para cualquier valor de  $V_0$  (<sup>4</sup>). Ciertamente  $V_0$  no suele ser un parámetro que se pueda controlar experimentalmente a voluntad, pues depende

esencialmente de la naturaleza química del cristal, pero la suposición de  $V_0$  variable puede tomarse —en este trabajo— como una buena oportunidad de realizar un ejercicio pedagógico interesante, por ejemplo, suponiendo, de manera equivalente, un ancho de brecha  $E_g$  variable, pues como se ve en la Fig.4,  $E_g \propto V_0$ .

## REFERENCIAS

- [1] Figueroa D. *et al.*; *Laboratorio de Física I*, p.1-06.7, Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela (Equinoccio, 2000).
- [2] Vitt A., Gorelik G.; *Swinging of an elastic pendulum as an example of two parametrically coupled linear oscillation systems*, J. Tech. Phys. **3**, 2-3, 294 (1933).
- [3] Lynch P.; *The swinging spring: a simple model of atmospheric balance*, Geometric Methods and Models (vol.II): Large Scale Atmosphere Ocean Dynamics (Norbury J., Roulstone I., eds., Cambridge Univ. Press, 2002).
- [4] Olsson M.G.; *Why does a mass on a spring sometimes misbehave?*, Am. J. Phys. **44**, 12, 1211 (1976).
- [5] Cayton T.; *The laboratory spring-mass oscillator: an example of parametric instability*, Am. J. Phys. **45**, 8, 723 (1977).
- [6] Falk L.; *Recurrence effects in a parametric spring pendulum*, Am. J. Phys. **46**, 11, 1120 (1978).
- [7] Sanjinés D.; *Ecuación unidimensional de Schrödinger como un problema dinámico clásico*, Revista Boliviana de Física **8**, 1 (2002); Rev. Mexicana de Física **36** (S1), 181 (1990).
- [8] Arnold V.I.; *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (Springer-Verlag, 1978).
- [9] Bender C., Orszag S.; *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers*, International Series in Pure and Applied Mathematics (McGraw-Hill, 1978).
- [10] Magnus W., Winkler S.; *Hill's Equation*, Interscience Tracts in Pure and Applied Mathematics vol. 20 (Wiley, 1966).
- [11] Mendez E., Bastard G.; *Wannier-Stark ladders and Bloch oscillations in superlattices*, Phys. Today (Junio, 1993).
- [12] Bouchard A., Luban M.; *Bloch oscillations and other dynamical phenomena of electrons in semiconductor superlattices*, Phys. Rev. B **52**, 7, 5105 (1995).
- [13] Lyssenko V. *et al.*; *Direct measurement of the spatial displacement of Bloch-oscillating electrons in semiconductor superlattices*, Phys. Rev. Lett. **79**, 2, 301 (1997).
- [14] Ashcroft N.W., Mermin N.D.; *Solid State Physics* (Saunders College, 1976).
- [15] BenDaniel D.J., Duke C.B.; Phys. Rev. **152**, 683 (1966).
- [16] Gasiorowicz S.; *Quantum Mechanics* (Course of Theoretical Physics, vol. 3, Pergamon Press, 1977).

<sup>4</sup>Si se convierte los valores de  $E'$  y  $V'_0$  para este estado en unidades físicas, ello corresponde aproximadamente a 38 eV para la “altura” de mitad de brecha y 12 eV para el ancho de brecha  $E_g$ ; este último valor es consistente con los valores típicos  $E_g > 2$  eV para la mayoría de los aislantes.